
RUNGE-KUTTA METODO INPLIZITU SINPLEKTIKOEN
INPLEMENTAZIO ERAGINKORRA,
EGUZKI-SISTEMAREN SIMULAZIORAKO
APLIKAZIOAREKIN.

Mikel Antonana Otano

Konputazio Zientzia eta Adimen Artifiziala Saila
Informatika fakultatea

eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

Doktorego tesia
Donostia 2017

Zuzendariak

Ander Murua Uria
Joseba Makazaga Odria

Konputazio Zientzia eta Adimen Artifizial Saila
Euskal-Herriko Unibertsitatea

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

Vaclav Havel

Hitzaurrea

Eskuartearen duzun ikerketa hau, bide luze baten emaitza da. Hitzaurre honetan, ez naiz gehiegi luzatuko eta soilik, irakurlea animatu nahiko nuke. Tesiaren izenburua, ziurrenik ez da oso erakargarria baina irakurleak aurrera jarraitzea erabakitzen badu, ez da damutuko. Kontzeptu batzuk ulertzeko zailak izan daitezkeela badakigu, baina lan honetan batez ere irudimena aplikatu dugu eta oinarrian, ekarpenak sinpleak dira.

Ikerketaren nire esperientzia azaldu nahiko nuke eta horretarako, gustuko dudan bi ideietan lagunduko naiz. Batetik, Bernardo Atxagari entzundako elkarrizketa batean, zientziarekin zuen harremanari buruzko galderi erantzunez zera esan zuen: "zientziarekin dudan harremana, zopa beroarekin dudan harreman bera da, kutxara zoparen erdi-erdian sartu beharrean, ertzetara jotzen dut eta hortxe sartzen dut nire kutxara txikia". Bestetik, Elena Cattaneo ikerlari italiarrak Donostian emandako hitzaldi batean, ikerketa, desertuan egotearekin parekatu zuen: "lur eremu zabal-zabal baten aurrean aurkitzen zara, nora jo ez dakizun leku batean eta ikusten duzun gauza bakarra, denborak ia ezabatutako norbaiten arrasto batzuk. Nire ustez, bi analogia hauek ezin hobeto deskribatzen dute zer den zientzia eta ikerketa.

Bukatzeko, Ander eta Josebari beraien ikerketan lan egiteko aukera ematea eskertu nahi diet. Ikerketa honetan, batzuetan gauzak ondo joan zaizkigu eta beste batzuetan ez dugu asmatu, baina garrantzitsuena da, lan zintzoa aurrera eramane dugula.

Mikel Antonana Otano
2017

Gaien Aurkibidea

| | |
|-------------------------------------------------------|-----------|
| I. Sarrera | 1 |
| 1. Ikerketa | 3 |
| 1.1. Ikerketaren testuingurua | 3 |
| 1.2. Motibazioa | 4 |
| 1.3. Helburua eta esparrua | 5 |
| 1.4. Ekarpinak | 7 |
| 1.5. Tesiaren egitura | 10 |
| II. Oinarriak | 11 |
| 2. Zenbakizko integratzaile sinplektikoak | 13 |
| 2.1. Sarrera | 13 |
| 2.2. Zenbakizko integrazio metodoak | 13 |
| 2.3. Runge-Kutta metodo sinplektikoak | 22 |
| 2.4. Konposizio eta splitting metodoak | 31 |
| 2.5. Laburpena | 38 |
| 3. Problemak | 39 |
| 3.1. Sarrera | 39 |
| 3.2. Pendulu bikoitza | 40 |
| 3.3. N-Gorputzen problema | 43 |
| 3.4. Eguzki-sistema | 45 |
| 3.5. Laburpena | 49 |
| 4. Koma higikorreko aritmetika | 53 |
| 4.1. Sarrera | 53 |
| 4.2. <i>IEEE-754</i> estandarra | 53 |
| 4.3. Biribiltze errorea | 56 |
| 4.4. Biribiltze errorea gutxitzeko teknikak | 59 |
| 4.5. Laburpena | 62 |

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| III. Ekarpenak. | 63 |
| 5. IRK: Puntu-finkoaren iterazioa | 65 |
| 5.1. Sarrera | 65 |
| 5.2. Hairer-en implementazioa | 66 |
| 5.3. Gure implementazioa | 68 |
| 5.4. Zenbakizko esperimentuak | 79 |
| 5.5. Laburpena | 87 |
| 6. IRK: Newtonen Iterazioa | 89 |
| 6.1. Sarrera | 89 |
| 6.2. IRK-Newton estandarra | 90 |
| 6.3. IRK-Newton eraginkorra | 95 |
| 6.4. IRK-Newton estandarra (formulazio berria) | 103 |
| 6.5. IRK-Newton eraginkorra (formulazio berria) | 108 |
| 6.6. IRK Newtonen iterazio mistoa | 112 |
| 6.7. Zenbakizko esperimentuak | 116 |
| 6.8. Laburpena | 119 |
| 7. IRK metodo sinplektikoen bidezko eguzki-sistemaren integrazioa | 121 |
| 7.1. Sarrera | 121 |
| 7.2. Sistema perturbatuetarako integrazio metodo simetriko mota orokor bat: Runge-Kutta inplizitu konposatua (RKIK) | 122 |
| 7.3. Sistema Kepleriarren perturbaziotarako aplikazioa | 126 |
| 7.4. Zenbakizko esperimentuak | 127 |
| 7.5. Laburpena | 135 |
| IV. Eztabaida eta ondorioak. | 139 |
| 8. Eztabaida | 141 |
| 8.1. Eguzki-sistemaren integrazio luzeak | 141 |
| 8.2. Eredu deskonposaketa | 145 |
| 8.3. IRK implementazioaren oinarriak | 149 |
| 8.4. Doitasun altuko konputazioak | 153 |
| 8.5. Aldagai aldaketa | 154 |
| 8.6. Paralelizazioa | 155 |
| 8.7. Implementazioaren erabilgarritasuna | 157 |
| 9. Ondorioak | 161 |

| | |
|-------------------------------------------------------|------------|
| V. Eranskinak | 167 |
| A. Konputazio zientzia | 169 |
| A.1. Sarrera | 169 |
| A.2. Eraginkortasuna | 170 |
| A.3. Hardwarea | 173 |
| A.4. Programazio lengoaiak (Paralelizazioa) | 178 |
| A.5. Aljebra lineal dentsorako liburutegiak | 181 |
| A.6. Konpiladorea | 185 |
| A.7. Laburpena | 187 |
| B. Ekuazioen garapenak | 189 |
| B.1. Kepler-en fluxua | 189 |
| B.2. Koordenatu sistemak | 193 |
| B.3. Newton eraginkorraren garapena | 197 |
| C. Inplementazioak | 199 |
| C.1. Egitura orokorra | 199 |
| C.2. IRK puntu-finkoa | 201 |
| C.3. IRK Newton | 201 |
| C.4. IRK Eguzki-sistema | 202 |
| C.5. Konposizio-Splitting metodoak | 202 |
| D. Zerrendak | 203 |
| Bibliografia | 209 |

I. Atala

Sarrera

1. Kapituluia

Ikerketa

1.1. Ikerketaren testuingurua

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

Garai batean, N-gorputzen problemak teoria analitikoaren bidez aztertzen ziren baina konputagailuen sorrerarekin, zenbakizko integrazioak tresna nagusi bilakatu ziren. Azken hamarkadetan, bai konputazio teknologien aurrerapenari esker bai algoritmo berrien sorrerari esker, zenbakizko azterketek garapen handia izan dute. Zenbakizko simulazioen laguntzaz, eguzki-sistemaren dinamikaren funtsezko galdera batzuk ezagutu ditugu eta berriki, Karplus-en taldeak 2013. urteko kimika Nobel saria [92] jaso du, kimika konputazionalan 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 efemeride zehatzak [41] edo espazioko satelite artifizialen kokapenen [13] kalkuluarako erabili ohi dira.
2. Epe luzeko baina doitasun txikiko integrazioak. Denbora epe luzean, planeta-sistemen mugimendua ezagutzeko egindako ikerketak dira. Azterketa hauetan, helburua gorputzen mugimenduaren argazki orokorra (zehaztasun handirik gabe) ezagutzea da. Normalean, problema mota hauetan gorputzen arteko kolisioak edota kolisiotik gertuko egoerak ez dira izaten.

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

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

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

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

1.2. Motibazioa

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

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

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

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

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

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

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

1.3. Helburua eta esparrua

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

N-gorputzeko problema grabitazionalari dagokionez, eguzki-sistemaren eredu sinplea integratuko dugu. Eguzki-sistemaren gorputzak masa puntualak kontsideratuko ditugu eta gure ekuazio diferentzialek, gorputz hauen arteko erakarpen

grabitazionalak bakarrik kontutan hartuko dituzte. Beraz, eguzki-sistemaren eredu konplexuagoetako erlatibitate efektua, gorputzen formaren eragina, eta beste zenbait indar ez-grabitazional ez ditugu kontutan hartu.

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

Konputagailuen koma-higikorrek aritmetika ondo ulertzea garrantzitsua da. Zenbaki errealean 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) inplementazioa 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 inplementazioak.

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

Konputazioko teknologiaren garapenean, algoritmo azkarren diseinua baldintzatzen duten bi ezaugarri azpimarratu behar dira. Batetik, egungo konputagailuak paraleloak dira eta algoritmo 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. Algoritmo baten kode unitateak paraleloan exekutatzek badu gainkarga bat eta beraz, algoritmoaren exekuzioa paralelizazioaz azkartzea lortzeko, unitate bakoitzaren tamainak esanguratsua izan behar du. Gure eguzki-sistemaren eredua sinplea

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

1.4. Ekarpinak

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

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

Hirugarren urratsean, eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioak aztertuko ditugu. Eguzki-sistemaren problemaren integrazioarako, aurreko bi inplementazioen artean, puntu-finkoarena eraginkorragoa dela baieztatu dugu. Hori dela-eta, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK inplementazioa erabiliko dugu eta eguzki-sistemaren problemarako pentsatutako aldagai aldaketaren bidez, integrazio eraginkorra lortu dugu.

Jarraian, atal bakoitzean egindako ekarpen nagusienak laburtuko ditugu:

1. IRK puntu-finkoaren iterazioa

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

(a) Metodoaren birformulazioa

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

izateko baldintza zehazki betetzen eta beraz, izaera sinplektikoaren propietate onak galtzen dira. Metodoaren birformulazio baliokide bat proposatu dugu, horrela sinplektikotasun 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 inplementazioaren puntu-finkoaren iterazioaren geratze irizpidea zuzena dela ikusi dugu baina kasu batzuetan goizegi geratzen dela baieztatu dugu. Geratze irizpidea bi zentzutan garatu/zorroztu dugu. Hairer-en inplementazioan suposatzen da iterazio guztietan konbergentzia hobekuntza egon behar dela eta hobekuntza-tamaina norma batean oinarritzen da. Normarekiko independentea den geratze irizpidea aplikatzea zuzenagoa da, eta horregatik, atale-tako edozein osagaiaren diferentzia txikitzen den bitartean iterazioak egiten jarraitzea finkatu dugu. Bigarrenik, iterazioetan osagai guztien hobekuntza ez du zertan beherakorra izan, eta okertzen diren tarteko iterazioak gerta daitezke. Arazo hau gainditzeko, iterazioaren batean osagai guztien diferentzia handitzea gertatzen denean, seguritateko iterazio gehigarriak emango ditugu, iteraziotik irten aurretik.

(c) Atalen espresioaren aldaketa

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

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

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

(d) Biribiltze errorearen estimazioa

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

2. IRK Newtonen iterazioa

(a) Ekarpen nagusia

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

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

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

(b) Newtonen iterazio mistoa

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

3. IRK eguzki-sistema

(a) Aldagai aldaketa

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

(b) Doitasun nahasia

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

(c) Kepler-en fluxua

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

1.5. Tesiaren egitura

Tesiaren lehenengo kapitulueta, zenbakizko integrazio sinplektikoak eta koma higikorreko aritmetikaren oinarriak azaldu ditugu. Bigarren kapituluaren lehen zatian, *zenbakizko integratzaile sinplektikoen* 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 sinplektiko eta esplizitu nagusienak laburtu ditugu. Hirugarren kapituluan, lan honetan zenbakizko esperimentuetan erabili ditugun hasierako baliodun problemen zehaztasunak eman ditugu. Laugarren kapituluan, koma-higikorreko aritmetikan murgildu gara eta biribiltze errorearen inguruko gaiak argitu nahi izan ditugu.

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

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

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

II. Atala

Oinarriak

2. Kapituluua

Zenbakizko integratzaile sinplektikoak

2.1. Sarrera

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

Kapitulu honen lehen zatian, zenbakizko integratzaile metodoen inguruko oinarriko definizioak eta kontzeptuak azalduko ditugu. Jarraian, sistema Hamiltondarrak zer diren eta halakoak integratzaile erabiltzen diren metodo sinplektikoak azalduko ditugu. Ondoren, zenbakizko integratzaile sinplektiko nagusienak aztertuko ditugu: alde batetik, Runge-Kutta metodo sinplektikoak (implizituak); eta bestetik, konposizio eta splitting metodo sinplektikoak (esplizituak).

2.2. Zenbakizko integratzaile metodoak

Oinarriko kontzeptuak

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Oso problema gutxitarako aurki daiteke ekuazio diferentzial arruntaren soluzio analitikoa (funtzio ezagunen araberako soluzio zehatza) eta beraz, ia problema gehienak zenbakizko integrazio metodoen bidez ebazten dira. Zenbakizko integrazioetan, 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 kalkulatzeko da eta lortutako balio multzoak $(t_0, y_0), (t_1, y_1), \dots, (t_f, y_f)$ zenbakizko soluzioa definitzen du.

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

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

Definizioak

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

1. Fluxua

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

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

2. Zenbakizko diskretizazioa

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

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

3. Metodoaren ordena

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

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

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

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

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

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

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

4. Metodo simetrikoak

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

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

Euler-en metodo esplizitua

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

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

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

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

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

Euler-en metodo implizitua

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

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

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

Iterazio metodoak

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

1. Puntu-finkoaren iterazioa

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

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

Iterazioak x^* soluzioarengana konbergitu dezake.

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

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

2. Newtonen iterazioa

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

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

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

Urratsaren konputazioaren konplexutasuna metodo esplizituan baino nabarmen handiagoa da: metodo honetan, iterazio bakoitzean Jacobiarra balioztatu, ekuazio-sistema lineala askatu eta f funtzioaren 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 bada,

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

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 analitiko ezaguna da, $y(t) = e^{(t-t_0)\lambda}$, eta $t \rightarrow \infty$ doanean, soluzioa zerorantz gerturatzen da. Metodo implizituaren bidezko zenbakizko soluzioa zerorantz gerturatzen da $h > 0$ guztietarako,

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

eta aldiz, metodo esplizituaren bidezkoa,

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

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

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

Sistema-Hamiltondarrak

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

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

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

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

Beste notazio laburtu hau ere erabili ohi da,

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

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

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

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

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

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

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

da eta dagokien ekuazio diferentzialak hauek dira,

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

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

Funtzio Hamiltondarra hau da,

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

Dagozkion ekuazio diferentzialak,

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

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

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

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

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

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

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

Metodo sinplektikoak

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

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

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

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

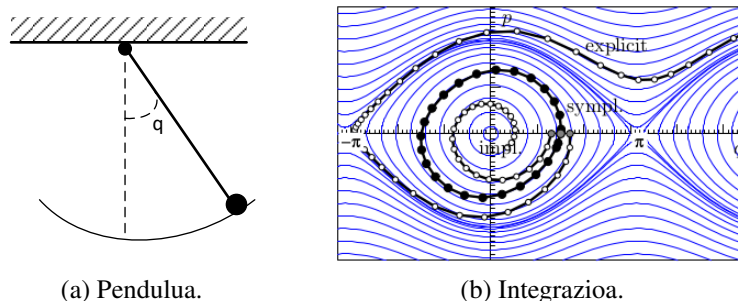
eta ekuazio diferentzialak honakoak dira,

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

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

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

Metodo sinplektikoak bi taldetan banatuko ditugu: metodo sinplektiko implizituak eta esplizituak. Lehenengo taldean, Runge-Kutta metodo implizituak (Gauss kolokazio metodoak) ditugu. Metodo hauek zenbakizko metodo estandarrek dira eta ekuazio diferentzial orokorreari aplikatu dakizkieke. Bigarren taldean, konposizioan eta splitting-ean oinarritutako metodoak ditugu. Azken talde honetako metodoak, bakarrik Hamiltondar sistemei aplikatu dakizkieke eta gainera, Hamiltondarrek banagarria izan behar du. Konposizio eta splitting metodoak oso eraginkorrak dira.



(a) Pendulua.

(b) Integrazioa.

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

Metodo sinplektikoen propietateak

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

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

1. Metodo sinplektikoek, energia oso ondo kontserbatzen dute.

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

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

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

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

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

2. Erroreak hedapen lineala.

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

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

2.3. Runge-Kutta metodo sinplektikoak

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

Runge-Kutta metodoak

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

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

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

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

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

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

Runge-Kutta metodoak honako integrala hurbiltzen du:

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

hurrengo koadratura formularen bidez:

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

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

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

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

Metodo esplizituak (ERK) eta implizituak (IRK)

Runge-Kutta metodoak bi talde nagusitan bereiz ditzakegu: esplizituak (ERK)

non $\forall i \geq j, a_{ij} = 0$ eta implizituak (IRK) non $\exists i \geq j, a_{ij} \neq 0$.

1. ERK metodoaren adibidea.

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

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

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

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

2. IRK metodoaren adibidea.

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

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

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

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

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

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

Sinplektikotasuna

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

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

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

Gauss metodoa

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

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

Kolokazio metodoak

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

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

eta soluzioa

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Gauss metodoaren koefizienteak

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

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

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

Gauss metodoaren propietateak

Gauss metodoen ezaugarri nagusien artean honakoak daude:

1. Metodo sinplektikoa da. Beraz, (2.13) ekuazioak betetzen ditu.

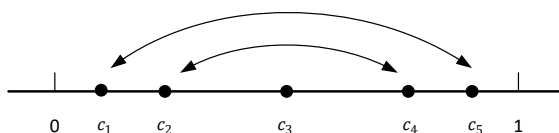
2. Metodo simetrikoa da.

Runge-Kutta metodoa simetrikoa izateko baldintzak hauek dira,

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

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

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



2.2. Irudia: Kolokazio metodoen simetria

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

7. Birparametrizazioa. Metodo sinplektiko inplizituetan, birparametrizazio teknika zuzenean aplikatu daiteke. Eguzki-sistemaren integrazioetarako tresna baliagarria dela frogatu da [45].

IRK implementazioa

IRK algoritmoa

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

```

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

```

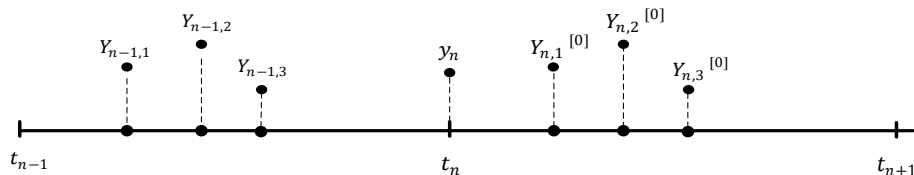
Algoritmoa 1: IRK Algoritmo orokorra

Atalen hasieraketa

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

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

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



2.3. Irudia: Atalen hasieraketa: interpolazioa

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

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

2. Polinomio interpolatzailea.

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

non $l_i(t)$ Lagrangiaren 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} interpolaziorako koefizienteak lor daitezke. Polinomio interpolatzailearen bidezko hasieraketa, emandako urratsa oso handia ez bada eta problema zurruna ez bada, ona izango da. Era berean aipatu nahi genuke, atal askotako metodoetan (adibidez $s = 16$) interpolaziozko koefizienteen kalkuluan ezabapen arazoak doitasun handian lan egitera behartzen gaituela interpolaziozko hasieraketa ona izateko.

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

Iterazio metodoa

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

1. Puntu-finkoaren iterazioa

```

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

```

Algoritmoa 2: Puntu-finkoaren iterazioa

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

2. Newtonen iterazioa

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

```

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

```

Algoritmoa 3: Newton metodoaren iterazioa

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

Hamiltondar banagarriak (Metodo partizionatuak)

Era honetako ekuazio 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 kalkula daiteke [67],

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

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

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

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

```

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

```

Algoritmoa 4: Puntu-finkoaren iterazioa (Metodo partizionatuak)

Bigarren ordenako 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 kalkula daiteke [67],

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

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

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

Bigarren ordenako ekuazio diferentzialen kasuan, puntu-finkoaren iterazioa modu eraginkorrean aplikatu daiteke,

```

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

```

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

Batura Kompensatua

Zenbakizko integrazioaren urrats bakoitzean,

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

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

2.4. Konposizio eta splitting metodoak

Konposizio eta splitting ideietan oinarrituz, aplikazio eremu ezberdinetarako hainbat integratzaile sinplektiko [104] garatu dira. Metodo hauek ez dira orokorrak, problema zehatzetan aplikagarriak baizik, eta metodo oso eraginkorrak dira.

Konposizio metodoak

Konposizio metodoak, oinarritzko metodo bat edo gehiago konposatuz eraikitako zenbakizko integrazio metodoak dira [54]. Oinarritzko metodoekin segidan exekututako 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 oinarritzko metodoaren propietateak (simetrikoa, sinplektikoa, ...) jasotzen ditu.

Konposizio orokorrak

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

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

Algoritmoa

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

```

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

```

Algoritmoa 6: Konposizio metodoen implementazioa

Konposizio metodoen implementazioaren ezaugarri nagusienak hauek dira:

1. Esplizituak dira.

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

2. Sekuentzialak dira.

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

3. Memoria gutxi behar dute.

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

4. Bigarren ordenako ekuazio diferentzialentzat egokiak dira.

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

balioztapen egin behar ditugu:

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

Konposizio simetrikoak

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

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

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

CO1035: 10 ordenako konposizio metodoa

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

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

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

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

1. Konposizio metodo orokorra.

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

2. *Stömer-Verlet* oinarrizko metodoaren konposizio metodoa,

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

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

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

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,

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

Splitting metodoak

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

Splitting metodoa modu errazean aplikatu daitezke, H Hamiltondarra, $H = H_1 + H_2$ eran bana daitezkeen eta Hamiltondar bakoitzari dagokion sistema modu esplizituan integratu daitezkeen.

Splitting arruntak

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

1. Lie-Trotter splitting 1 ordenako metodoak,

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

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

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

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

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

2. Strang-Marchuk splitting 2 ordenako metodo simetrikoa,

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

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

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

Fluxu zehatza eta zenbakizko fluxua konbinatuz

Demagun, sistemaren bi fluxu zehatzetariko bat $\varphi_t^{[H_1]}$ edo $\varphi_t^{[H_2]}$ ezin daitekeela kalkulatu. Kasu honetan ere splitting teknika aplikatu daiteke metodo sinplektikoak eraikitzeko. 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 metodoak, $\phi_t^{[H_2]}$ zenbakizko metodoaren propietateak mantentzen ditu.

Splitting orokorrak

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

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

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

Algoritmoa

Splitting metodoen implementazio orokorra 7 algoritmoan ikus daiteke:

```

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

```

Algoritmoa 7: Splitting metodoak

Splitting metodoen implementazioarentzat, konposizio metodoen algoritmoen buruz aipatutako ezaugarri berdinak errepikatu beharko genituzke (esplizituak dira, sekuentzialki exekututzen dira, memoria gutxi, ...).

Eguzki-sistemari egokitutako splitting metodoak

Har dezagun, N -gorputzeko problema grabitazionalaren Hamiltondarra,

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

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

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

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

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

$H_A(p, q)$ (mugimendu Kepleriarrari dagokion zatia), Kepler-en fluxua kalkulatzeko duen implementazio bat aplikatuz (3.4. atala) zehazki kalkulatu da.

Eguzki-sistemaren problema grabitazionalari egokitutako zenbakizko bi integratzaile sinplektiko azalduko ditugu. Lehena, Laskar-ek eta Robutel-ek [82] definitutako $SABAC_4$ integratzailea eta bigarrena, Blanes et al. [16, 37] definitutako $ABAH1064$ integratzailea.

SABAC₄ integratzailea

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

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

$$SABA_4 = \varphi_{c_1 h}^{[A]} \circ \varphi_{d_1 h}^{[B]} \circ \varphi_{c_2 h}^{[A]} \circ \varphi_{d_2 h}^{[B]} \circ \varphi_{c_3 h}^{[A]} \circ \varphi_{d_2 h}^{[B]} \circ \varphi_{c_2 h}^{[A]} \circ \varphi_{d_1 h}^{[B]} \circ \varphi_{c_1 h}^{[A]},$$

$$CSABA_4 = \varphi_{-c/2}^{[B]} \circ SABA_4 \circ \varphi_{-c/2}^{[B]},$$

eta koefizienteak 2.2. taulan zehaztu ditugu.

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

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

ABAH1064 integratzailea

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

Atal honetan, koordinatu heliozentrikoetara egokitutako $ABAH1064$, $p = 10$ ordenako metodoa deskribatuko dugu. Eguzki-sistemaren integrazioarako koordinatu heliozentrikoetara dagokion Hamiltondarra era honetako dugu,

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

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

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

2.3. Taula: *ABAH1064* splitting metodoa [16]

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

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

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

non a_i , b_i koefizienteak 2.3. taulan definitzen diren.

2.5. Laburpena

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

2.4. Taula: Integrazio metodo sinplektikoen laburpena

| | <i>C1035</i> | <i>CSABA₄</i> | <i>ABAH1064</i> | <i>GAUSS – 12</i> |
|-----------------|--------------|--------------------------|-----------------|-------------------|
| Hamiltondarra | Banagarria | Banagarria | Perturbatua | Orokorra |
| Mota | Esplizitua | Esplizitua | Esplizitua | Inplizitua |
| Koordenatuak | Orokorra | Helio/Jacobi | Heliozentrikoa | Orokorra |
| Ordena | 10 | | 10 | 12 |
| Atalak | 35 | 9 | 9 | 6 |
| Paralelizagarri | Ez | Ez | Ez | Bai |

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

3. Kapituluia

Problemak

3.1. Sarrera

Gure helburua eguzki-sistemaren simulaziorako zenbakizko integratzaileak hobetzea eta hobekuntza horiek barneratzen dituen inplementazioa eskaintzea da. Eguzki-sistematzat nahi bezain konplexua den sistema har daiteke: planeta guztiak, planeta nanoak, planeten ilargiak, kometak, erlatibitate efektua eta abar har daitezke kontutan. Baina sistema sinplifikatuan hobekuntzak egiten badira, sistema konplexuak ere hobeto integratzeko bidea irekiko da. Hori dela-eta, guk eredu sinpleekin jardun dugu, eta zenbakizko esperimenduetan, eguzki-sistemaren bi eredu erabili ditugu, bata oso sinplea eta bestea osatuagoa: alde batetik kanpo-planeten problema (eguzkia, kanpo-planetak eta Plutonek osatutakoa), eta bestetik, *9-planeten problema* (eguzkia, 8 planetak eta Plutonek osatutakoa). Bi eredu hauetan, gorputzak masa puntualak dira eta gorputz hauen arteko erakarpen grabitazionalak bakarrik hartu ditugu kontutan.

Aipatu beharra dago, zenbakizko metodo sinplektiko nagusienak esplizituak direla eta metodo horiek, Hamiltondar banagarria duten problemetan bakarrik erabil daitezkeela. Gainera, problema zurruna bada metodo esplizituak ez dira eraginkorrak eta metodo inplizituek abantaila azaltzen dute. Gauss metodoa, orokorra eta inplizitua izanik, problema zurrunetarako eta Hamiltondar banagarria ez den problemetarako aplikagarria dela ere kontuan hartu behar da.

Hori dela-eta, problema osagarri gisa aukeratu dugu pendulu bikoitzaren problema, zenbakizko esperimenduak modu aberatsago eta zabalago batean egiteko. Pendulu bikoitzaren bi bertsio kontsideratu 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, problema hauen zailtasunei nola

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

Kapitulu 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 grabitazionalan murgildu gara eta eredu ezberdinen zehaztapenak eman ditugu: Kepler problema, kanpo-planeten problema eta 9-planeten problema.

3.2. Pendulu bikoitza

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

Pendulu bikoitz arrunta

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

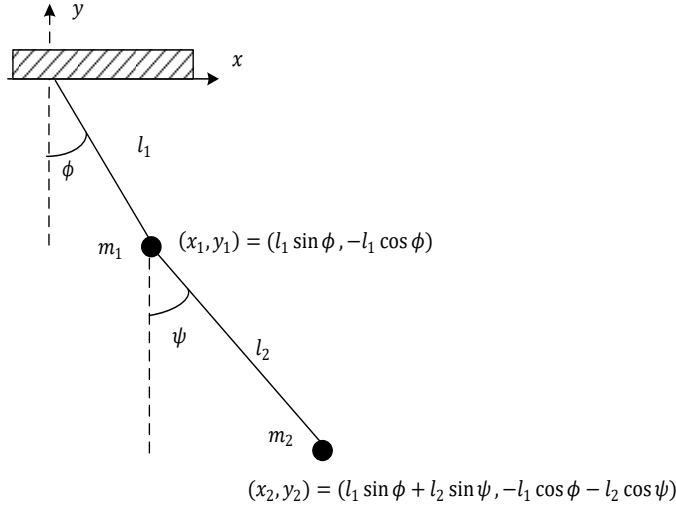
Sistemaren egoera aldagaiak, bi angelu $q = (\phi, \theta)$ eta dagozkion momentuak $p = (p_\phi, p_\theta)$ dira. ϕ lehen penduluaren ardatz bertikalarekiko angelua da eta bigarren penduluaren angelua, era honetan definituko dugu $\psi = \phi + \theta$.

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

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

Sistemaren parametroak. Gure esperimentuetarako honako parametroak kontsideratuko ditugu,

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



3.1. Irudia: Pendulu bikoitz arrunta

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

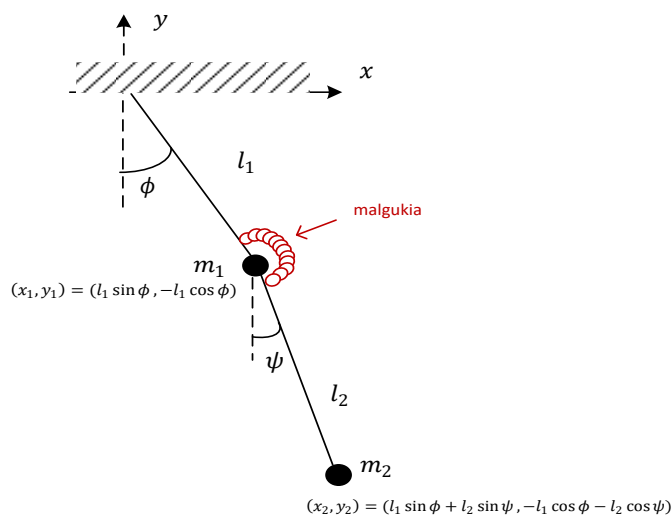
1. Hasierako balio ez-kaotikoak (NCDP): $q(0) = (1.1, -1.1)$ eta $p(0) = (2.7746, 2.7746)$. $T_{end} = 2^{12}$ segundoko integrazioa egin dugu.
2. Hasierako balio kaotikoak (CDP): $q(0) = (0, 0)$ eta $p(0) = (3.873, 3.873)$. $T_{end} = 2^8$ segundoko integrazioa egin dugu.

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

Pendulu bikoitz zurruna

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

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



3.2. Irudia: Pendulu bikoitza (zurruna)

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

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

Hasierako balioak. Hasierako balioak, era honetan aukeratu ditugu:

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

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

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

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

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

3.3. N-Gorputzen problema

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

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

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

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

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

Hamiltondar sistema. Momentuen definizio hau ordezkatzuz $p_i = m_i * \dot{q}_i$, N-gorputzeko problemaren formulazio Hamiltondarra 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 diferentzialak. Abiaduraren eta kokapenaren arabera ekuazioak hauek dira,

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

Problemen integralak. Integrazioan zehar konstante mantentzen diren kuantitatei problemaren integralak edo inbariantek deitzen zaie. N-gorputzen problemak 10 integral ditu [72]:

1. Masa zentroaren sei integralak.

Era honetan definitzen dugun P balio konstantea dela modu errazean frogatu daiteke,

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

Eta ondorioz,

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

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

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

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

2. Momentu angeluarra.

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

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

3. Energia.

Hamitondar sistema osoaren energia da eta problemaren beste integrala da,

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

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

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

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

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

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

3.4. Eguzki-sistema

Sarrera

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

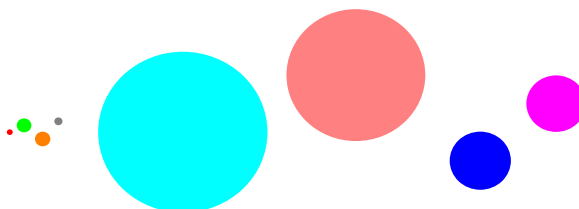
Eguzki sistemaren eredu sinplea integratuko dugu. Eguzki-sistemaren gorputzak masa puntualak kontsideratuko ditugu eta gure ekuazio diferentzialak definitzeko, soilik gorputz hauen arteko erakarpen grabitazionalak hartu ditugu kontutan.

Eguzki-sistemaren gorputz nagusien (eguzkia eta planetak) integrazioetara mugatuko gara. Ereduen gorputz kopurua txikia izango da, kanpo-planeten problema $N = 6$ eta 9-planeten problema $N = 10$ izango da.

Eguzkiak, planetak baino 1.000 aldiz masa handiago du eta hauxe da, eguzki-sistemaren ezaugarri garrantzitsuenetakoa: eguzkiaren grabitazio indar nagusiak eta planeten arteko perturbazio txikiek sortzen duten sistema dinamikoa da. Planeten eta beren sateliteen mugimenduan kolisiotik gertuko egoerarik edo eszentrikotasun handiko orbitarik ez dago. Beraz, ikuspuntu honetatik sistema dinamiko sinplea dela, esan daiteke. Eguzki-sistema egonkorra kontsideratzen da, hau da, epe luze batean planeten arteko talkarik edo planeten kanporatzerik gertatzea, ez da espero [78, 56].

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

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



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

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 |

Hiru dira erabiltzen diren koordenatu sistema nagusienak:

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

Ohikoa da ekuazio diferentzialak koordenatu heliozentrikoen (eguzkiaren zentroarekiko) arabera definitzea. Ekuazioen zehaztapenak B.2. eranskinean eman ditugu.

Problemak

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

Kanpo-planeten problema

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

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

9-planeten problema

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

3.2. Taula: Kanpo-planeten masak

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

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

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

Laskar-en eredia

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

Laskar-ek, 2.011. urtean epe luzeko zenbakizko integratziorako [80] erabilitako eguzki-sistemaren eredia deskribatuko dugu. Hasierako integrazioetan, eguzkia, 8 planetak, Pluton eta Ilargia bakarrik kontsideratu zituen. Eguzkiaren erlatibitate efektua (Saha eta Tremain-ek [101] finkatutako teknikaren arabera) eta eredu errealistaren indar ez grabitazional garrantzitsuenak aplikatu zituen. Azken integrazioetan, Zeres, Palas, Vesta, Iris eta Bambergako asteroideak gehitu zituen.

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

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

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

giaren Lurrarekiko kokapena (q_{em}) aldagaiekin ordezkatzeko 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 diferentzialaren eskuin aldeko espresioa ebaluatze-ko (q_e, q_m) aldagaiak erabiliko ditugula eta (q_B, q_{em}) aldagai berriak integratzeko erabiliko ditugula.

```

Lurra, Ilargia = { $q_B, q_{em}$ };
for  $i \leftarrow 1$  to endstep do
  { $q_e, q_m$ }  $\leftarrow$  { $q_B, q_{em}$ };
  Ebaluatu  $\dot{y} = f(y)$ ;
  { $q_B, q_{em}$ }  $\leftarrow$  { $q_e, q_m$ };
  Integrazioa ( $q_B, q_{em}$ );
end

```

Algoritmoa 8: Ilargiaren kalkuluak

3.5. Laburpena

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

3.4. Taula: Planeten GM balioak

| Gorputza | $GM (au^3/day^3)$ |
|-----------|------------------------------|
| Eguzkia | $0.295912208285591100e - 03$ |
| Merkurio | $0.491248045036476000e - 10$ |
| Artizarra | $0.724345233264412000e - 09$ |
| Lurra | $0.888769244512563400e - 09$ |
| Marte | $0.954954869555077000e - 10$ |
| Jupiter | $0.282534584083387000e - 06$ |
| Saturno | $0.845970607324503000e - 07$ |
| Urano | $0.129202482578296000e - 07$ |
| Neptuno | $0.152435734788511000e - 07$ |
| Pluton | $0.217844105197418000e - 11$ |
| Ilargia | $0.109318945074237400e - 10$ |

maren hasierako balioak [31] artikulutik hartu ditugu. Bestetik, eguzki-sistema grabitazionalaren problemaren integraziorako hasierako balioak lan hauetatik hartu ditugu: kanpo-planetaren problemarentzat [54] liburutik eta 9-planetaren problemarentzat 2014. urteko efemerideen [41] artikulutik hartu ditugu. Eguzki-sistemaren problemaren integraziorako hasierako balioak jasotzen dituzten beste lan hauek ere aipatu nahi genituzke: P.W. Sharp-ek eguzki-sistemaren problemaren bilduma [105] eta Laskar-en [81] artikulua informazio osagarria.

3.5. Taula: [

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

| Gorputza | Balioa | | | |
|-----------|-----------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|
| Eguzkia | x, y, z | 0.00450250878464055477 | 0.00076707642709100705 | 0.00026605791776697764 |
| | v_x, v_y, v_z | -0.00000035174953607552 | 0.00000517762640983341 | 0.00000222910217891203 |
| Merkurio | x, y, z | 0.36176271656028195477 | -0.09078197215676599295 | -0.08571497256275117236 |
| | v_x, v_y, v_z | 0.00336749397200575848 | 0.02489452055768343341 | 0.01294630040970409203 |
| Artizarra | x, y, z | 0.61275194083507215477 | -0.34836536903362219295 | -0.19527828667594382236 |
| | v_x, v_y, v_z | 0.01095206842352823448 | 0.01561768426786768341 | 0.00633110570297786403 |
| EMB | x, y, z | 0.12051741410138465477 | -0.92583847476914859295 | -0.40154022645315222236 |
| | 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 |

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

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

3.7. Taula: Ilargiaren Lurrarekiko hasierako balioak

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

4. Kapituluia

Koma higikorreko aritmetika

4.1. Sarrera

Konputagailuetan, zenbaki errealak (\mathbb{R}) bit kopuru finituaren bidez adierazi behar dira eta honetarako, koma-higikorreko adierazpen sistema ($\mathbb{F} \subset \mathbb{R}$) erabiltzen da. Zenbaki erreal batzuk, \mathbb{F} sisteman adierazpen zehatza dute, baina beste batzuk hurbildu egin behar dira. Era berean, eragiketa aritmetikoen (+, -, *, /) kalkulu gehienetan ere emaitzaren hurbilpena egin beha da. \mathbb{R} sistematik \mathbb{F} sistemara bihurtzeko 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 inplementazioak, *IEEE-754* estandarrean [62] oinarritzen dira. *IEEE-754* estandarrak, koma-higikorreko aritmetikaren konputaziorako formatu eta metodoak definitzen ditu. Konputazioen fidagarritasuna eta aplikazioen portabilitatea bermatzen ditu.

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

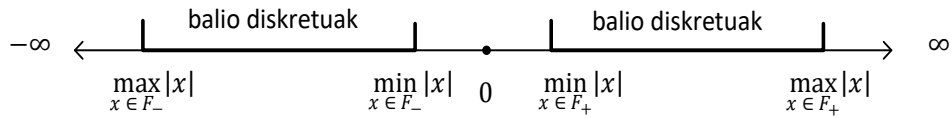
4.2. *IEEE-754* estandarra

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

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

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

bakanez osatuta dago. Multzoaren kanpoaldean zenbaki hauek guztiak ditugu: batetik overflow 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),

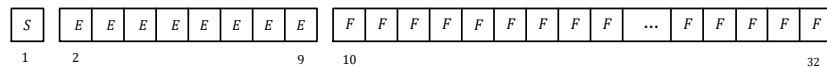
1. m bitez osatutako zatia, mantisa (M) izenekoa. Horietako bit batek (S) zeinua adierazten du. Bestalde M mantisa modu normalizatu honetan emana da, $\pm 1.F$ eta zati erreala (F) bakarrik gorde behar da.
2. Esponentea (E), $(n - m)$ bitez adierazitako zenbaki osoa. Zeinuarentzat ez da bit zehatzik,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

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

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

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 normalizatuak) 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-higikorrek formatuak

| Formatoa | Tamaina n | Mantisa m | Esponentea n-m | Tartea | $u = 2^{-m}$ |
|-----------|--------------|--------------|-------------------|------------------|---------------------|
| 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 oinarriko eragiketak (batuketa, kenketa, biderketa, zatiketa, eta erro karratua) hardware bidez exekutatzen dira [91] eta azkarrak dira. Makina ziklo bakoitzeko, 2 eta 4 batuketa, kenketa edo biderketa egin ohi dira; zatiketa eta erro karratua aldiz, eragiketa motelagoak dira. Bestalde, doitasun arruntaren aritmetika, doitasun bikoitza baino azkarragoa da: garraiatu behar den bit kopuru erdia delako eta gainera, hardware bereziei esker (adibidez *Intel* makinetan *SSE* moduluak), eragiketa aritmetikoak azkarragoak direlako. 2008. urtean, IEEE-754 estandarrak, 128-biteko koma-higikorrek aritmetika onartu zuen, baina inplementazioa softwarez bidezkoa da eta exekuzioa, gutxi gorabehera, doitasun bikoitzeko aritmetika baino 10-15 aldiz motelagoa da.

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

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

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

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

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

4.3. Biribiltze errorea

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

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

Adierazpenaren errorea

Zenbaki erreal 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 txikiaren eta handienaren artean badago,

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

bermatuta dagoela frogatu daiteke [28].

Aritmetikaren errorea

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- Errore absolutua,

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

- Errore erlatiboa,

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

- Honako erlazio hau ondorioztatu daiteke,

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

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

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

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

Biribiltze errorearen hedapena

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

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

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

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

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

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

Ezabapen arazoa

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

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

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

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

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

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

4.4. Biribiltze errorea gutxitzeko teknikak

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

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

Batura: Fast2Sum

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

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

Algoritmoa 9: Fast2Sum

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

Batura konpentsatua

Era honetako batugai askoren arteko batuketan,

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

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

$$\begin{array}{l}
\tilde{x} \quad \boxed{\tilde{x}_1 \quad \tilde{x}_2} \\
\tilde{y} \quad \quad \quad \boxed{\tilde{y}_1 \quad \tilde{y}_2} \\
\tilde{z} = \tilde{x} \oplus \tilde{y} \quad \boxed{\tilde{x}_1 \quad \tilde{x}_2 \oplus \tilde{y}_1} \\
\tilde{z} \ominus \tilde{x} \quad \quad \quad \boxed{\tilde{y}_1 \quad 0} \\
\tilde{y} \ominus (\tilde{z} \ominus \tilde{x}) \quad \quad \quad \boxed{\tilde{y}_2 \quad 0}
\end{array}$$

4.3. Irudia: Batuketaren biribiltze errorea

estimazioa kalkulatu dugu eta hurrengo urratsean, batugaiari gehituko diogu.

```

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

```

Algoritmoa 10: Kahan-en batura konpentsatua

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

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

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

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

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

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

Zenbakizko integrazioak

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

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

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

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

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

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

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

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

end

Algoritmoa 11: Batura konpentsatua (zenbakizko integrazioa)

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

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

Bidekerta: 2MultFMA

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

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

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

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

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

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

Algoritmoa 12: 2MultFMA

Sterbenz Teorema

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

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

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: [94, 91, 59, 28].

III. Atala
Ekarpenak.

5. Kapituluia

IRK: Puntu-finkoaren iterazioa

5.1. Sarrera

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

Runge-Kutta implizitu sinplektikoaren (Gauss nodoetan oinarritutako Runge-Kutta kolokazio metodoa) inplementazioa proposatu dugu, eta biribiltze erroreak garapena txikia izateko ahalegin berezia egin dugu. Inplementazioa, problema ez-zurrunetan aplikatzeko garatu dugunez, ekuazio-sistema implizitua, puntu-finkoaren iterazioaren bidez ebartziko dugu (puntu-finkoaren iterazioan eta Newtonen iterazio sinplifikatuan oinarritutako inplementazioen eraginkortasun azterketak, [54, 67] lanetan kontsulta daitezke).

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

Gure inplementazioa, biribiltze erroreak garapenaren ikuspegitik, ia optimoa izatea nahi dugu, hau da, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako inplementazio onenaren biribiltze erroreak garapenaren antzekoa duen inplementazioa lortu nahi dugu. Era berean, biribiltze erroreak estimazioa kalkulatzeko teknika garatu dugu, doitasun txikiagoko bigarren integrazio baten soluzioaren diferentzia

gisa kalkulatu dena.

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

5.2. Hairer-en implementazioa

IRK implementazio estandarra

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

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

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

non tol finkatutako tolerantzia den.

Konponbideak

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

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

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

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

Adibidez, koefizienteak era honetan zehaztu daitezke,

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

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

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

Hairer-en implementazioaren algoritmoa

Hairer-ek bere implementazioaren [Fortran kodea](#) eskuragarri du. Bere funtsa [13](#) algoritmoan ikus daiteke, eta horrez gain, batura konpentsatuaren teknikaren erabilerara [14](#) algoritmoan zehaztu dugu.

```

y0 = y(t0); e0 = 0;
for n ← 0 to (endstep - 1) do
    k = 0;
    Yn,i[0] = yn + h ci f(yn);
    while (Δ[k] ≠ 0 and Δ[k] < Δ[k-1]) do
        k = k + 1;
        Fn,i[k] = f(Yn,i[k-1]);
        Yn,i[k] = yn + h ( ∑j=1s âij Fn,j[k] ) + h ( ∑j=1s ãij Fn,j[k] );
        Δ[k] = maxi=1,...,s ||Yn,i[k] - Yn,i[k-1]||∞;
    end
    (yn+1, en+1) ← BaturaKonpentsatua(yn, en, Fn[k]);
end

```

Algoritmoa 13: Hairer-en IRK implementazioa

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

```

    δ̂n = h ( ∑i=1s b̂i Fi[k] );
    δ̃n = h ( ∑i=1s b̃i Fi[k] );
    ee = δ̂n + en;
    yy = yn + ee;
    ee = (yn - yy) + ee;
    ee = δ̃n + ee;
    yn+1 = yn + ee;
    en+1 = (yy - yn+1) + ee;
    return (yn+1, en+1);

```

Algoritmoa 14: Hairer-en IRK implementazioaren, batura konpentsatua

Hairer-en implementazioaren arazoak

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

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

5.3. Gure inplementazioa

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

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

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

Har dezagun, honako hasierako baliodun problema,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Metodoaren birformulazioa

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

Arazo hau gainditzeko, IRK metodoa era honetan birformulatuko dugu,

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

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

non

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

Runge-Kutta metodoa sinplektikoa izateko baldintza (5.8), modu honetan berriatuz dugu,

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

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

1. Koefizienteen matrize diagonaleko balioek koma-higikorrekiko 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 teorema (4.3) ziurtatzen du, $1/2 < |\mu_{ij}| < 2$ denez, $1 - \tilde{\mu}_{ij}$ balioak koma-higikorrekiko adierazpen zehatza izango duela. Laburtuz, hauek ditugu birformulatutako sinplektikotasun baldintza (5.11) zehazki betetzen duten koma-higikorrekiko $\tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteak,

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

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

1. hb_i koefizienteak

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

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

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

2. ν_{ij} interpolazio koefizienteak

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

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

Geratze irizpidea

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

```

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

```

Algoritmoa 15: IRK puntu-finkoaren iterazioa

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

IRK metodoaren implementazio estandarren geratze irizpidea honakoa da,

$$\Delta^{[k]} = (Y_{n,1}^{[k]} - Y_{n,1}^{[k-1]}, \dots, Y_{n,s}^{[k]} - Y_{n,s}^{[k-1]}) \in \mathbb{F}^{sd}, \quad (5.14)$$

$$\|\Delta^{[k]}\| \leq tol$$

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

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

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

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

geratzeko bigarren arrazoi honetan, kontsideratzen du biribiltze errorearen ondorioz gertatu dela baldintza hori, ondorioz geratzea erabakitzen du.

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

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

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

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

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

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

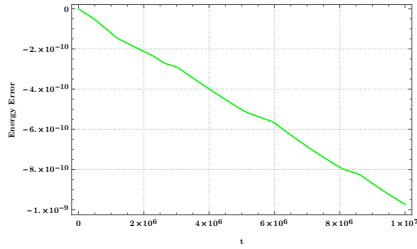
Arazo hauei aurre egiteko, geratze irizpide berri bat proposatu dugu. Iterazioak geratzea, $\Delta^{[k]} = 0$ denean edo bi aldiz honako baldintza betetzen denean:

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

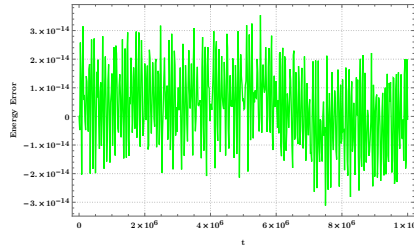
K baldin bada, $k = K-1$ eta $k = K$ balioetarako (5.15) baldintza betetzen ez duen lehen zenbaki oso positiboa, orduan $y_{n+1} \approx y(t_{n+1})$ era honetan kalkulatu dugu,

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

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



(a) Hairer-en geratze irizpidea



(b) Geratze irizpidea berria

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

Tolerantzi testa

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

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

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

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

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

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

Biribiltze errorea gutxitzeko teknikak

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

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

Batura konpentsatua

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

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

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

Aldaketa honekin, lortutako zenbakizko soluzioaren doitasuna, batura konpentsatu estandararekin 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 kalkulatu 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 (12 algoritmoa) aplikatu dugu.

$$E_{n,i} = hb_i f(Y_{n,i}^{[K-1]}) - L_{n,i}^{[K]}, \quad i = 1, \dots, s,$$

$$\delta_n = e_n + \sum_{j=1}^s E_{n,j}.$$

2. Batura konpentsatua

Azkenik, batura konpentsatua (4.1) aplikatuko dugu,

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

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

```

s0 =  $\tilde{y}_n$ 
ee =  $\delta_n$ 
for i ← 1 to (s) do
    s1 = s0
    inc =  $L_{n,i}^{[K]} + ee$ 
    s0 = s1 + inc
    ee = (s1 - s0) + inc
end
 $\tilde{y}_{n+1}$  = s0
 $e_{n+1}$  = ee
return ( $\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}$ )

```

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

Biribiltze errorearen estimazioa

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

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

Function flr (x, r)

```

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

```

Algoritmoa 17: flr

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

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

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

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

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

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

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

```

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

```

Algoritmoa 18: RKG2: errore estimazioa

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

Algoritmoa

Azkenik, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK inplementazio berriari dagokion algoritmoa laburtuko dugu (19 algoritmoa).

```

 $\tilde{y}_0 = fl(y_0);$ 
 $e_0 = fl(y_0 - \tilde{y}_0);$ 
for  $n \leftarrow 0$  to  $(endstep - 1)$  do
   $k = 0;$ 
  Hasieratu  $Y_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s;$ 
  while (not konbergentzia) do
     $k = k + 1;$ 
     $F_{n,i}^{[k]} = f(Y_{n,i}^{[k-1]});$ 
     $L_{n,i}^{[k]} = hb_i F_{n,i}^{[k]};$ 
     $Y_{n,i}^{[k]} = \tilde{y}_n + (e_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k]});$ 
    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
   $E_{n,i} = hb_i f_{n,i}^{[k]} - L_{n,i}^{[k]};$ 
   $\delta_n = e_n + \sum_{i=1}^s E_{n,i};$ 
   $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakompentsatua( $\tilde{y}_n, \delta_n, L_n^{[k]}$ );
end

```

Algoritmoa 19: IRK (puntu-finkoaren iterazio)

Zenbakizko soluzioa

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

Erabiltzaileak, bi integrazio mota exekutatu ditzake:

1. Integrazio arrunta

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

nakoa da:

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

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

non

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

2. Integrazioa errore estimazioarekin

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

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

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

5.4. Zenbakizko esperimentuak

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

Problemak

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

Pendulu bikoitz arrunta

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

Kanpo-planeten problema

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

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

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

Energia errorearen jatorria

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

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

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

3. Funtzio zehatza $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, doitasun bikoitzeko bertsioaz $\tilde{f} : \mathbb{F}^d \rightarrow \mathbb{F}^d$ ordezkatzeraoan sortutako errorea. Ordezkapen honek, bi eragin ditu: batetik, urrats gehienetan K iterazio finituetan puntu-finkora iritsiko gara, zeinak ekidin ezineto 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 koefizienteaz $\tilde{b}_i, \tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ ordezkatzeraoan eragindako errorea.
5. Algoritmoaren inplementazioaren eragiketa aritmetikoak (\tilde{f} funtzioaren ebaluazioan egindakoaz gain), doitasun bikoitzean kalkulatzeraoan eragindako errorea.

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

A. Inplementazio zehatza

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

B. Inplementazio superideala

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

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

C. Inplementazio ideala

Ekuazio diferentzialaren eskuin aldeko funtzioaren ebaluazioa izan ezik, beste eragiketa guztiak doitasun laukoitzean kalkulatzen dituen inplementazioa da. Ekuazio diferentziala doitasun bikoitzean kalkulatzeak eragiten duen errorea neurtzeko erabiliko dugu eta integrazio hau, hobetu ezin daitekeen zenbakizko integraziotzat hartuko dugu.

D. Inplementazio sasi-ideala

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

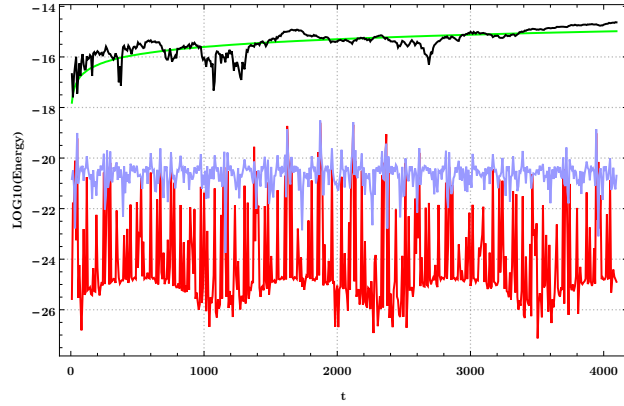
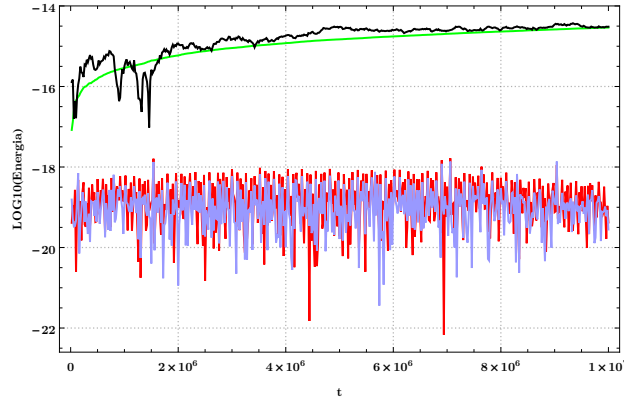
Lau inplementazioetan oinarrituz, bi problemen zenbakizko soluzioei dagoen energia-errorearen eboluzioa 5.2. irudian erakutsi dugu. Hainbat ondorio atera daitezke. Aukeratutako h urrats luzerarentzat, trunkatze errorea biribiltze errorearen azpitik dagoela baieztatu dugu. Metodoaren doitasun bikoitzeko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

Errore azterketa estatistikoa

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

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

1. Inplementazio ideala: ekuazio diferentzialaren eskuin aldeko funtzioaren ebaluazioa izan ezik, beste eragiketa guztiak doitasun laukoitzean (128-bit) kalkulatzen dituen inplementazioa da. Inplementazio hau FPIEA (fixed point iteration with exact arithmetic) izendatuko dugu.
2. Doitasun bikoitzeko gure inplementazioa berria. Inplementazioa hau, DP izendatu dugu.
3. Hairer-ek proposatutako inplementazioa [55]. Zenbakizko esperimentuetarako, Hairer-en IRK metodoaren Fortran kodea exekutatu dugu.

(a) NCDP ($h = 2^{-7}$)(b) OSS ($h = 500/3$)

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

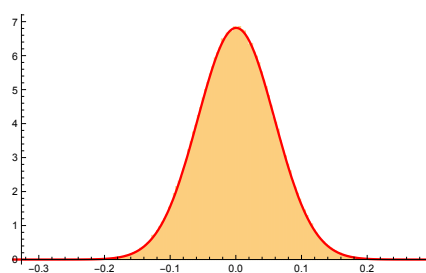
Batetik, DP inplementazioaren biribiltze errorearen garapena, FPIEA inplementazioaren (aritmetika zehatza) errorearekiko kualitatiboki antzekoa dela eta magnitudean gertu dagoela ziurtatu nahi dugu. Bestalde, DP inplementazioa, Hairer-en inplementazioarekin konparatu nahi dugu.

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

5.1. 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 implementazio konparatu ditugu: FPIEA (ideala), DP (doitasun bikoitza) eta Hairer-en kodea.

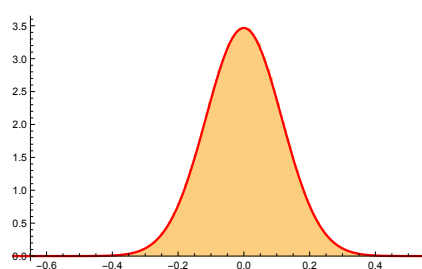
| | FPIEA | | DP | | Hairer | |
|------|-------|------|------|------|--------|------|
| | % | # | % | # | % | # |
| NCDP | 98.7 | 9.5 | 98.8 | 8.6 | 98.5 | 8.6 |
| CDP | 98.9 | 9.5 | 98.9 | 8.6 | 98.4 | 8.6 |
| OSS | 97.4 | 15.2 | 97.4 | 14.2 | 87.5 | 14.1 |

Energia diferentzien banaketa



(a) NCDP

$$(\mu = 5.3 \times 10^{-19}, \sigma = 1.5 \times 10^{-17})$$



(b) OSS

$$(\mu = -1.9 \times 10^{-19}, \sigma = 3.5 \times 10^{-18})$$

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

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

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

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

Ideia hau jarraituz, doitasun bikoitzeko (DP) inplementazioan, m urrats arteko energiaren diferentziari,

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

banaketa Gaussiarra dagokion aztertuko dugu.

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

Energia errorearen batezbestekoaren eta desbideratze estandarren eboluzioa

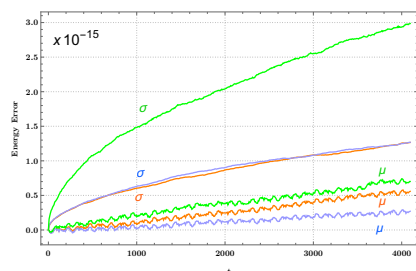
5.4. irudian, FPIEA, DP eta Hairer-en inplementazioetarako, NCDP eta OSS problemen integrazioen energia errorearen batezbestekoa eta desbideratze estandarra irudikatu ditugu.

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

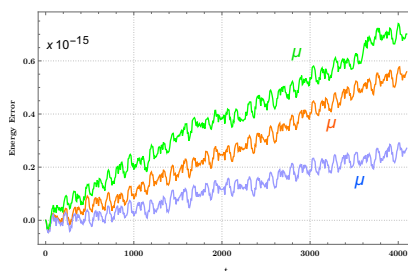
5.4. irudiko zenbakizko esperimentuetan, DP inplementazioaren energia errorearen batezbestekoaren eta desbideratze tipikoaren eboluzioa ia optimoa da (FPIEA inplementazioarekiko gertu).

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

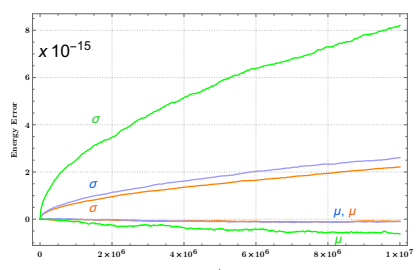
Energia drift-a, ez da IRK metodo sinplektikoen berezko arazoa. 5.5. irudian, Newton sinplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK inplementazioarekin NCDP problemaren aurreko esperimentua errepikatu dugu eta energia errorearen batezbestekoaren eboluzioan ez da drift linealik agertzen.



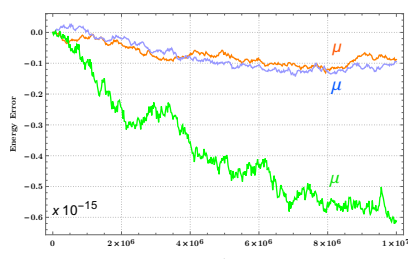
(a) NCDP: energia errorea



(b) NCDP: energia errorearen batezbestekoa

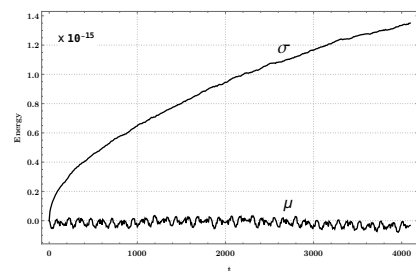


(c) OSS: energia errorea

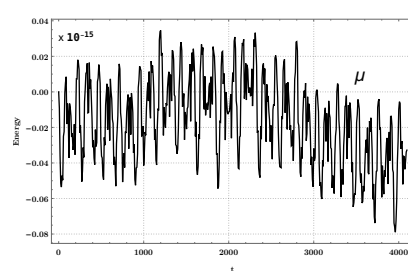


(d) OSS: energia errorearen batezbestekoa

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



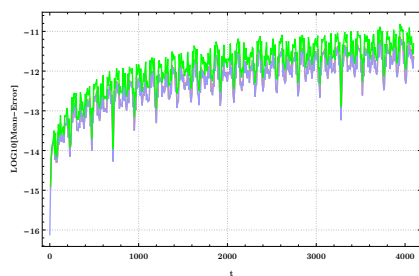
(a) NCDP: energia errorea.



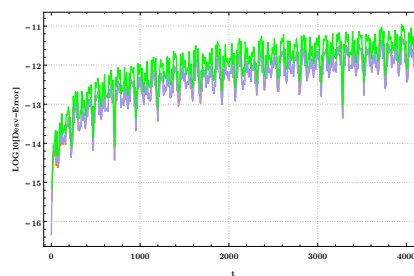
(b) NCDP: energia errorearen batezbestekoa.

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

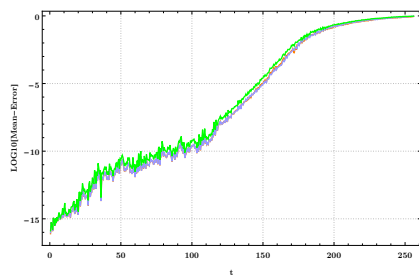
Zenbakizko esperimenteren atala amaitzeko, 5.6. irudian, FPIEA, DP eta Hairer-en implementazioen integrazioen kokapen errorearen eboluzioa (batezbestekoa eta desbideratze estandarra) erakutsi ditugu. Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako gure implementazioa, implementazio optimoarengandik oso gertu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



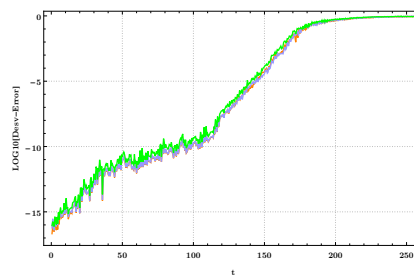
(a) NCDP: kokapen errorearen batezbestekoa.



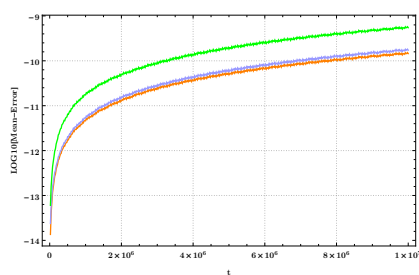
(b) NCDP: kokapen errorearen desbideratzea.



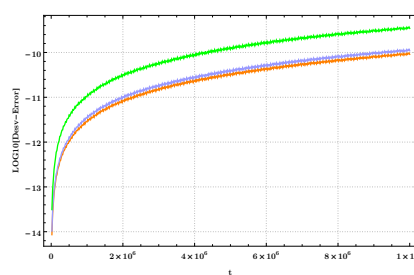
(c) CDP: kokapen errorearen batezbestekoa.



(d) CDP: kokapen errorearen desbideratzea.



(e) OSS: kokapen errorearen batezbestekoa.



(f) OSS: kokapen errorearen desbideratzea.

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

Biribiltze errorearen estimazioa

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

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

5.5. Laburpena

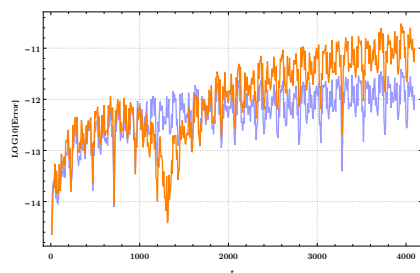
Runge-Kutta metodo implizituak (adibidez, Gauss nodoetan oinarritutako Runge-Kutta kolokazio metodoak) Hamiltondar sistemen doitasun altuko integrazioetarako aproposak dira. Problema ez-zurrunetarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako inplementazioa, Newton metodoaren iterazioan oinarritutako inplementazioak baino eraginkorragoa da.

Inplementazio berri honetan, biribiltze errorearen eragina txikitzeko ahalegin berezia egin dugu eta gainera, biribiltze errorearen estimazioa kalkulatzeko aukera eman dugu. Gure inplementazioak sortzen duen biribiltze errorearen eboluzioaren estimazioa lor daiteke, eta puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako inplementazio optimoaren, antzeko eboluzioa du. Eta zentzu honetan, gure inplementazioa ia optimoa da. Zenbakizko esperimenduek hala baieztatu dute.

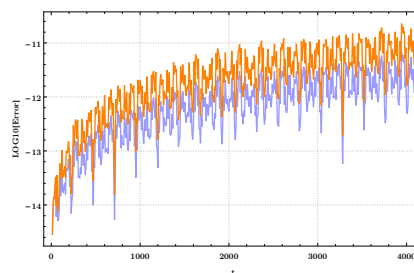
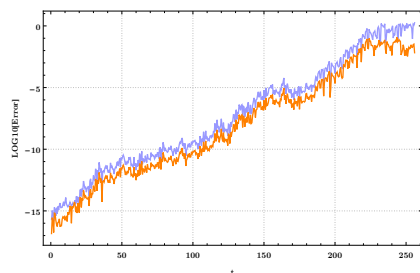
Inplementazioaren gakoetako bat, puntu-finkoaren iterazioaren geratze irizpide berria da. Geratze irizpidea, beste eremu batzuetan ere aplikagarria izan daitekeela pentsatzen dugu.

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

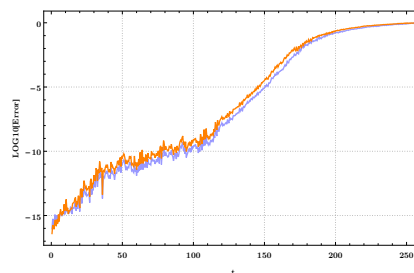
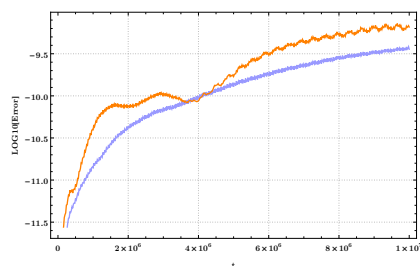
Azkenik, aipatu nahi dugu, atal honen edukiak [Numerical Algorithms](#) aldizkarian publikatu direla [7] eta inplementazioaren kodea, helbide honetan <https://github.com/mikelehu/IRK-FixedPoint> eskuragarri jarri dugula.



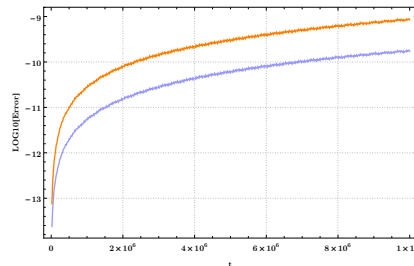
(a) NCDP: jatorrizko hasierako balioak

(b) NCDP: perturbatutako $P = 1000$ integrazio

(c) CDP: jatorrizko hasierako balioak

(d) CDP: perturbatutako $P = 1000$ integrazio

(e) OSS: jatorrizko hasierako balioak

(f) OSS: perturbatutako $P = 1000$ integrazio

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

6. Kapituluia

IRK: Newtonen Iterazioa

6.1. Sarrera

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

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

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

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

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

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

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

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

```

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

```

Algoritmoa 20: Newton sinplifikatua

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

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

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

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

6.2. IRK-Newton estandarra

Demagun honako hasierako baliodun problema,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Newton iterazioa

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Newton sinplifikatuaren iterazioa

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

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

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

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

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

non,

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

Newton super-simplifikatuaren iterazioa

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

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

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

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

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

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

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

Algoritmoa

```

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

```

Algoritmoa 21: IRK (Newton super-sinplifikatua)

6.3. IRK-Newton eraginkorra

Ekuazio-sistema

Atal honetan, honako ekuazio-sistema lineala modu eraginkorren askatzeko inplementazioa proposatuko dugu,

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

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

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

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

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

1. Sinplektikoa

Runge-Kutta metodoa sinplektikoa izateko baldintza,

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

2. Simetrikoa

Runge-Kutta metodoa simetrikoa izateko baldintza,

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

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

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

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

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

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

non

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

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

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

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

Ekuazio-sistemaren adierazpen matriziala lagungarria izan daiteke,

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

Aldi berean, koefiziente notazio berri hau finkatuta,

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

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

1. Sinplektikoa

Runge-Kutta metodoa sinplektikoa da,

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

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

2. Simetrikoa

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

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

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

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

IRK metodo sinplektikoen garapena

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

IRK metodo simetriko sinplektikoen garapena

Atal honetan, (6.15) propietate sinplektikoaz gain, (6.16) simetria propietatea ere betetzen duten IRK metodoak kontsideratuko 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,

$$y_i = \frac{\sqrt{2}}{2}(x_{s+1-i} + x_i), \quad i = 1, \dots, [s/2],$$

$$y_i = \frac{\sqrt{2}}{2}(x_{s+1-i} - x_i), \quad i = m+1, \dots, s,$$

$$y_m = x_m, \quad s \text{ bakoitia bada.}$$

2. K matrizea

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

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

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

3. D matrizea

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

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

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

4. Q matrizea

(6.24) simetrikoa izategatik, berdintza hauek baieztatu daitezke,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Matrizearen egitura

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

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

non

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

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

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

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

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

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

Goiko ekuazio-sistema honako notazioaren arabera,

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

era honetan berridatziko dugu,

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

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

non,

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

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

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

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

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

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

non

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

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

IRK Newton: konplexutasun analisia

$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J)\Delta Y = r$ ekuazio sistema modu eraginkorrean askatzeko, inplementazio estandarren [22, 52] eta gure inplementazioen konplexutasunak konparatuko ditugu.

Inplementazio estandarra

Butcher [22] edota Hairer-en inplementazio [52] estandarren konputazioa bi modutan egin daiteke:

1. Zenbaki konplexuen aritmetika erabiliz

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 errealeen aritmetika erabiliz

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

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

Hairer-en inplementazioan,

- 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 inplementazio berria

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

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

Gure inplementazioan,

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

Konplexutasun konparaketa

Lehenengo eragiketa aljebraikoen konplexutasunak gogoratuko ditugu,

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

6.1. taulan bi inplementazioen konplexutasunen laburpen teorikoa erakutsi dugu eta gure inplementazioa estandarra baino eraginkorragoa dela ondorioztatu daiteke.

6.4. IRK-Newton estandarra (formulazio berria)

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

6.1. Taula: $(I_s \otimes I_d - h A \otimes J)\Delta Y = r$ ekuazio sistema modu eraginkorrean askatzeko, implementazio estandarren eta gure implementazioaren konplexutasunen konparaketa. Konparaketa ekuazio-sistema bikoitia $s = 2m$ eta bakoitia $s = 2m + 1$ denenerako erakutsi dugu

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

IRK metodoaren formulazio estandarra (6.4), era honetan berridatziko dugu,

$$\Phi(y, t, h) := y + \sum_{i=1}^s L_i, \quad (6.38)$$

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

$$L_i = h b_i f(t + c_i h, y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j), \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.39)$$

eta

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

Newton sinplifikatuaren iterazioa

Newtonen iterazioa formulazio berriarekin honakoa izango da; $L_i^{[0]}$ hasieratu eta $k = 1, 2, \dots$ iterazioetarako, $L_i^{[k]}$ hurbilpenak era honetan kalkulatu ditugu,

$$\begin{aligned}
 1) \quad & Y_i^{[k]} := y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}, \quad i = 1, \dots, s, \\
 & g_i^{[k]} := -L_i^{[k-1]} + h b_i f(t + c_i h, Y_i^{[k]}), \quad i = 1, \dots, s, \\
 2) \quad & \text{Askatu } \Delta L_i^{[k]} \\
 & \Delta L_i^{[k]} - h b_i J_i^{[k]} \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \\
 & \text{non } J_i^{[k]} = \frac{\partial f}{\partial y}(t + c_i h, Y_i^{[k-1]}), \quad i = 1, \dots, s, \\
 3) \quad & L^{[k]} := L^{[k-1]} + \Delta L^{[k]}.
 \end{aligned} \tag{6.40}$$

Newton sinplifikatuaren iterazioan, $J_i^{[k]}$ Jacobiarra $J_i^{[0]} = \partial f / \partial y(t + c_i h, Y_i^{[0]})$ $i = 1, \dots, s$ Jacobiarrak ordezkatzeko da eta askatu beharreko ekuazio-sistema honakoa 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 matritziala erabiliz laburtu daiteke,

$$\left(I_s \otimes I_d - h \begin{bmatrix} b_1 \mu_{11} J_1^{[0]} & \dots & b_1 \mu_{1s} J_1^{[0]} \\ b_2 \mu_{21} J_2^{[0]} & \dots & b_2 \mu_{2s} J_2^{[0]} \\ \dots & \ddots & \dots \\ b_s \mu_{s1} J_s^{[0]} & \dots & b_s \mu_{ss} J_s^{[0]} \end{bmatrix} \right) \Delta L^{[k]} = g^{[k]},$$

non,

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

Newton super-sinplifikatuaren iterazioa

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

$$(I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J) \Delta L = g. \tag{6.41}$$

non I_d, I_s identitate matrizeak eta B , (b_1, b_2, \dots, b_s) koefizienteen matrize diagonalak diren.

Algoritmoa

Formulazio berriari dagokion Newton super-simplifikatuaren implementazioa, (22) algoritmoan laburtu dugu.

```

 $\tilde{y}_0 = fl(y_0);$ 
 $e_0 = fl(y_0 - \tilde{y}_0);$ 
for  $n \leftarrow 0$  to  $(endstep - 1)$  do
     $k = 0;$ 
    Hasieratu  $L_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s;$ 
     $J = \frac{\partial f}{\partial y}(y_n);$ 
     $M = LU(I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J);$ 
    while (not konbergentzia) do
         $k = k + 1;$ 
         $Y_{n,i}^{[k]} = y_n + (e_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k-1]});$ 
         $g_i^{[k]} = -L_{n,i}^{[k-1]} + hb_i f(t + c_i h, Y_{n,i}^{[k]});$ 
        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
     $\beta_n = e_n + \sum_{j=1}^s \Delta L_{n,j}^{[k]};$ 
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakontentsatua( $\tilde{y}_n, \beta_n, L_n^{[k-1]}$ );
end

```

Algoritmoa 22: IRK (Newton super-simplifikatua)

Interpolazio koefizienteak. $L_{n,i}^{[0]}$ atalen hasieraketarentzat dagokien koefizienteak era honetan definituko ditugu: IRK puntu-finkoaren implementazioan finkatu genituen (5.13) interpolazio koefizienteetatik abiatuta modu errazean definituko

ditugu formulazio honi dagozkion interpolazio koefizienteak.

$$\begin{cases} Y_{n,i}^{[0]} = y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[0]} \\ Y_{n,i}^{[0]} = y_n + \sum_{j=1}^s \nu_{ij} L_{n-1,j} \end{cases} \Rightarrow L_n^{[0]} = (Mu^{-1}Nu)L_{n-1}, \quad (6.42)$$

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

Geratze irizpidea. Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako inplementazioaren-tzat definitutako geratze irizpide berdina (5.15) 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 bete arte,

$$\forall j \in \{1, \dots, sd\}, \quad \min \left(\{|\Delta_j^{[1]}|, \dots, |\Delta_j^{[k-1]}|\} / \{0\} \right) \leq |\Delta_j^{[k]}|. \quad (6.43)$$

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

1. $\Delta L^{[k]}$ gaiak gehitu

$$\delta_n = e_n + \sum_{j=1}^s \Delta L_{n,j}^{[k]}$$

2. Batura konpentsatua

Azkenik, batura konpentsatua aplikatuko dugu,

$$(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[k-1]}, \dots, L_{n,s}^{[k-1]}) \quad (6.44)$$

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

```

 $s_0 = y_n$ 
 $ee = \delta_n$ 
for  $i \leftarrow 1$  to ( $s$ ) do
   $s_1 = s_0$ 
   $inc = L_{n,i}^{[k-1]} + ee$ 
   $s_0 = s_1 + inc$ 
   $ee = (s_1 - s_0) + inc$ 
end
 $y_{n+1} = s_0$ 
 $e_{n+1} = ee$ 
return ( $y_{n+1}, e_{n+1}$ )

```

Algoritmoa 23: BaturaKonpentsatua $S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[k-1]}, \dots, L_{n,s}^{[k-1]})$ funtzioaren inplementazioa da

6.5. IRK-Newton eraginkorra (formulazio berria)

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

$$(I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J) \Delta L = g, \quad (6.45)$$

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

(6.45) ekuazio-lineala ebazteko, aurreko 6.3. atalean (6.14) moduko sistemak askatzeko deskribatutako teknika egokituko dugu. Jarraian, IRK metodo simetriko sinplektikoetarako (6.3. atala) garatutako teknika, formulazio berriko (6.45) sistema ebazteko nola aplikatu daitekeen deskribatuko dugu.

Formulazio estandarretik formulazio berrirako urratsa

Formulazio berriaren inplementazio eraginkorra, (6.3. atala) formulazio estandarrean emandako ekuazioak moldatuz zehaztuko dugu. Aurreko ataleko ekuazioetan, bi formulazioen aldagaien arteko erlazioak ordezkatzuz,

$$\Delta Y = \Delta L (B \otimes I_d)^{-1} \quad (6.46)$$

$$r = (B^{-1} \otimes I_d) g, \quad (6.47)$$

formulazio berrirako ekuazio baliokideak lortuko ditugu.

1. Aldagai aldaketa. Formulazio estandarren (6.30) aldagai aldaketari, (6.46) ekuazioa ordezkatzuz,

$$\Delta L = (BQ_1 \otimes I_d) W' + (BQ_2 \otimes I_d) W''. \quad (6.48)$$

2. $R \in \mathbb{R}^{md}$ matrizea. Formulazio estandarreko R matrizearen (6.33) ekuazioan, (6.47) ekuazioa ordezkatzuz,

$$\begin{aligned} R &= (Q_1^T \otimes I_d) g + h (DQ_2^T \otimes J) g, \\ R &= Q_1^T g + h DQ_2^T g J^T. \end{aligned} \quad (6.49)$$

3. $W'' \in \mathbb{R}^{(s-m)d}$ matrizea. Formulazio estandarren W'' matrizearen (6.32) ekuazioan, (6.47) ekuazioa ordezkatzuz,

$$W'' = -h (D^T \otimes J) W' + (Q_2^T \otimes I_d) g. \quad (6.50)$$

Formulazio berrian, IRK Newton sinplifikatuaren 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) $M \in \mathbb{R}^{d \times d}$ matrizea kalkulatu,

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

- (c) M matrizearen LU deskonposaketa

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

2. (6.45) ekuazio-sistemaren soluzioa ebatzi.

- $R \in \mathbb{R}^{md}$ kalkulatu,

$$R = (Q_1^T \otimes I_d) g + h (DQ_2^T \otimes J) g.$$

- d kalkulatu,

$$d = h J \sum_{i=1}^m \alpha_i (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} R_i,$$

- $\Delta z \in \mathbb{R}^d$, ekuazio-sistematik askatu,

$$M \Delta z = d.$$

- $W_1, \dots, W_m \in \mathbb{R}^d$ kalkulatu,

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

- $W'' \in \mathbb{R}^{sd}$ kalkulatu,

$$W'' = (-hD^T) W' J^T + Q_2^T g.$$

- $\Delta L \in \mathbb{R}^{sd}$ kalkulatu,

$$\Delta L = (BQ_1 \otimes I_d) W' + (BQ_2 \otimes I_d) W'',$$

IRK Newton sinplifikatuaren implementazioa, [24](#) algoritmoan laburtu dugu.

```

 $\tilde{y}_0 = fl(y_0);$ 
 $e_0 = fl(y_0 - \tilde{y}_0);$ 
for  $n \leftarrow 0$  to  $(endstep - 1)$  do
   $k = 0;$ 
  Hasieratu  $L_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s;$ 
   $J = \frac{\partial f}{\partial y}(y_n);$ 
   $M = I_d + J \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1};$ 
  lum = LU(M);
  while (not konbergentzia) do
     $k = k + 1;$ 
     $Y_{n,i}^{[k]} = y_n + (e_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k-1]});$ 
     $g_i^{[k]} = -L_{n,i}^{[k-1]} + hb_i f(t + c_i h, Y_{n,i}^{[k]});$ 
     $R = Q_1^T g + (hDQ_2^T) g J^T;$ 
     $d = h J \sum_{i=1}^m \alpha_i (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} R_i;$ 
    Solve(lum  $\Delta z = d$ );
     $W_i = (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} (R_i + \frac{\alpha_i}{2} \Delta z), i = 1, \dots, m;$ 
     $W^c = (-hD^T) W^c J^T + Q_2^T g;$ 
     $\Delta L = BQ_1 W^c + BQ_2 W^c;$ 
     $L_n^{[k]} = L_n^{[k-1]} + \Delta L_n^{[k]};$ 
    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
   $\delta_n = e_n + \sum_{j=1}^s \Delta L_{n,j}^{[k]};$ 
   $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakompentsatua( $\tilde{y}_n, \delta_n, L_n^{[k-1]}$ );
end

```

Algoritmoa 24: IRK (NSS-Eraginkorra)

6.6. IRK Newtonen iterazio mistoa

Sasi-Newton iterazioa

Newton iterazio bakoitza, (6.40) eskema jarraituz konputatzea da, eta egin beharretako bat ekuazio-sistema askatzea da. IRK metodoaren inplementazio berria ekuazio-sistema hori askatzeko metodoa aldatuko dugu, hau da, honako sistema,

$$\Delta L_i^{[k]} - hb_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.51)$$

non

$$g_i^{[k]} = -L_i^{[k-1]} + hb_i f\left(t + c_i h, y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}\right), \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.52)$$

eta

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

zehazki askatu beharrean, modu iteratiboan askatuko dugu. Horretarako, 25 algoritmoa aplikatuko dugu eta $\Delta L^{[k]} \in \mathbb{R}^{sd}$ soluzioaren $\Delta L_i^{[k,0]}$, $\Delta L_i^{[k,1]}$, $\Delta L_i^{[k,2]}$, ... hurbilpenak kalkulatu ditugu.

$$\Delta L^{[k,0]} = (I_s \otimes I_d - hBAB^{-1} \otimes J)^{-1} g^{[k]};$$

while GeratzeErizpidea ($fl_{32}(\Delta L^{[k,0]}), \dots, fl_{32}(\Delta L^{[k,l]})$) **do**

$$l = l + 1;$$

$$G_i^{[k,l]} = g_i^{[k]} - \Delta L_i^{[k,l-1]} + hb_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k,l-1]}, \quad i = 1, \dots, s;$$

$$\Delta L^{[k,l]} = \Delta L^{[k,l-1]} + (I_s \otimes I_d - hBAB^{-1} \otimes J)^{-1} G^{[k,l]};$$

end

Algoritmoa 25: Barne iterazioa

non $fl_{32}(x)$, $x \in \mathbb{R}$ zenbakitik gertuen dagoen 32-biteko IEEE doitasun arrunteko balioa den.

IRK inplementazio berri honen 26 algoritmoan, (6.51) ekuazio-sistema linealaren J_i Jacobiari matrizeen ebaluazioak, doitasun arrunta duten Y_i atalekin kalkulatu ditugu. Beraz, 25 algoritmoaren iterazioen geratze irizpidea, $fl_{32}(\Delta L^{[k,l]}) = fl_{32}(\Delta L^{[k,l-1]})$ doitasun arruntean betetzen dela aztertzea nahikoa izango dugu.

IRK Newton Mistoa

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 kalkulatu dugu:

1. $L^{[0]} = 0 \in \mathbb{R}^{sd}$ atalak hasieratu, eta Newton super-simplifikatuaren iterazioak aplikatu ((6.40) iterazioaren ekuazio-sistema, (6.41) sistemarekin ordezkaturaz),

$$L^{[1]} = L^{[0]} + \Delta L^{[1]}, \quad L^{[2]} = L^{[1]} + \Delta L^{[2]}, \dots$$

geratze irizpidean, $\text{fl}_{32}(L^{[k]}) = \text{fl}_{32}(L^{[k-1]})$ bete arte.

2. $L^{[k]}$ berriari dagokion Jacobiarrak ebaluatu

$$J_i = \frac{\partial f}{\partial y} \left(t + c_i h, \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k]} \right), \quad i = 1, \dots, s.$$

3. Lehen fasean lortutako $\Delta L^{[k]} \in \mathbb{R}^{sd}$ balioa, (6.51) ekuazio-sistema linealaren $\Delta L^{[k]}$ soluzio zehatzaren $\Delta L^{[k,0]}$ hurbilpena kontsideratu eta 25 algoritmoa aplikatu, $\Delta L^{[k]}$ soluzioaren $\Delta L^{[k,\ell]}$ hurbilpena (gutxienez doitasun arruntarekin) lortzeko.
4. $L^{[k]} = L^{[k-1]} + \Delta L^{[k,\ell]}$, eta $k = k + 1$ eguneratu ondoren, Sasi-Newton iterazio bat aplikatu dugu bigarren urratsean kalkulatu dugu J_i Jacobiarren balioak erabiliz. Ekuazio-sistema linealaren (6.51)-(6.52), $\Delta L^{[k]}$ soluzioaren $\Delta L^{[k,\ell]}$ hurbilpenak (berri ere doitasun arruntan) 25 algoritmoa aplikatuz kalkulatu ditugu.
5. Azkenik, $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = \tilde{\Phi}(\tilde{y}_n, e_n, t_n, h)$ urrats berriaren zenbakizko soluzioa kalkulatu dugu,

$$\tilde{\Phi}(\tilde{y}_n, e_n, t_n, h) = (\tilde{y}_n + e_n) + \sum_{i=1}^s (L_{n,i}^{[k-1]} + \Delta L_{n,i}^{[k,\ell]}).$$

Horretarako, Kahan-en batura konpentsatua (10 algoritmoa) modu honetan aplikatu dugu:

- (a) $\Delta L^{[k]}$ gaien batura (magnitute txikiko bektoreen batura).

$$\delta_n := e_n + \sum_{i=1}^s \Delta L_{n,i}^{[k,\ell]}$$

- (b) Batura konpentsatua.

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

Inplementazio honen hainbat zehaztasun azpimarratuko ditugu:

- Algoritmoaren era honetako sistema linealak $(I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J)$, 7.5.ataleko Newton inplementazio eraginkorrarekin (24 algoritmoa) askatuko ditugu.
- $\mu_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteek, zehazki (5.8) propietate sinplektikoa eta simetria propietatea $\mu_{j,i} = \mu_{s+1-i,s+1-j}$ betetzen dituzte.
- (6.52) ekuazioaren $g_i^{[k]}$ ($i = 1, \dots, s$) hondarren konputaziorako, $y \in \mathbb{R}^d$ balioaren ordeaz, $\tilde{y} + e$ ($\tilde{y}, e \in \mathbb{F}^d$) espresioa erabili beharko litzateke. Hala ere, hori horrela egitearen eragina, oso txikia izango litzateke, eta azken Sasi-Newton iterazioan bakarrik (4.fasea) kontutan hartzea erabaki dugu. Gainera, azken Sasi-Newtonen iterazioan, (6.52) ekuazioan y -ren ordeaz $\tilde{y} + e$ erabili beharrean, J_i Jacobiarrak erabili ditugu honako hurbilketa egiteko:

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

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

Implementazioaren algoritmo osoa, 26 algoritmoan laburtu dugu.

```

 $L^{[0]} = 0;$ 
 $J = \frac{\partial f}{\partial y}(t + h/2, \tilde{y});$ 
 $M = I_d + J \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1};$ 
Compute the LU decomposition of M;
/***** 1-Fasea *****/;
 $k = 0;$ 
while ContFcn( $fl_{32}(L^{[0]}), \dots, fl_{32}(L^{[k]})$ ) do
     $k = k + 1;$ 
     $Y_i^{[k]} = \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
     $f_i^{[k]} = f(t + c_i h, Y_i^{[k]}), i = 1, \dots, s;$ 
     $g_i^{[k]} = h b_i f_i^{[k]} - L_i^{[k-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
     $\Delta L^{[k]} = (I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J)^{-1} g^{[k]};$ 
     $L^{[k]} = L^{[k-1]} + \Delta L^{[k]};$ 
end
/***** 2-Fasea *****/;
 $J_i = \frac{\partial f}{\partial y}(t + c_i h, \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k]}), i = 1, \dots, s;$ 
/***** 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
     $\ell = \ell + 1;$ 
     $G_i^{[k,\ell]} = g_i^{[k]} - \Delta L_i^{[k,\ell-1]} + h b_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k,\ell-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
     $\Delta L^{[k,\ell]} = \Delta L^{[k,\ell-1]} + (I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J)^{-1} G^{[k,\ell]};$ 
end
 $L^{[k]} = L^{[k-1]} + \Delta L^{[k,\ell]};$ 
/***** 4-Fasea *****/;
 $k = k + 1;$ 
 $Y_i^{[k]} = \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
 $f_i^{[k]} = f(t + c_i h, Y_i^{[k]}), i = 1, \dots, s;$ 
 $g_i^{[k]} = (h b_i f_i^{[k]} - L_i^{[k-1]}) + h b_i J_i e, i = 1, \dots, s;$ 
 $\ell = 0;$ 
 $\Delta L^{[k,0]} = (I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J)^{-1} g^{[k]};$ 
while ContFcn( $fl_{32}(\Delta L^{[k,0]}), \dots, fl_{32}(\Delta L^{[k,\ell]})$ ) do
     $\ell = \ell + 1;$ 
     $G_i^{[k,\ell]} = g_i^{[k]} - \Delta L_i^{[k,\ell-1]} + h b_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k,\ell-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
     $\Delta L^{[k,\ell]} = \Delta L^{[k,\ell-1]} + (I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J)^{-1} G^{[k,\ell]};$ 
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 26: IRK Newtonen iterazio mistoa

6.7. Zenbakizko esperimentuak

Newton iterazioan oinarritutako 6-ataletako Gauss kolokazio metodoaren implementazioarekin egindako zenbakizko esperimentuak azalduko ditugu. Esperimentu hauen konputaziorako, 64-bitoko doitasuneko IEEE koma-higikorreko aritmetika erabili dugu.

Problemak

Pendulu bikioitz zurruna

Pendulu bikioitz zurrunaren problemaren Hamiltondarra eta parametroak, 3.2. atalean definitu ditugu. k parametroak malgukiaren zurruntasun maila finkatzen du: $k = 0$ balioarentzat, problema ez da zurruna eta problemaren zurruntasuna, k balioarekin batera handitzen da.

Hasierako balioak, era honetan aukeratu ditugu: $k = 0$ problema ez zurrunarentzat, [31] artikulutik izaera ez-kaotikoa duen hasierako balioa hartu dugu: $q(0) = (1.1, -1.1)$ eta $p(0) = (2.7746, 2.7746)$. $k \neq 0$ problemen hasierako balioak,

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

espresioen bidez finkatu ditugu, horrela sistemaren energia $k \rightarrow \infty$ handitzen den heinean, bornatua dago.

Integrazio guztiak, $h = 2^{-7}$ urrats luzera erabiliz egin ditugu; problema ez zurrunarentzat ($k = 0$) trunkatze errorea biribiltze errorea baino txikiago izan dadin aukeratu dugu. Trunkatze errorea, biribiltze errorea baino handiagoa izango da $k > 0$ zurruntasun balio handietarako. $T_{end} = 2^{12}$ segundoko integrazioak egin ditugu eta zenbakizko soluzioa, $m = 2^{10}$ urratsero itzuli dugu.

Biribiltze errorearen azterketa

Lehenengo, Newtonen iterazioan oinarritutako IRK implementazio berriaren biribiltze errorearen hedapena egokia dela aztertuko dugu. Aurreko artikuluan [7], biribiltze errorearen hedapena gutxitzeko ahalegin berezia eginez, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK implementazioa proposatu genuen. Bi implementazioen, 6-ataleko Gauss kolokazio metodoaren biribiltze erroreak konparatuko ditugu.

Pendulu bikoitzaren k parametroaren hiru balioetarako, energia errorearen azterketa zehatza egin dugu: $k = 0$, non biribiltze errorea trunkatze erroreari nagusitzen zaion; $k = 2^{10}$, non bi erroreak tamaina berekoak diren; eta $k = 2^{12}$, non trunkatze errorea biribiltze erroreari nagusitzen zaion. Biribiltze errorearen

konparaketa sendoago izan dadin ([55] lanean bezala), azterketa estatistikoa egin dugu. Problema bakoitzarentzat, hasierako balioak $\mathcal{O}(10^{-6})$ errore tamainako ausaz perturbatutako $P = 1000$ integrazio konputatu ditugu.

6.1. irudian, zenbakizko integrazioek gure inplementazio berriaren biribiltze errorearen propagazio ona erakusten dute. Alde batetik, $k = 0$ eta $k = 2^{10}$ balioetarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako inplementazioak energiaren grapenaren batezbestekoak, drift lineala agertzen du eta Newton iterazioan oinarritutako inplementazioak, ordea ez du energia driftarik agertzen. Beste alde batetik, bi inplementazioetan, energiaren desbideratze estandarrak antzekoak dira eta $t^{1/2}$ espresioaren proportzionalak dira.

Puntu-finkoa versus Newton iterazioa

6.2. taulan, k parametroaren lau balioetarako, bi inplementazioen eraginkortasunaren adierazle nagusienak laburtu ditugu.

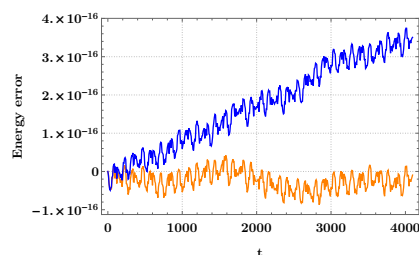
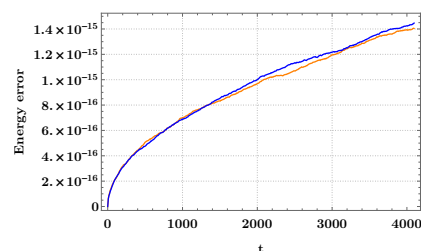
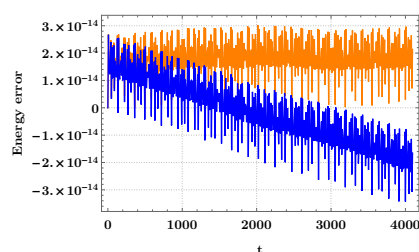
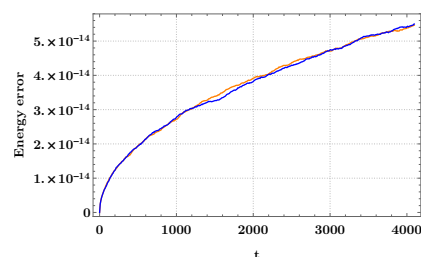
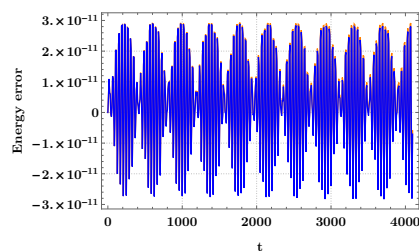
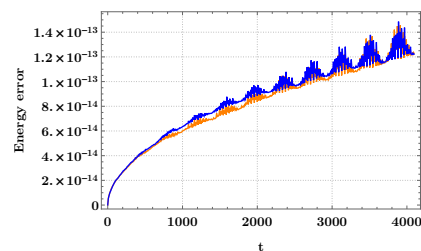
6.2. Taula:

| k | 0 | 2^3 | 2^6 | 2^8 |
|-------|--------|-------|-------|-------|
| E_0 | -14.39 | -5.75 | -5.64 | -5.64 |

| Fixed-points it. | | | | |
|---------------------|------------------------|------------------------|------------------------|-----------------------|
| Elapsed-time (sec.) | 10 | 12 | 19 | 51 |
| It. per step | 8.58 | 11.1 | 22. | 64.2 |
| Energy | 2.96×10^{-15} | 1.81×10^{-14} | 2.94×10^{-11} | 6.33×10^{-5} |

| Newton it. | | | | |
|---------------------|-----------------------|------------------------|------------------------|-----------------------|
| Elapsed-time (sec.) | 18 | 20 | 19 | 18 |
| It. per step | 5.09 | 5.53 | 5.58 | 5.01 |
| L. solves per step | 11.37 | 12.92 | 12.72 | 11.04 |
| Energy | 1.6×10^{-15} | 1.74×10^{-14} | 2.94×10^{-11} | 6.33×10^{-5} |

Eraginkortasuna neurtzeko, bi inplementazioen exekuzio sekuentzialen CPU-denborak konparatu ditugu. Horrez gain, bi inplementazioen urratseko iterazioen batezbestekoak (It. per step) alderatu ditugu eta Newton inplementazioan, urratseko sistema linealen ebazpenen batezbestekoa (L.solves per step) eman dugu.

(a) $k = 0$ energia errorearen batezbestekoa(b) $k = 0$ energia errorearen desbideratze estandarra(c) $k = 2^{10}$ energia errorearen batezbestekoa(d) $k = 2^{10}$ energia errorearen desbideratze estandarra(e) $k = 2^{12}$ energia errorearen batezbestekoa(f) $k = 2^{12}$ energia errorearen desbideratze estandarra

6.1. Irudia: Energia errorearen batezbestekoaren (ezkerrean) eta desbideratze estandarren eboluzioa (eskuinean), puntu-finkoaren implementazioa (urdinez), eta Newton implementazioa (laranjaz). $k = 0$ problema ez-zurruna (a,b), $k = 2^{10}$ lehen problema zurruna (c,d) eta $k = 2^{12}$ bigarren problema zurruna (e,f)

Zenbakizko soluzioaren doitasuna neurtzeko, energiaren errore erlatiboaren maximoa eman dugu,

$$\max \left| \frac{E(t_n) - E(t_0)}{E(t_0)} \right|, \quad t_n = t_0 + nh, \quad n = 1, 2, \dots$$

k balio txikienetarako, puntu-finkoaren implementazioa Newton implementazioa baino eraginkorragoa da. Baina, pendulu bikoitzaren zurruntasun maila han-

ditzen dugunean, puntu-finkoaren iterazio kopurua gero eta handiagoa den bitartean, Newton inplementazioaren iterazio kopurua mantendu egiten den, eta k handietan txikitu ere bai. Beraz, zurruntasuna handitzen dugunean, Newton inplementazioa gero eta eraginkorragoa bilakatzen da. $k = 2^{18}$ baliotik aurrera, puntu-finkoak ez du konbergitzen eta Newton inplementazioak, antzeko iterazio kopuruarekin konbergitzen du.

6.8. Laburpena

IRK metodoen Newton sinplifikatuaren iterazioen ekuazio-sistema, modu eraginkorrean askatzeko inplementazioa proposatu dugu. Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoaren inplementazio berria aurkeztu dugu eta inplementazio honen biribiltze errorearen hedapena egokia dela baieztatu dugu. Problema zurruntarako, Newton sinplifikatuaren iterazioa, puntu-finkoaren iterazioa baino eraginkorragoa dela ikusi dugu.

Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoen inplementazioen inguruko lan hauek [22, 54] gomendatuko ditugu .

Azkenik, aipatu nahi dugu, atal honen edukiak [Numerical Algorithms](#) aldizkarian publikatutako [6] artikuluan aurki daitezkeela eta inplementazioaren kodea, helbide honetan <https://github.com/mikelehu/IRK-Newton> eskuragarri jarri dugula.

7. Kapitulu

IRK metodo sinplektikoen bidezko eguzki-sistemaren integrazioa

7.1. Sarrera

Kapitulu honen jatorrizko helburua, aurreko bi kapituluetan landutako IRK metodo sinplektikoen inplementazioak (5. kapituluaren puntu-finkoaren iterazioan oinarritutakoa eta 6. kapituluaren Newton sinplifikatuaren iterazioan oinarritutakoa) eguzki sistemaren zenbakizko integrazioarako aplikatzea da. Zenbait proba egin ondoren, ondorioztatu dugu Newton-en iterazio sinplifikatuan oinarritutako inplementazioa baino eraginkorragoa dela kasu honetan puntu finko partizionatuan oinarritutako inplementazioa. Bestalde, eguzki-sistemaren simulazioarako ekuazio diferentzialen sistemak ekuazio Kepleriarren perturbazio gisa har daitezkeenez, honetaz baliatzen saiatzea erabaki dugu IRK metodo sinplektikoen bidezko zenbakizko integrazio eraginkorrak lortze aldera.

Helburu horrekin, kapitulu honetan ekuazio diferentzial Kepleriarren perturbazio gisa har daitezkeen ekuazio diferentzialen sistemen zenbakizko integrazioarako metodo berri bat proposatuko dugu. Gure metodo berria ondorengo ideian oinarritzen da: fluxu Kepleriarrean oinarritutako aldagai aldaketa bat aplikatuz, aldagai berrietan idatzitako ekuazio diferentzialetatik alde Kepleriarra desagerrarazi, eta dagokien ekuazio sistemari IRK metodo sinplektiko bat aplikatzea.

Proposatuko dugun metodoa, Runge-Kutta implizitu konposatua (RKIK), sinplektikoa eta denborarekiko simetrikoa da, neurri batean, splitting metodoen antzekoa. Aldagai berriekiko ekuazio diferentzialak, magnitude txikiko balioak hartzen dituzte eta honek, hainbat abantaila izango ditu. Lehenik, eguzki-sistemaren problemaren trunkatze errore nagusia ezabatzen dugunez, urrats luzera handiagoak erabili ahal izango ditugu. Bigarrenik, aldagai berriekiko ekuazio diferentzialen zenbakizko ebazpenean, biribiltze errorearen eragina txikiagoa izango da

(batura konpentsatuaren algoritmoan bit gutxiago galduko ditugu). Hirugarrenik, puntu-finkoaren iterazioek konbergentzia azkarragoa izango dute (aldagai berrietako ekuazioen espresioen deribatu partzialak tamaina txikikoak direlako).

Lehenengo, problema perturbatuertako oinarrizko metodoa azalduko dugu, perturbatu gabeko zatiaren fluxuaren bidezko aldagai aldaketan oinarritutako integrazio metodoaren zehaztapenak emango ditugularik. Ondoren, aipatutako integrazio eskema orokorra hainbat ekuazio Kepleriarren perturbazio gisa har daitezkeen sistemertako aplikatzeko zenbait xehetasun emango ditugu. Azkenik, metodo berri hau eguzki-sistemaren eredu sinplifikatu baterako aplikatuko dugu, eta ezagutzen diren hainbat metodo esplizitu sinplektikorekin (doitasun altutarako splitting eta konposizio metodoekin) konparatuko dugu. Aipatutako eguzki-sistemaren eredu sinplifikatua, eguzkia, zortzi planetak, eta Pluton hartzen dituen 10 gorputzeko eredu Newtoniarra da, koordenatu Heliozentriko kanonikotan adierazia (ikus B.2. eranskina).

7.2. Sistema perturbatuertako integrazio metodo simetriko mota orokor bat: Runge-Kutta inplizitu konposatua (RKIK)

Demagun honako ekuazio diferentzialen sistema dugula,

$$\frac{du}{dt} = k(u) + g(u, t), \quad u(t_0) = u_0 \in \mathbb{R}^D \quad (7.1)$$

non $g(u, t)$ perturbazio gisa hartzen dugun. Demagun gainera perturbatu gabeko zatia,

$$\frac{du}{dt} u = k(u), \quad (7.2)$$

edozein hasierako baliotarako zehazki ebazteko gai garela, alegia, bere t -fluxua $\varphi_t : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^D$ zehazki ebazteko gai garela. Gogora dezagun fluxuaren definizioz,

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi_t(u) \equiv k(\varphi_t(u)) \quad (7.3)$$

identitatea daukagula.

Esate baterako, (7.2) sistema Kepleriarra izan liteke, hau da,

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{\mu}{\|q\|}, \quad (7.4)$$

funtzio Hamiltondarrari dagokion EDA sistema, non $u = (q, p) \in \mathbb{R}^6$, eta m eta μ parametro konstanteak diren. (Ikus xehetasun gehiagorako B.1. eranskina.)

7.2. Sistema perturbatueterako integrazio metodo simetriko mota orokor bat: Runge-Kutta inplizitu konposatu

Eguzki-sistemaren simulaziorako aplikatzerakoan, perturbatu gabeko (7.2) sistema hainbat ekuazio Kepleriar independentez osatuta egongo da, eta $g(u, t)$ perturbazioan, ekuazio Kepleriar horien arteko interakzioa biltzen dituen gaiak izango ditugu. (Xehetasun gehiagorekin azalduko dugu kasu hau 7.3. atalean).

Runge-Kutta inplizitu konposatuaren h luzerako urrats bat definitzeko, u_0 hasierako balioa ezaguturik (7.1) problemaren $u(t)$ soluzioaren $t = t_0 + h$ uneko balioa hurbiltzeko prozedura zehaztu behar dugu. Horretarako, (7.1) sistemari aldagai aldaketa bat aplikatuko diogu, eta aldagai berrietan idatzitako problema ebartziko dugu IRK metodo sinplektiko baten bidez. Aplikatuko dugun aldagai aldaketa honakoa da

$$u = \varphi_{t-t_0-h/2}(U) \quad \rightarrow \quad U = \varphi_{-t+t_0+h/2}(u).$$

Aldagai berrietan idatzitako ekuazio diferentzialen sistema lortzeko, honakoa egingo dugu,

$$\frac{d}{dt}u(t) = \frac{d}{dt}(\varphi_{t-\tau}(U(t))), \quad (7.5)$$

non $\tau = t_0 + h/2$ den. Eskuin aldeari katearen erregela aplikatuz, eta ezker alderako (7.1) eta aldagai aldaketa kontutan hartuz, eta $U(t)$ idatzi ordez U jarritz,

$$k(\varphi_{t-\tau}(U)) + g(\varphi_{t-\tau}(U), t) = \frac{\partial}{\partial t}\varphi_{t-\tau}(U) + \varphi'_{t-\tau}(U) \frac{d}{dt}U, \quad (7.6)$$

non $\varphi'_{t-\tau}(U)$ espresioak fluxuaren U aldagaiekiko matrize Jacobiarra adierazten duen. Ondoren, (7.3) identitatea aplikatuz, honakoa lortzen dugu

$$g(\varphi_{t-\tau}(U), t) = \varphi'_{t-\tau}(U) \frac{d}{dt}U, \quad (7.7)$$

eta beraz, jatorrizko (7.1) ekuazio diferentzialen problema U aldagai berritan idaztea lortu dugu, hau da,

$$\frac{d}{dt}U = (\varphi'_{t-\tau}(U))^{-1} g(\varphi_{t-\tau}(U), t), \quad U(t_0) = U_0, \quad (7.8)$$

non

$$U_0 = \varphi_{h/2}(u_0)$$

den. Hortaz, (7.8) problemarako $t = t_0$ unetik $t = t_1 := t_0 + h$ unera IRK metodoarekin integratuz, $U_1 \approx U(t_1)$ lortuko dugu, eta aldagai aldaketari buelta emanaz $u(t_1) = \varphi_{h/2}(U(t_1))$ lortzen dugunez, $u_1 \approx u(t_1)$ kalkulatzeko,

$$u_1 = \varphi_{h/2}(U_1)$$

egino dugu.

Orain arte, RKIK metodoaren lehen urratsa nola eman deskribatu dugu, baina $t = t_0$ uneko $u(t_0)$ egoeratik $t = t_1$ uneko $u(t_1)$ egoeraren u_1 hurbilpena lortzeko prozedura berbera erabil dezakegu, $j = 1, 2, 3, \dots$ indizetarako, $t = t_j$ uneko $u(t_j)$ egoeraren u_j hurbilpenetik $t = t_{j+1} := t_j + h$ uneko $u(t_{j+1})$ egoeraren u_{j+1} hurbilpena lortzeko. Kontutan hartu behar da urrats bakoitzean aplikatu beharreko aldagai aldaketa desberdina dela, alegia, $(j + 1)$. urratsean, U aldagai berriak jatorrizko u aldagaiekin $u = \varphi_{t-\tau_j}(U)$ moduan erlazionaturik izango ditugula, non $\tau_j = t_j + \frac{h}{2}$ den. Urrats bakoitzean aplikatutako aldagai aldaketa bereizteko, $(j + 1)$. urratseko aldagai berria $U^{j+1/2}$ gisa adieraziko dugu.

Horrela, $(j + 1)$. urratsean, $u_j \approx u(t_j)$ emanik, lehenik dagokion aldagai berriaren balioa kalkulatu dugu,

$$U_j^{j+1/2} = \varphi_{h/2}(u_j)$$

ondoren, aukeratu dugun IRK metodoaren h luzerako urrats bat aplikatu dugu ondorengo problemarako,

$$\frac{d}{dt}U^{j+1/2} = \left(\varphi'_{t-\tau_j}(U^{j+1/2}) \right)^{-1} g(\varphi_{t-\tau_j}(U^{j+1/2}), t), \quad U^{j+1/2}(t_j) = U_j^{j+1/2}, \quad (7.9)$$

$U_{j+1}^{j+1/2} \approx U^{j+1/2}(t_{j+1})$ hurbilpena lortuz, eta azkenik, RKIK metodoaren urratsa bukatzeko,

$$u_{j+1} = \varphi_{h/2}(U_{j+1}^{j+1/2})$$

kalkulatuko dugu. Laburbilduz:

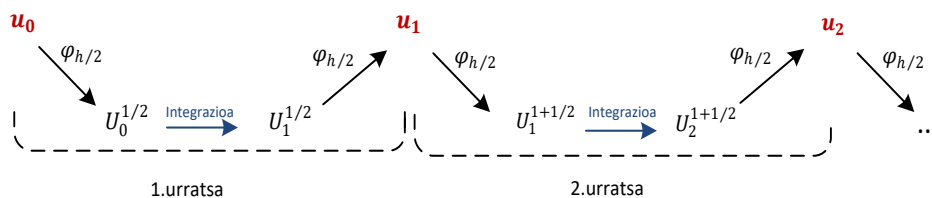
$$\begin{array}{ccc} U_j^{j+1/2} & \xrightarrow{\text{IRK(7.9)}} & U_{j+1}^{j+1/2} \\ \nearrow \varphi_{\frac{h}{2}}(u_j) & & \searrow \varphi_{\frac{h}{2}}(U_{j+1}^{j+1/2}) \\ u_j & & u_{j+1} \end{array}$$

Urrats bakoitzerako aldagai aldaketa definitzeko erabiltzen dugun erreferentzia-ko $\tau_j = t_j + h/2$ unea t_j eta t_{j+1} balioen erdigunea aukeratu dugu. Hori horrela egiteak badu arrazoi bat: urratsa bere osotasunean denborarekiko simetrikoa da, aplikatutako IRK metodoa ere denborarekiko simetrikoa da: Kasu horretan, ikus daiteke aurrera h luzerako urratsa ematea $-h$ luzerako urratsa ematearekin desegiten dela.

RKIK metodoaren integrazio eskema orokorra 7.1. irudian laburtu dugu.

Nolabait, proposatutako RKIK metodoa splitting metodoen antzekoa da, bereziki, bigarren ordenako (2.21) Strang-en splitting metodoaren antzekoa. Gogora dezagun Strang-en metodoa era honetan aplikatzen dela: $\varphi_{h/2}$ fluxua aplikatu,

7.2. Sistema perturbatueterako integrazio metodo simetrikoko mota orokor bat: Runge-Kutta inplizitu konposatua



7.1. Irudia: RKIK metodoaren integrazio eskema orokorra

perturbazioari soilik dagokion ekuazioaren soluzioa kalkulatu h urrats luzerarako, eta berriz $\varphi_{h/2}$ fluxua aplikatu. Fluxuaren aldagai aldaketarekin, gauza bera egiten ari gara, baina $\varphi_{h/2}$ fluxuaren bi aplikazioen artean egiten duguna konplexuagoa izatearen truke, bigarren ordenako metodoa lortu beharrean, aldagai berrietarako aplikatzen dugun IRK metodoaren ordena bereko metodoa lortzen dugu.

Inplementazioaren eraginkortasunaren aldetik, integrazioaren urrats guztietan ez baditugu emaitzak itzuli behar, bi urratsen arteko, $\varphi_{h/2}$ fluxuaren bi konputazioak, φ_h fluxuaren konputazio bakarrarekin konputatuko dugu. Esate baterako, 7.1. irudian, u_1 behar ez bada, zuzenean kalkula daiteke $U_1^{3/2} = \varphi_h(U_1^{1/2})$, fluxua kalkulatzeko funtzioari dei bakarra egin behar da, bi dei egin beharrean.

Azpimarratu beharra dago RKIK metodoaren urrats bakoitza sinplektikoa dela (7.1) sistema perturbatua eta perturbatu gabeko (7.2) sistema biak Hamiltondarrak baldin badira, eta aldi berean, (7.9) problemaren zenbakizko ebazpenerako IRK sinplektikoa erabiltzen bada. Hain zuzen, kasu horretan $\varphi_{h/2}$ sinplektikoa da, eta horren ondorioz (7.9) problema Hamiltondarra denez, IRK sinplektikoaren urrats bakoitza sinplektikoa izango da, eta beraz, RKIK metodoaren $u_j \rightarrow u_{j+1}$ urrats bakoitza ere sinplektikoa izango da.

Azkenik, bai (7.1) sistema perturbatuak eta bai perturbatu gabeko (7.2) sistemak $I(u)$ inbariante bera onartzen badute, antzera ondoriozta daiteke (7.8) problemarako ere $I(U)$ inbariantea dela, eta beraz inbariante hori koadratikoa baldin bada, eta IRK metodoa sinplektikoa baldin bada, RKIK metodoak inbariante hori konstante mantenduko duela.

Urrats bakoitzari dagokion aldagai berrietan idatzitako (7.8) sistemaren eskuintza balioztatzeari dagokionean, sistema perturbatu gabeko Hamiltondarra baldin bada, Jacobiarraren alderantzizkoa kalkulatzeko ekin daiteke. Hain zuzen, bere t -fluxua sinplektikoa denez, $(\varphi'_t(U))^t J \varphi'_t(U) = J$ propietatea betetzen du fluxuak $\forall (t, U) \in \mathbb{R}^{D+1}$, non

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$$

den, eta ondorioz, $G \in \mathbb{R}^D$ emanik

$$(\varphi'_{t-\tau}(U))^{-1}G = J^{-1}(\varphi'_{t-\tau}(U))^T JG. \quad (7.10)$$

Beraz, (7.8) sistemaren eskuinaldeko F espresioa balioztatzeke, hurrengo moduan egin daiteke:

- $u = \varphi_{t-\tau}(U)$,
- $G = g(u, t)$ balioztatu, eta ondoren $\widehat{G} = JG$,
- $\widehat{F} = \varphi'_{t-\tau}(U)^T \widehat{G}$,
- $F = J^{-1}\widehat{F}$.

Goiko algoritmo horretan, hirugarren atala modu eraginkorrean egin daiteke deribazio automatikoko teknikak erabiliz, lehen ataleko kalkulan erabilitako zenbait tarteko aldagai berrerabiliz gero.

Azkenik, aplikazioetan ohikoa izango da perturbazioari dagokion espresioak balio txikiak hartzea. Kasu horretan biribiltze errorearen eragina txikitzeke kome-nigarria da, doitasun mistoa erabiltzea: Oinarrizko doitasunean aplikatzea (batura konpentsatuarekin) IRK metodoa (7.9) problemari, baina doitasun altuagoan aplikatzea 7.1. irudian azaltzen diren $\varphi_{h/2}$ fluxuak (edo φ_h fluxua, irteerarik behar ez den kasuan).

7.3. Sistema Kepleriarren perturbaziotarako aplikazioa

Goian aipatu bezala, eguzki-sistemaren simulaziorako aplikatzerakoan, mugimenduaren ekuazioak hainbat ekuazio Kepleriar independenteren perturbazio gisa har daitezke. Horretan oinarritzen dira hain zuzen, eguzki-sistemaren simulaziorako aplikatzen diren splitting metodoak ((2.4. atala). Era berean, 7.2. atalean garatutako RKIK metodoak aplikatu daitezke kasu horretan.

Demagun problemaren alde Kepleriarren kopurua n dela, eta

$$u = (q_1, v_1, \dots, q_n, v_n, w) \in \mathbb{R}^D,$$

non $w \in \mathbb{R}^{D-6n}$, eta (7.1) moduko sistemaren zenbakizko integrazioa burutu nahi dugula RKIK metodoarekin, perturbatu gabeko (7.2) sistema $(q_i, v_i) \in \mathbb{R}^6$ aldagaietarako sistema Kepleriar independentez osatuta dagoelarik. Zehazkiago,

demagun

$$k(u) = \begin{pmatrix} v_1 \\ -\frac{\mu_1 q_1}{\|q_1\|^3} \\ v_2 \\ -\frac{\mu_2 q_2}{\|q_2\|^3} \\ \vdots \\ v_n \\ -\frac{\mu_n q_n}{\|q_n\|^3} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.11)$$

non $\mu_j > 0$ ($j = 1, \dots, n$) diren.

Kasu horretan, (7.2) sistemaren t -fluxua $u = (q_1, v_1, \dots, q_n, v_n, w)$ punturako aplikatzeko, (q_j, v_j) bakoitzerako dagokion fluxu Kepleriarra aplikatu beharko dugu, eta w bere horretan utzi. Zehazkiago, $u = \varphi_{t-\tau}(U)$ moduko aldagai aldaketa, $U = (Q_1, V_1, \dots, Q_n, V_n, W)$ izanik, horrela definiturik egongo da,

$$u_j = \varphi_{t-\tau}^{[\mu_j]}(U_j), \quad j = 1, \dots, n, \quad w = W, \quad (7.12)$$

non, $j \in \{1, \dots, n\}$ bakoitzerako, $\varphi_{t-\tau}^{[\mu_j]} : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}^6$ dagokion sistema Kepleriarraren $(t - \tau)$ -fluxua den. (Ikus ? eranskina hau praktikan kalkulatzearen inguruko xehetasunetarako.)

Bestalde, aldagai berrietan idatzitako (7.8) ekuazio diferentzialen sistemaren eskuin aldeko espresioa balioztatzeko, 7.2. atalaren amaieran azaltzen den algoritmoa aplikatzeko, $\widehat{G} \in \mathbb{R}^D$ emanik, $\widehat{F} = \varphi'_{t-\tau}(U)^T \widehat{G}$ kalkulatu behar dugu. Hori egiteko, demagun $\widehat{G} = (\widehat{G}_1, \dots, \widehat{G}_n, \widehat{G}_{n+1})$ eta $\widehat{F} = (\widehat{F}_1, \dots, \widehat{F}_n, \widehat{F}_{n+1})$ direla. Notazio horrekin,

$$\widehat{F} = \varphi'_{t-\tau}(U)^T \widehat{G}$$

kalkulatzeko, nahikoa izango da honakoa egitea,

$$\widehat{F}_j = \varphi_{t-\tau}^{[\mu_j]'}(U_j)^T \widehat{G}_j, \quad j = 1, \dots, n, \quad \widehat{F}_{n+1} = \widehat{G}_{n+1}.$$

7.4. Zenbakizko esperimentuak

Zenbakizko esperimentuetarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodo sinplektikoen inplementazioa (5. kapitulua) erabili dugu. Lehenengo, IRK metodo implizituetan oinarritutako bi metodo konparatu ditugu: aldagai aldaketarik gabeko IRK sinplektiko arrunta eta RKIK metodoa. Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketan oinarritutako RKIK metodoaren abantaila argia denez,

hurrengo esperimentuetarako aldagai aldaketa aplikatutako integrazioa bakarrik hartu dugu kontutan.

Hasteko, $s = 6, 8, 9, 16$ ataletako RKIK arteko metodo eraginkorrena aukeratu dugu, *CO1035* konposizio eta *ABAH1064* splitting metodoekin konparatzeko.

RKIK konputaziorako, 64-biteko (*double*) eta 80-biteko (*long double*) doitasunak nahasi ditugu. Konputazioaren zati nagusia, 64-biteko doitasunean egin dugu eta $u_j = \varphi_{h/2}(U_j^{j-1/2})$ eta $U_j^{j+1/2} = \varphi_{h/2}(u_j)$ eta fluxuak kalkulatzeko 80-biteko doitasuna aplikatu dugu. Era honetan, modu merkean soluzioaren doitasuna hobetzea lortu dugu.

RKIK metodoaren exekuzio sekuentziala eta paraleloak egin ditugu. s atalen funtzioen balioztapenak,

$$F_{n,i} = f(Y_{n,i}), \quad i = 1, \dots, s,$$

independenteak dira eta paraleloan kalkula daitezke. $s = 8$ metodoaren integrazio paraleloak egin ditugu eta hari kopurua 2 aplikatu dugu.

Test problema

Test problema gisa 9-planeten problema (3.4. atala) erabili dugu integrazioetarako. Hasierako balioak *DE-430* efemerideen artikulutik hartu ditugu: planeten masak 3.4. taulan laburtu ditugu; eta hasierako kokapen eta abiadurak 3.5. taulan aurki daitezke.

Koordenatu heliozentrikoei dagokien Hamiltondar sistema (B.6),

$$H(q, p) = H_K(q, p) + H_I(q, p),$$

integratu dugu. $H_K(q, p)$ mugimendu Kepleriarrari dagokion Hamiltondarraren aldea da eta $H_I(q, p)$, perturbazioei dagokien Hamiltondarraren aldea da.

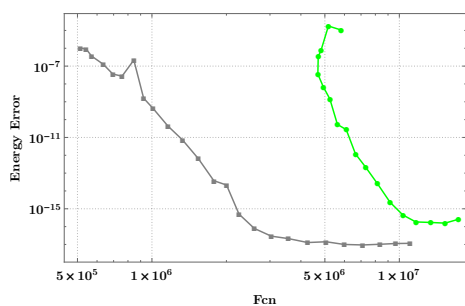
Integrazioen tartea, $t_{end} = 10^6$ egunetakoa da eta zenbakizko integrazioetan, h -ren balio ezberdinak erabili ditugu. $s = 6$ metodoarentzat urrats luzerak aukeratu ditugu eta gainontzeko metodoentzat, s -atalen araberako urrats luzera proportzionalak finkatu ditugu:

$$\begin{aligned} s = 6 : & \quad h = 2^{k/4}, \quad k = 4, \dots, 28, \\ s = 8 : & \quad (8/6)h, \\ s = 9 : & \quad (9/6)h, \\ s = 16 : & \quad (16/6)h. \end{aligned}$$

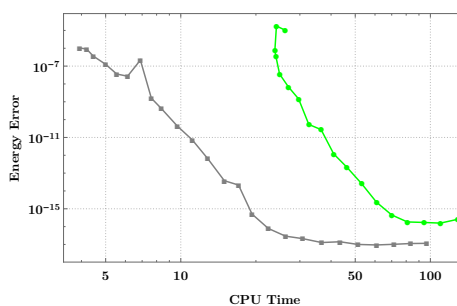
Zenbakizko esperimentueterako, aldagai aldaketa planeta guziei aplikatzea erabaki dugu. 9-planeten probleman, gorputz kopurua txikia denez, Kepler fluxuaren gainkarga esanguratsua da eta barne-planetei bakarrik aplikatzea, eragin-korragoa izan daiteke. Baina, gorputz gehiago kontsideratzen baditugu (esaterako ilargia eta asteroide nagusienak) edo eguzki-sistemaren eredu konplexuagoetan (esaterako erlatibitate efektua gehitzerakoan), perturbazio aldearen konputazioa nagusituko da eta Kepler fluxuaren kalkuluak pisua galduko luke.

IRK eta RKIK metodoen arteko eraginkortasun konparazioak

Hasteko, RKIK integrazio metodo berriak, aldagai aldaketarik aplikatu gabeko IRK metodo sinplektiko arruntekiko suposatzen duen hobekuntza nabarmentzeko, $s = 6$ ataleko (12 ordenako) Gauss-en nodoetan oinarritutako kolokazio metodoa hartuko dugu. Alde batetik, aldagai aldaketarik gabeko inplementazioaren, eta bestetik, IRK metodo berean oinarritutako RKIK metodo berriaren eraginkortasuna konparatuko ditugu. Aldagai aldaketarik gabeko inplementazioari dagokionean, eraginkorra puntu finko partizionatuaren inplementazioa dela ikusi dugu, hasieraketarako aurreko ataleko datuekiko interpolazioa erabiltzen duena. Beraz, inplementazio hori erabili dugu 7.3. irudian azaldutako eraginkortasun konparazioa egiteko. Ekuazio diferentzialen balioztapen kopuruarekiko konparaketan, RKIK metodoa nabarmen eraginkorragoa da. Exekuzio denboren konparaketan aldea txikiagoa da, baina zenbat eta eredu konplexuagoa izan abantaila handituz joatea espero liteke.



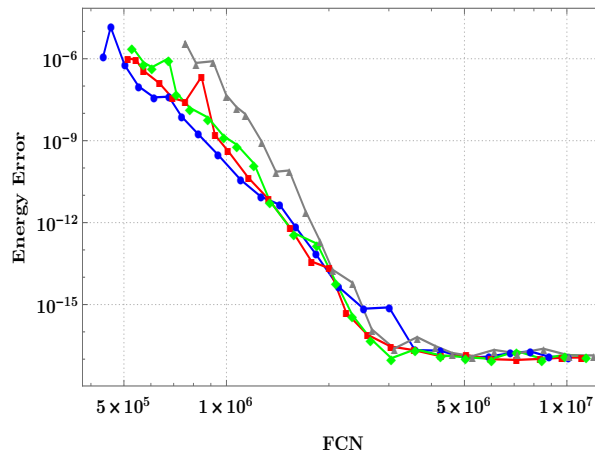
(a) Gauss-en $s = 6$ nodoetan oinarritutako metodo implizituak (FCN).



(b) Gauss-en $s = 6$ nodoetan oinarritutako metodo implizituak (CPU).

7.2. Irudia: Eraginkortasun grafikoak eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu. (a) irudian, ekuazio diferentzialen ebaluazio kopuruarekiko (FCN) eraginkortasuna neurtu dugu. (b) irudian, CPU denborarekiko eraginkortasuna neurtu dugu. Irudi bakoitzean, Gauss-en nodoetan oinarritutako $s = 6$ ataletako bi bertsio konparatu ditugu: IRK berdez eta RKIK grisez

Jarraian, $s = 6, 8, 9, 16$ ataletako RKIK metodoen eraginkortasuna konparatuko dugu. 7.3. irudian, ekuazio diferentzialen sistema zehazten duen funtzioaren balioztapen kopuruarekiko (FCN) eta 7.4. irudian, CPU-denborarekiko (exekuzio paraleloetan *Wall time*) erakutsi dugu. Funtzio balioztapen kopuruarekiko eraginkortasunak, metodoak problemaren eredu konplexuagoan nola jokatuko lukeen erakusten digu eta CPU-rekiko eraginkortasunak, eredu sinple honetarako gertatzen dena azaltzen digu.

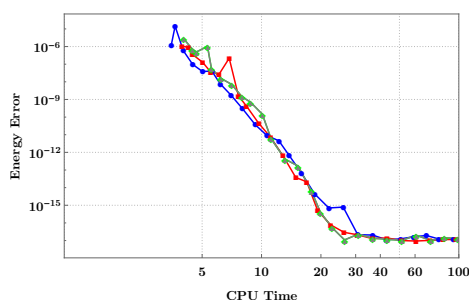


7.3. Irudia: Eraginkortasun grafikoa eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu dugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, ekuazio diferentzialen ebaluazio kopurua (FCN). Gaussen nodoetan oinarritutako s ataletako RKIK metodo sinplektikoen lau integrazio konparatu ditugu: $s = 6$ urdinez, $s = 8$ gorriz, $s = 9$ berdez, eta $s = 16$ grisez

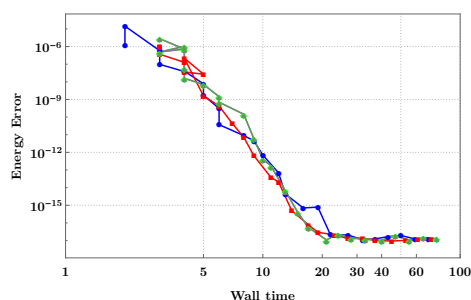
Exekuzio sekuentzialak eta exekuzio paraleloak aztertuz, RKIK metodo eraginkorra aukeratu nahi dugu. Horretarako, biribiltze errorea nagusitzen hasten den inguruko unean gertatutakoa aztertu dugu: $s = 8, 9, 16$ atal kopuruei dagozkien metodoak, $s = 6$ metodoa baino eraginkorragoak azaldu zaizkigu. Bestalde, $s = 8, 9, 16$ atal kopuruei dagozkien metodoak beraien artean oso antzekoak izanik, $s = 8$ ataleko RKIK aukeratu dugu. Bestalde, exekuzio paraleloa, sekuentziala baino eraginkorragoa da. Aipatzekoa da eguzki-sistemaren eredu oso sinplearekin ari garela lan egiten. Eredu konplexuagotarako, paralelizazioaren gainkarga erlatiboa nabarmen txikitzea espero liteke.

Azkenik, $s = 8$ ataletako RKIK metodoak aipatutako eguzki-sistemaren eredu sinplifikaturako aplikatu daitezkeen bi metodo esplizitu eraginkorrekin konparatuko dugu (biak sinplektikoak eta denborarekiko simetrikoak):

- CO1035 gisa adieraziko duguna: Sofroniu eta Spalettaren 10 ordenako eta



(a) Exekuzioa sekuentziala.



(b) Exekuzio paraleloa.

7.4. Irudia: Eraginkortasun grafikoak eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, CPU denbora (exekuzio paraleloan Wall-Time). (a) konputazioa modu sekuentzialean egin dugu eta (b) modu paraleloan hari kopurua 2 izanik. Irudi bakoitzean, Gaussen nodoetan oinarritutako s ataletako RKIK metodo sinplektikoen lau integrazio konparatu ditugu: $s = 6$ urdinez, $s = 8$ gorritz, $s = 9$ berdez, eta $s = 16$ grisez

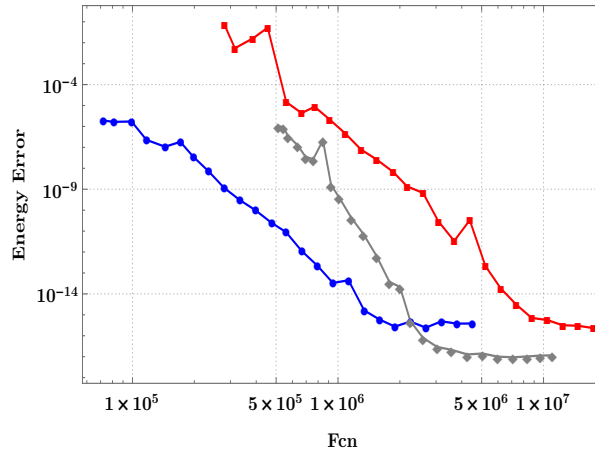
35 ataleko konposizio metodoa da, oinarritzko integratzaile gisa Störmer-Verlet integratzailea hartuta (ikus 2.4. azpiatala).

- ABAH1064 gisa adieraziko duguna, koordinatu Heliozentrikoetarako egokitutako splitting metodoa da, ekuazio diferentzialen sistema hiru zatitan banatuta hartzen dituen: alde Kepleriarra, kokapenen araberako perturbazioa, eta momentuen araberako perturbazioa. Perturbazioa nahikoa txikia denean, 10 ordenako metodo gisa har daiteke (ikus 2.4. azpiatala).

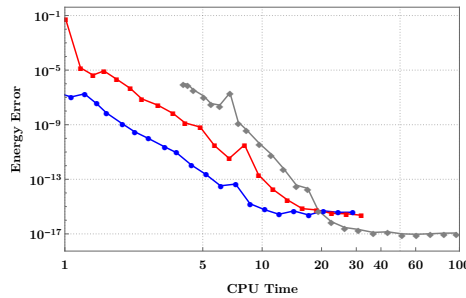
Ekuazio diferentzialen sistema zehazten duen funtzioaren balioztapen kopuruaren araberako eraginkortasun konparazioa 7.5. irudian ikus daiteke. Ikusten denez, RKIK metodoak doitasun hobea lor dezake urrats luzera txikietarako, biritze erroreen eragina txikiago baita. Dena den, urrats luzeagotarako ABAH1064 splitting metodoa eraginkorragoa da.

Bestalde, exekuzio denboraren araberako eraginkortasun konparazioa 7.6. irudian ikus daiteke. RKIK metodoari dagokionez, $s = 8$ ataleko metodoa modu sekuentzialean eta modu paraleloan konparatu dugu beste metodoekin. Eguzki-sistemaren eredu sinplearen integratzearako, splitting metodoak oso eraginkorrak azaldu zaizkigu. RKIK metodoaren exekuzioa paralelizatzeak abantaila erakusten du baina hala ere, splitting metodoak eraginkorragoa izaten jarraitzen du gure test problema sinplerako.

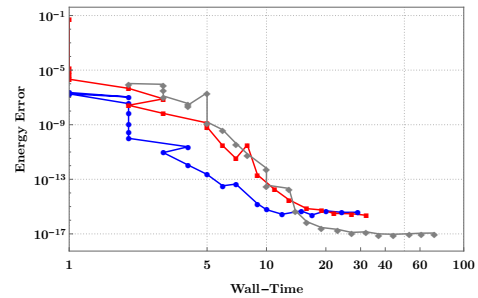
Dena den, eredu errealistagoak (gorputz kopurua handitzen delako, erlatibitate efektua kontutan hartzen delako ...) integratzeko, RKIK metodoak eraginkorra-
goak bilakatzea espero liteke. Splitting metodoen konputazioak, modu trinkoan



7.5. Irudia: Eraginkortasun grafikoa, eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu dugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, ekuazio diferentzialen ebaluazio kopurua (FCN). Hiru integrazio metodo konparatu ditugu: $s = 8$ ataleko RKIK metodoa grisez, *ABAH1064* urdinez eta *CO1035* gorritz



(a) Exekuzio sekuentziala.



(b) Exekuzio paraleloa.

7.6. Irudia: Eraginkortasun grafikoa eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, CPU denbora (exekuzio paralelotan Wall-Time) erakutsi dugu. (a) konputazioa modu sekuentzialean egin dugu eta (b) modu paraleloan, hari kopurua 2 izanik. Irudi bakoitzean, hiru integrazio metodo konparatu ditugu: $s = 8$ RKIK grisez, *ABAH1064* urdinez eta *CO1035* gorritz

kalkulatu behar dira, hau da, atalen konputazioak sekuentzialki exekutatzen dira eta ez du konputazio aldaerarik onartzen. IRK ekuazio inplizituak ebazteko, ordea, teknika ezberdinak konbina daitezke eta eraginkortasuna hobetzeko aukera asko eskaintzen dizkigu. Adibidez [13], iterazio gehienak problemaren eredu simple batekin, doitasun baxuan kalkula daitezke eta bukaerako iterazio pare bat

eredu osoarekin, doitasun altuan. IRK metodoaren s -ataletako funtzioen balioz-tapenak modu paraleloan exekutatu daitezke eta eguzki-sistemaren eredu konple-xuagoa aplikatzen den neurrian, paralelizazioak abantaila handiagoa izatea espero da.

Energia errorea eta errore globalak

Hiru errore mota ezberdin aztertu ditugu: energia errorea; kokapen eta abiaduren errorearen estimazioak; orbita eliptikoaren erdi-ardatz nagusiaren (*semi-major axis*) eta eszentrikotasunaren errorearen estimazioak. RKIK metodoa $h = 10.63$ urrats luzerarekin integratu dugu eta *CO1035*, *ABAH1064* metodoak $h = 4.76$ urrats luzerarekin.

Energiaren eboluzioa

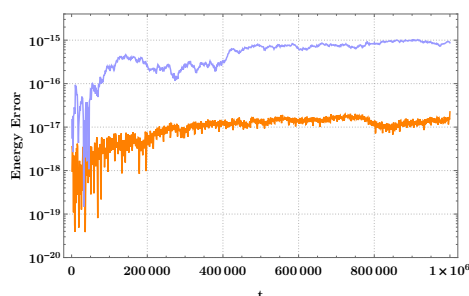
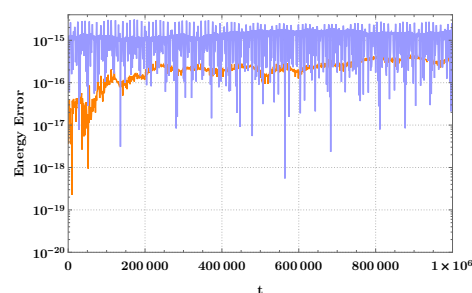
Lau integrazioen energiaren errore erlatiboaren eboluzioak 7.7. irudian erakutsi ditugu. Batetik, RKIK metodoaren doitasun mistoko inplementazioaren abantaila erakusteko, bi inplementazioen errorearen eboluzioak konparatu ditugu: alde bate-tik kalkulu guztietarako 64-biteko (*double*) doitasuna erabiltzen duen inplemen-tazioa, eta bestetik 64-biteko eta 80-biteko (*long double*) inplementazio mistoa erabiltzen duena. Horrez gain, *CO1035* konposizio eta *ABAH1064* splitting me-todoen energia errorearen eboluzioak konpara daitezke aurrekoekin, eskala berean bait daude bi azpi-irudiak. Aipagarria da RKIK metodoaren inplementazio mis-toak *ABAH1064* splitting metodoarekin alderatuz, energia errore txikiagoak lor-tzen dituela.

Kokapen eta abiadura errorearen estimazioak

RKIK ($s = 8$) eta *ABAH1064* metodoen kokapen eta abiaduraren errorearen es-timazioak ikus daitezke 7.8. irudian. Errorearen estimazioa, urrats txikiagoko in-tegrazioaren soluzioarekiko diferentzia gisa kalkulatu dugu. RKIK metodoaren integrazioan, urrats luzera handiagoa erabili arren, barne-planeten kokapen eta abiaduren errore estimazioak, *ABAH1064* splitting metodoaren integrazioan bai-no txikiagoak izan dira.

Eszentrikotasun eta erdi-ardatz nagusiaren errorearen estimazioak

Planeten mugimendu orbitala eliptikoa da. Orbitaren propietateak finkatzen di-tuzten orbita Kepleriarraren bi inbariante hauen errorearen estimazioa kalkulatu dugu:

(a) Gauss metodoa ($s = 8$).

(b) ABAH1064 eta CO1035

7.7. Irudia: Energia errearen eboluzioa lau integrazio metodoetarako erakutsi dugu. Ezkerreko irudian, $s = 8$ ataletako RKIK metodoaren $h = 10,667$ urrats luzerarekin egindako integrazioak erakutsi ditugu: kalkulu guztietarako 64-biteko (*double*) doitasunarekin (urdinez) eta bestetik, 64-biteko eta 80-biteko (*long double*) inplementazio mistoa erabiltzen duena (laranjaz). Eskuineko irudian, splitting/konposizio metodoak erakutsi ditugu: ABAH1064 (laranjaz) eta CO1035(urdinez)

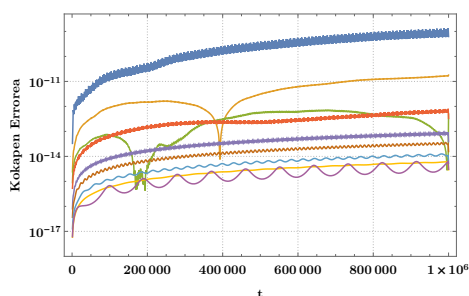
1. a erdi-ardatz nagusia (*semi-major axis*) izeneko inbariantea, orbita eliptikoaren tamaina definitzen duena.
2. e eszentrikotasuna, orbita eliptikoaren forma finkatzen duena.

Bi inbarianteen errearen eboluzioak 7.9. irudian ikus daitezke. Bai RKIK metodorako, eta bai ABAH1064 splitting metodorako, a erdi-ardatz nagusiaren eta e eszentrikotasunaren erroreak, kokapen eta abiaduren erroreak baino txikiagoak dira. Honek esan nahi du, integrazioaren orbitaren tamaina eta forma hobeto mantentzen direla eta errorea, orbitaren fasean nagusitzen dela.

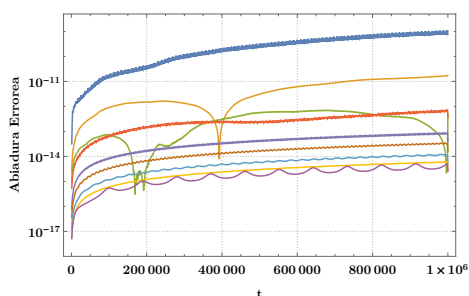
Biribiltze errorea

Hirugarren esperimentu honetan, biribiltze errorea ilustratzeko esperimentua egin dugu eta horretarako, momentu angeluarraren errore erlatiboaren eboluzioan oinarritu gara. Lau faktore hartu behar dira kontutan. Kepler-en fluxuak momentu angeluarra zehazki mantentzen du eta jatorrizko ekuazio diferentzialen inbariante koadratikoa da. Hori dela-eta, Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldatetarekin lortutako ekuazio diferentzialen inbariante koadratikoa ere bada. Integratzeko Runge-Kutta metodo sinplektikoa aplikatu dugunez, inbariante koadratikoa zehazki mantentzen ditu eta beraz, ikusten duguna biribiltze errorea da.

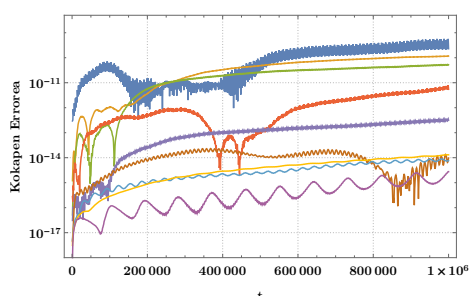
7.10. irudian, $s = 8$ ataleko RKIK metodoarekin, $h = 9.0$ eta $h = 10.63$ urrats luzerarekin integrazioen soluzioen momentu angeluarraren errorea erakutsi dugu eta espero bezala, biribiltze errorea zein den erakusten dute.



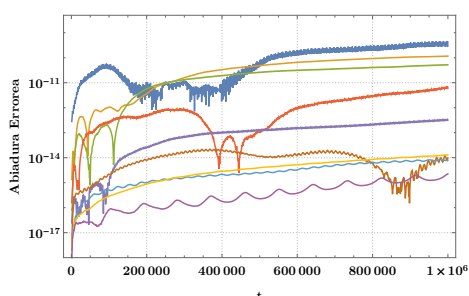
(a) RKIK metodoa (kokapen errorea)



(b) RKIK metodoa (abiadura errorea)



(c) ABAH1064 (kokapen errorea)



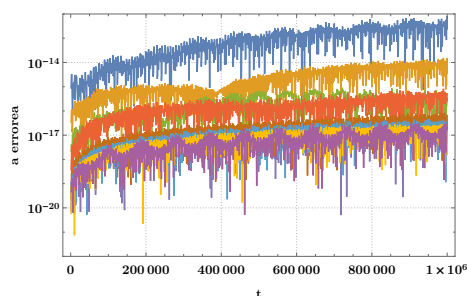
(d) ABAH1064 (abiadura errorea)

7.8. Irudia: Kokapen eta abiaduraren erroreen estimazioak erakutsi ditugu. (a) eta (b) irudietan, $s = 8$ ataleko RKIK metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 10$, 667 urrats luzera aplikatutako integrazioarentzat. (c) eta (d) irudietan, *ABAH1064* splitting metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 4.76$ urrats luzerako integrazioarentzat. Kolore bakoitza planeta bakoitzari dagokion errorea da: Merkurio (urdin ilunez), Artizarra (marroi argiz), Lurra (berdez), Marte (gorriz), Jupiter (more argiz), Saturno (marroi ilunez), Urano (urdin argiz), Neptuno (laranja argiz), Pluto (morez)

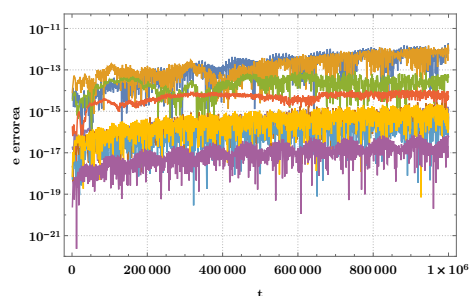
7.5. Laburpena

Kapitulu honetan, eguzki-sistemaren integrazioarako inplementazio berri bat aurkeztu dugu. Inplementazio berria, egungo metodo sinplektiko eraginkorrenekin alderatu dugu eta emaitzak, baikorrak izateko modukoak iruditu zaizkigu. Oinarriko azterketa egin badugu ere, agerian geratu da, metodoak etorkizunean izan dezakeen potentziala. Dударik gabe, etorkizun hurbilean azterketa sakonagoa egin beharko litzateke, metodoaren propietate onak baieztatuz. Horien artean, honako ideiak aipatuko ditugu:

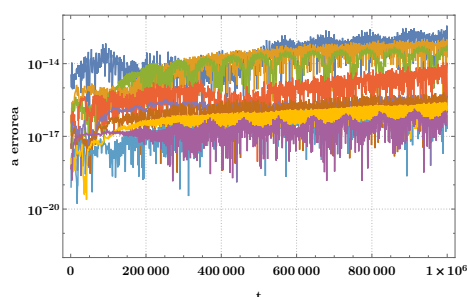
1. 80-biteko doitasuneko (*long double*) integrazioaren konputazioa: kasu honetan, $\varphi_{h/2}$ fluxuaren aplikazioa 128-biteko doitasunean egitea komeniko litzateke.



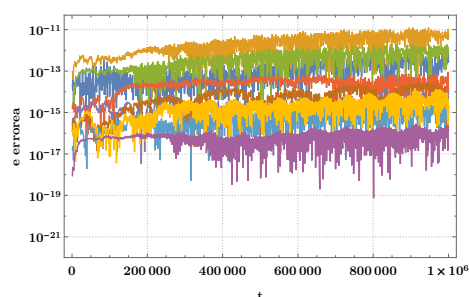
(a) RKIK metodoa (erdi-ardatz nagusiaren errorea)



(b) RKIK metodoa (eszentrikotasunaren errorea)



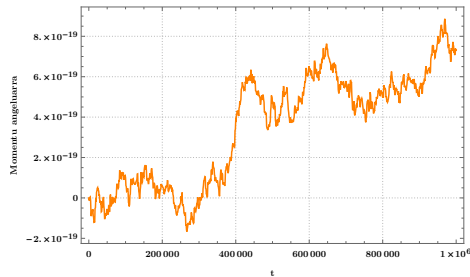
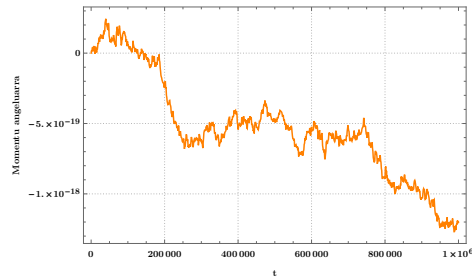
(c) ABAH1064 (erdi-ardatz nagusiaren errorea)



(d) ABAH1064 (eszentrikotasunaren errorea)

7.9. Irudia: Orbita eliptikoaren a erdi-ardatz nagusiaren eta e eszentrikotasunaren erroreen estimazioak erakutsi ditugu. (a) eta (b) irudietan, $s = 8$ ataletako RKIK metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 10,667$ urrats luzerarekin integratuz. (c) eta (d) irudietan, *ABAH1064* Splitting metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 4.76$ urrats luzerarekin integratuz. Kolore bakoitza planeta bakoitzari dagokion errorea da: Merkurio (urdin ilunez), Artizarra (marroi argiz), Lurra (berdez), Marte (gorriz), Jupiter (more argiz), Saturno (marroi ilunez), Urano (urdin argiz), Neptuno (laranja argiz), Pluton (morez)

2. Kepler-en fluxuaren inplementazioaren hobekuntzak: oraingo inplementazioaren iterazio guztietan ez dugu aurreko iterazioen informazio erabiltzen. Iterazio berri baten kalkuluan, aurreko iterazioen egoeretatik abiatuta, nahikoa izango litzateke Newton-en iterazio bakarra egitea.
3. Eguzki sistemaren eredu konplexuagoarekin (ilargia eta zenbait asteroide, erlatibitate efektua, eguzkiaren atxatamendua, . . .), RKIK metodoak eraginkorragoak bilakatzea espero da. Eguzki-sistemaren eredu konplexuagoa aplikatzen den neurrian paralelizazioak abantaila handiagoa suposatuko du. Era berean, iterazio gehienak problemaren eredu simple batekin, doitasun baxuan kalkula daitezke eta bukaerako iterazio pare bat eredu osoarekin,

(a) Momentu angeluarra $h = 9.0$.(b) Momentu angeluarra $h = 10.63$

7.10. Irudia: Momentu angeluarraren errore erlatiboaren eboluzioa erakutsi dugu. RKIK ($s = 8$) metodoa integratu dugu $h = 9.0$ eta $h = 10.63$ urrats luzerarekin

doitasun altuan.

4. Eraginkortasuna hobetzeko, Jacobiarraren hurbilpen simple baten erabilera (puntu finkoaren eta Newton-en arteko algoritmo eraginkorra).

138 7. Kapitula. IRK metodo sinplektikoen bidezko eguzki-sistemaren integrazioa

IV. Atala

Eztabaida eta ondorioak.

8. Kapituluia

Eztabaida

Kapitulu honetan, ikerketan zehar garrantzi berezia izan duten gaiak bildu ditugu. Eguzki-sistemaren simulazioetarako eta efemerideen kalkulutarako erabiltzen diren implementazioen laburpena eman dugu. Ikerketaren lehen urratsean eta gero baztertu genuen planteamenduaren azalpenak eman ditugu. IRK implementazioaren oinarriak erabakitzeko, aztertutako aukerak deskribatu ditugu. Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa, atalen hasieraketan aplikatzeko aukera deskribatu dugu. Zenbakizko integrazioetan, paralelizazioa aplikatzeko zailtasunak azpimarratu ditugu. Azkenik, implementazioa N -gorputzen beste integrazio batzuetan aplikatu daitezkeen aztertu dugu.

8.1. Eguzki-sistemaren integrazio luzeak

Gure helburua eguzki-sistemaren epe luzeko eta doitasun handiko implementazio eraginkorra proposatzea da. Atal honetan, egungo eguzki-sistemaren simulazioetarako erabiltzen diren metodo eta implementazioen laburpena egingo dugu.

Implementazioen garapena

Astronomi arloaren ikerketetan, eguzki-sistemaren eredu errealisten integrazio luzeak konputatzen dituzte. A. Morbidellik [90], eguzki-sistemaren zenbakizko integraziotarako implementazioen azterketa egin zuen: urteak aurrera joan ahala, eguzki-sistemaren ereduak gero eta konplexuagoak bilakatzen dira, eta integrazio tarteak handiago da. Garai hauek bereizten ditu:

1. Garai klasikoa

90. hamarkada artekoa, urrats luzera aldakorreko integratzaileak erabiltzen dira: Runge-Kutta (Dormand et al. 1987), Bulirsch and Stoer (1966), Radau

(Everharht, 1985), eta Störmer (1990). Garai honetan, integrazio tartearak ($10^4 - 10^6$) urte artekoak dira.

2. Garai sinplektikoa

Wisdom eta Holman-en [108, 1991] lanarekin, eguzki-sistemaren azterketarako integratzaile sinplektikoen erabilera zabaldu zen. Garai honetan, ($10^8 - 10^9$) urte arteko eguzki-sistemaren integrazioak egin ziren.

3. Garai estatistikoa

Planeten, eta asteroideen edota meteoritoen moduko gorputz txikien arteko kolisiotik gertuko egoerak kalkulatzeko algoritmoak garatu ziren. Inplementazio berri hauetan, milaka gorputzen integrazio azkarra egin daiteke. Asteroide eta meteoritoen orbiten distribuzio azterketa estatistikoa egin zituzten.

4. Planeten sorrera garaiko azterketak

Garai honetan, eguzki-sistemaren sorrerari buruzko simulazioak nagusi dira; masa handiko gorputzen arteko kolisiotik gertuko egoerak gertatzen diren problemak konputatzen dira.

Astronomi arloko eguzki-sistemaren integrazioetarako, nagusiki bi integratzaile famila bereiz daitezke [64]; metodo simetrikoak eta sinplektikoak. Bestalde, integrazio metodo orokorrak, efemerideen konputazioetarako aplikatzen dira.

1. Metodo simetrikoak

Metodo simetrikoen artean nagusiena, 4 ordenako *Hermite* integratzailea [3] dugu. Urrats luzera tamaina aldakorreko integratzaile da. *Hermite* integratzailea konputazionalki garestia da eta gorputz kopuru handia duten eta kolisiotik gertuko egoerak maiz gertatzen diren problemetan aplikatzen da; esate baterako, eguzki-sistemaren sorreraren azterketarako.

2. Metodo sinplektikoak

Egungo eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioetarako, integratzaile sinplektikoak nagusitu dira.

3. Metodo orokorrak

Efemerideen doitasun altuko integrazioetarako, metodo orokorrak erabiltzen dituzte: *Multistep Adams* metodoa (NASA), *Adams-Cowell* metodoa (IMCCE, Paris Observatory) eta *Radau* metodoa (IAA, St. Petersburg).

Metodo sinplektikoak

Wisdom eta Holman-en [108, 1991] eguzki-sistemaren epe luzeko simulazioetarako integratzaile sinplektikoak (*WH*) arrakasta izan zuen. Eguzki-sistema, mugimendu perturbatua duen sistema dinamikoa da eta ezaugarri honi egokitutako integratzaile eraginkorra garatu zuten. Jacobi koordenatuak aplikatuz, N-gorputzen problemaren Hamiltondarra, bi zatitan banatu zuten,

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

non H_K , Hamiltondarraren alde Kepleriarra (planeten eguzkiarekiko mugimendu Kepleriarra) eta H_I , Hamiltondarraren perturbazioa (planeten arteko interakzioak) diren. Integrazioaren urrats bakoitzean, Hamiltondar bakoitzaren soluzioa tartekatuz, problema osoaren soluzioa lortzen da.

WH inplementazioaren erabilgarritasuna mugatua da. Batetik, izar anitzeko planeten sistemak edo planeta-ilargiak sistemak integratzeko ez da egokia. Bestetik, *WH* metodo sinplektikoa denez, urrats luzera finkoa aplikatu behar da eta hau, gorputzen arteko kolisiotik gertuko egoerak dituzten problemak modu eraginkorrean integratzeko eragozpen bat da. Arazo hauek gainditzeko, hurrengo urteetan algoritmo honen aldaerak proposatu dira.

Levinson eta Duncan-ek [84, 1994], *WH* inplementazioa, integratzaile ez sinplektiko batekin konbinatu zuten, kolisiotik gertuko egoeren kalkulua hobetzeko. *SWIFT* paketea, *RMVS3* izeneko integratzailea inplementatu zuten. Duncan, Levinson eta Lee-k [34, 1998], koordenatu heliozentrikoak erabiliz, Hamiltondarra beste modu honetan banatu zuten,

$$H(q, p) = H_K(p) + (H_C(p) + H_I(q))$$

eta kolisiotik gertuko egoerei, urrats luzera txikituz aurre egin zioten. Inplementazio honek, *SYMBA* izena du. Chambers [25], koordenatu heliozentrikoetan oinarritu zen eta kolisiotik gertuko egoerak gertatzen diren uneetan, *WH* inplementazioa, beste integrazio metodo batekin (Bulirsch-Stoer metodoa) konbinatu zuen. Inplementazio honek, *MERCURY* izena du. Kvaerno eta Leimkuhler [76] eta beste autore batzuk ere, antzeko ideiak landu dituzte.

Wisdom eta Holmanek proposatutako Hamiltondarraren banaketa, (2.21) *Leapfrog* metodoaren bidez integratzen da eta beraz, $p = 2$ ordenako da. Ordena altuagoko ($p > 2$) metodo sinplektikoak definitzeko, koefiziente negatiboak erabili behar zirela uste zen [116, 82] eta modu honetan definitutako metodoak, ez dira *Leapfrog* metodoa baino eraginkorragoak.

McLachlan-ek [88, 1995] eta Laskar-ek [82, 2001] koefiziente negatiboen arazoa gainditu zuten eta koefiziente positiboekin definitutako ordena altuko splitting eskemak aurkitu zituzten. Berriki, Blanes-ek [16, 2012] ordena altuko splitting eskema eraginkorrak aurkitu ditu.

Hernandez eta Bertschinger-ek [57, 2015] N -gorputzen problema grabitazionala eta kolisiotik gertuko egoerak integratzeko, 2 ordenako metodo sinplektiko berri bat proposatu dute. Hernandez eta Bertschinger-ek [57] koordinatu cartesia-rreretan oinarrituz, N -gorputzen problema 2-gorputzen azpiproblemetan banatzen dute.

Konposizio eta splitting metodoak

Konposizio metodoak, era honetako Hamiltondar sistemak integratzeko aplikatu daitezke,

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

Konposizio metodoa, eguzki-sistemaren eredu grabitazionalari aplikatzerakoan oso eraginkorra da, baina eredu konplexuagoetarako bere abantaila galtzen du. Batetik, gorputzen kopurua handitzen bada bere eraginkortasuna gutxitzen da eta bestetik, beste indar ez grabitazionalak (erlatibitate efektua,...) ezin daitezke aplikatu.

Splitting metodoak, era honetako Hamiltondar sistemak integratzeko aplikatu daitezke,

$$H = H_A + \epsilon H_B, \tag{8.1}$$

non H_A eta H_B independenteki integratu daitezkeen.

Eguzki-sistemaren eredu errealistetan, hainbat indar ez grabitazional modu honetan gehitzeko, zailtasunak izan ditzakegu. Laskar-ek [80, 2011], epe luzeko zenbakizko integratzaileak, eguzkiaren erlatibitate efektua ($1/c^2$ ordenakoa) kontsideratu zuen, Saha eta Tremain-ek [101] finkatutako teknika aplikatuz. Teknika honen bidez, Hamiltondar banagarriei egokitzen zaien erlatibitate efektuaren espresioa lortzen da eta gainera modu eraginkorrean kalkulatu da. Baina splitting metodoetan, beste planeten erlatibitate efektuak ezin daitezke erabili. Adibidez, bi planeta handien (Jupiter eta Saturno) erlatibitate efektua ere kontutan hartuko balira, ekuazioak ez dira gehiegi konplikatu eta integratze hobeak lor daitezke, errorea txikituz.

Eguzki-sistemaren integratzaileetarako, (8.1) Hamiltondarraren banaketa, Jacobi koordinatuak edo heliozentrikoak aplikatuz lortzen da. Koordinatu cartesiarrak, ezin daitezke erabili.

IRK metodoekin lan egiteko ordea, ez daukagu halako mugarik. Ekuazio diferentzial orokorrean aplikatu dakizkienez, askatasun osoa dugu behar diren ekuazioak erabiltzeko eta interesatzen zaigun koordinatu sistema aplikatzeko.

8.2. Eredu deskonposaketa

IRK metodoen inplementazioen azterketaren hasieran, eredu deskonposaketan oinarritutako ideia ikertu dugu. Atal honen bukaeran emango ditugun arrazoiengatik, beste bide batzuk ikertzea zuzenago dela ikusi dugu eta planteamendu hau alde batera utzi dugu. Dena den, planteamendu honen laburpen bat emango dugu eta inplementazio bide honetan sortutako hainbat ideia interesgarri jasoko ditugu.

Eguzki-sistemaren eredu bi zatitan bana daiteke: problema sinplea (konputazionalki merkea) eta problema konplexua (konputazionalki garestia). Newton sinplifikatuaren iterazio berezi bat aplikatu dugu, problema konplexuaren balioztapen kopurua txikitzeko eta era honetan, inplementazio eraginkorra lortzeko. Newton sinplifikatuaren iterazio berezi honetan, ekuazio-sistema lineala LU deskonposaketaren bidez askatu beharrean, puntu-finkoaren bidez ebatziko dugu.

Inplementazioa

Eguzki-sistema, perturbatutako mugimendu Kepleriar gisa har daiteke,

$$f(y) = k(y) + \epsilon g(y), \quad g \ll k. \quad (8.2)$$

$k(y)$ sistema dinamikoaren alde sinplifikatua da eta konputazio kostu txikia du. $g(y)$, ordea, sistemaren alde konplexua da eta konputazio kostu handia du. (8.2) ekuazio diferentzialak IRK metodoen bidez integratzeko, atalen ekuazio-sistema inplizitua ebatzi behar da:

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j).$$

Ekuazio inplizituaren sistema hau, honako iterazioaren bidez ebatzea proposatuko dugu:

$$k = 1, 2, \dots$$

$$Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} (k(Y_j^{[k]}) + g(Y_j^{[k-1]})) \quad (8.3)$$

Iterazio hau aplikatzea, Jacobiarraren hurbilpentzat, $J_i = \partial k / \partial y(Y_i)$, $i = 1, \dots, s$ hartzen duen Newton sinplifikatua aplikatzearen baliokidea da. 27 algo-

ritmoan, iterazioa aplikatzeko zehaztasun gehiago emango ditugu,

```

for  $n \leftarrow 1$  to  $endstep$  do
  Hasieraketa  $Y_i^{[0]}, W_i^{[0]}$ ;
   $k=1$ ;
  Askatu  $Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k(Y_j^{[k]}) + W_i^{[k-1]}$  ;
  while (konbergentzia ez lortu) do
     $k++$ ;
     $W_i^{[k-1]} = h \sum_{j=1}^s a_{ij} g(Y_j^{[k-1]})$ ;
    Askatu  $Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k(Y_j^{[k]}) + W_i^{[k-1]}$  ;
  end
   $y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(Y_j^{[k]})$ ;
end

```

Algoritmoa 27: Meta-algoritmoa

Urrats bakoitzean, hainbat aldiz $k = 2, 3, \dots$ balioentzat ekuazio-sistema inplizitua askatu behar da eta horretarako, metodo egokiena aplikatzeko askatasuna dugu. Pentsa liteke, problema zurruna ez bada puntu-finkoaren bidez askatzea eta problema zurruna bada, berriz, Newton sinplifikatuaren iterazioaren bidez.

Barne ekuazio-sistema,

$$Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k(Y_j^{[k]}) + W_i^{[k-1]},$$

puntu-finkoaren iterazioaren bidez askatzeko, 28 algoritmoaren barne-iterazioa era honetan aplikatuko dugu:

```

 $l = 0$ ;
 $Y_i^{[k,0]} = Y_i^{[k-1]}$ ;
while (konbergentzia ez lortu) do
   $l = l + 1$ ;
   $K_i^{[k,l]} = k(Y_i^{[k,l-1]})$ ;
   $Y_i^{[k,l]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j^{[k,l]} + W_i^{[k-1]}$ ;
end

```

Algoritmoa 28: Barne-iterazioa: puntu-finkoaren iterazioa

Orokorpena

Eredu konplexuak

Aurreko atalean, maila bakarreko ereduaren deskonposaketa aztertu dugu. Ideia orokortuz, eredu deskonposaketa maila ezberdinetan aplikatu daiteke. $\dot{y} = f(y)$

problema emanik,

$$1. \text{ maila } \begin{cases} \text{Eredu osoa. } f(y) \\ \text{Eredu sinplea. } \tilde{f}(y) \end{cases} \Rightarrow f = \tilde{f} + (f - \tilde{f})$$

$$2. \text{ maila } \begin{cases} \text{Eredu osoa. } \tilde{f}(y) \\ \text{Eredu sinplea. } \tilde{\tilde{f}}(y) \end{cases} \Rightarrow \tilde{f} = \tilde{\tilde{f}} + (\tilde{f} - \tilde{\tilde{f}})$$

...

Adibidea. Eguzki-sistemaren eredu konplexuaren ekuazio-sisteman, alde Kepleriarra eta perturbazio maila ezberdinak bereiz daitezke. Algoritmoa, deskonposaketaren maila bakoitzari modu errekursiboan aplikatu daitezke. Demagun, eguzki-sistemaren problemaren ekuazio diferentzial hauek ditugula,

$$\dot{y} = f(y), \quad f(y) = k(y) + g(y) + r(y),$$

non

$k(y)$: kepleriarra.

$g(y)$: planeten arteko grabitazio interakzioak.

$r(y)$: planeten eguzkiarekiko erlatibitate efektua.

Meta-algoritmoa modu honetan aplikatu daitezke,

1. maila

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j).$$

2. maila, $k = 1, 2, \dots$

$$Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k(Y_j^{[k]}) + \delta_1^{[k-1]},$$

$$\text{non } \delta_1^{[k-1]} = h \sum_{j=1}^s a_{ij} (g(Y_j^{[k-1]}) + r(Y_j^{[k-1]})).$$

3. maila, $l = 1, 2, \dots$

$$Y_i^{[k,l]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \left(k(Y_j^{[k,l]}) + g(Y_j^{[k-1,l]}) \right) + \delta_2^{[l-1]},$$

$$\text{non } \delta_2^{[l-1]} = h \sum_{j=1}^s a_{ij} r(Y_j^{[k-1,l-1]}).$$

Problema independenteak

Batzuetan, problemaren eredu sinplifikatua, azpiproblema independentetan bana daiteke,

$$f \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_1(y_1) \\ k_2(y_2) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_1(y_1, y_2) \\ g_2(y_1, y_2) \end{pmatrix}.$$

Azpiproblema bakoitzari dagokion barne-iterazioak independenteak dira eta paraleloan kalkula daitezke. Eguzki-sistema eredu grabitazionala, azaldutakoaren adibide argia da; planeta bakoitzaren $k_i(y)$ eguzkiarekiko interakzioa, azpiproblema independentea da. Zenbakizko esperimentuetarako aukera eraginkorrena, eredu sinplifikatua bi azpiproblemetan banatzea dela konprobatu dugu: alde bate-tik, barne-planeten eredu sinplifikatuak osatutako azpiproblema eta beste aldetik, kanpo-planeten eredu sinplifikatua osatutakoa.

Tolerantzia aldakorra

Kanpo eta barne-iterazioetarako geratze irizpide berdinak definitu ditugu. Kanpo-iterazioetarako, tolerantzia finkoa erabili dugu eta barne-iterazioetarako, ordea, tolerantzia aldakorra. Tolerantzia aldakorra, kanpo-iterazio (konputazionalki garestia) bakoitzarentzat, barne-iterazio (konputazionalki merkea) kopuru nahikoak eta beharrezkoak eman daitezzen, definitu dugu.

Eragozpenak

Esan dugunez, planteamendu honetan Newton sinplifikatua aplikatu dugu eta ekuazio-sistema lineala LU deskonposaketaren bidez askatu beharrean, puntu-finkoaren iterazioaren bidez askatu dugu. Planteamendu honi IRK-Newton sinplifikatuaren inplementazio estandarrekiko, hiru desabantaila aurkitu dizkiogu:

1. Barne kalkuluen doitasuna.

Planteamendu honen barne-iterazioak, inplementazioaren oinarritzko doitasunean kalkulatu behar dira. IRK-Newton sinplifikatuaren inplementazioaren eragiketa konplexuenak, doitasun txikiagoan kalkula daitezke [9].

2. Jacobiarraren balioztapena.

Planteamendu honetan, Jacobiarra iterazio bakoitzean aldatzen denez, iterazio guztietan balioztatu behar da. IRK-Newton sinplifikatu estandarrean, Jacobiarra urrats bakoitzean behin bakarrik kalkulatu behar da.

3. Ereduen deskonposaketa.

Ereduen deskonposaketak, nolabaiteko konplexutasuna gehitzen du. Hiru eredu ezberdin bereizi behar ditugu: eredu osoa $f(y)$, eredu sinplifikatua $\tilde{f}(y)$ eta perturbazioa $g = f(y) - \tilde{f}(y)$.

8.3. IRK inplementazioaren oinarriak

IRK inplementazioan, ekuazio-sistema iterazio metodo bat aplikatuz askatu behar da. Funtsezkoa da, iterazioaren atalen hasieraketa eta geratze irizpide sendoak aplikatzea. Laburki, gure lanean aztertutako aukera ezberdinak deskribatuko ditugu.

Atalen hasieraketa

Iterazio metodoetan atalen hasieraketa kalkulatzeko teknika ezberdinak ikertu ditugu.

1. Metodo esplizituak.

Atalen hasieraketa metodo esplizitu bat aplikatuz lor daiteke. Hurbilpen merkea lortze aldera, ordena txikiko metodoak aplikatu ditugu: Euler $\mathcal{O}(h)$ eta Euler hobetuaren $\mathcal{O}(h^2)$ metodoa. Atalen hasieraketa metodo hauetan, ekuazio diferentzialaren balioztapena beharrezkoa da eta era honetan aplikatu ditugu:

Euler :

$$Y_i = Y_{i-1} + h(c_i - c_{i-1})f(Y_{i-1}).$$

Euler hobetua :

$$Y_i = Y_{i-1} + h(c_i - c_{i-1})f(k_i),$$

$$\text{non } k_i = Y_{i-1} + \frac{h}{2}(c_i - c_{i-1})f(Y_{i-1}).$$

2. Kepler-en fluxua.

Eguzki-sistema, perturbatutako sistema Kepleriarra denez, atalak Kepler fluxuaren bidez hasieratu daitezke. Kepler fluxuaren funtzioak, $y(t_n)$ une bateko kokapen eta abiadurak emanik, Δt_n denbora igarotakoan kokapen eta abiadura zehatzak itzultzen ditu,

$$\text{Keplerflow}(\Delta t_n, y(t_n)) \rightarrow y(t_n + \Delta t_n).$$

Beraz, y_n egoeratik abiatuta, atal bakoitzari dagokion hasieraketa,

$$Y_{n,i}^{[0]} = y(t_n + hc_i), \quad i = 1, \dots, s,$$

Kepler fluxua $\Delta t_n = hc_i$ denbora aurrera eginez lortuko dugu.

3. Interpolazio polinomioak.

Aurreko urratseko ataletako informazioa erabiliz, urrats berriaren atalen hasieraketa lortzen dugu. Problema ez-zurrunetarako interesgarria da. Era honetako hasieraketa merkea da, ez baita funtzio balioztapen berririk egiten. Era honetan aplikatzen da,

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

non λ_{ij} aurre-kalkulatutako interpolazio koefizienteak diren. Interpolazio metodo estandarrekin, urrutien dagoen ataletarako hasieraketa txarra lortzen da eta atal askotako metodoentzat, arazo hau, eragozpen handia izan daiteke.

Bide honetatik, teknika aurreratuagoak ere aztertu ditugu (maila txikiko polinomioen bidezko hasieraketak, ...). Era berean, B-Serieak izeneko teknikan [26] oinarrituz, interpolazio estandarra [77] hobetzeko saiakera egin dugu baina ez dugu arrakastarik izan.

Problema ez-zurrunetarako, interpolazio polinomioen bidezko hasieraketa ona eta merkea lortzen da. Problema zurrunetarako, ordea, atalak aurreko urratseko soluzioarekin hasieratuko ditugu,

$$Y_{n,i}^{[0]} = y_n, \quad i = 1, \dots, s.$$

Geratze irizpidea

Iterazio metodo bat aplikatzeko, geratze irizpide sendoa finkatzea funtsezkoa da. Iterazioak, biribiltze errorearen eragina azaltzen denean geratu behar dira. Bate-tik, iterazioak beranduegi geratzen baditugu, alferrikako iterazioak emango ditugu, eraginkortasunaren kalterako. Bestetik, iterazioak goizegi geratzen baditugu, biribiltze errorea handitu edota trunkatze errorea eragin dezake.

Geratze irizpide estandarrek aplikatzerakoan, hainbat arazo aurkitu ditugu eta ondorioz, geratze irizpide berri bat definitzeko beharra ikusi dugu. Geratze irizpide berria definitzeko, aukera ezberdinak aztertu ditugu eta eskuartean ibili ditugun bertsio nagusienak azalduko ditugu.

Norma

Iterazio bakoitzaren hobekuntza ($\Delta^{[k]}$) neurtzeko, norma ezberdinak aplikatu daitezke. Honakoa da, Hairer-ek bere IRK inplementazioaren geratze irizpidean aplikatzen duen norma,

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

Norma hau zalantzan jarri dugu eta iterazioaren hobekuntza hobeto neurtzen duen norma finkatzen saiatu gara. Honako aukerak aztertu ditugu:

1. Lehen bertsioa

Diferentziak, modu erlatiboan neurtzeko beharrak bultzatuta, norma era honetan definitu dugu,

$$\Delta = \max_{1 \leq j \leq d} \frac{\max_{1 \leq i \leq s} |\Delta Y_i^j|}{(\max_{1 \leq i \leq s} |Y_i^j|) + \delta},$$

non $\delta \approx 10^{-20}$, zatitzailea zero ez izateko finkatzen dugun balio txikia eta $y = (y^1, \dots, y^d)$ den.

2. Bigarren bertsioa

Kokapenen ($Q_i \in \mathbb{R}^d$) eta abiaduren ($V_i \in \mathbb{R}^d$) izaera ezberdina dela jabetuta, norma bi kontzeptu hauek banatu ditugu. $Y = Y^{[k]}$, eta $\tilde{Y} = Y^{[k-1]}$ notazioa finkatuta,

$$\Delta = \max \left(\max_{1 \leq j \leq d} \frac{\max_{1 \leq i \leq s} \|Q_i^j - \tilde{Q}_i^j\|^2}{\max_{1 \leq i \leq s} \|Q_i^j\|^2}, \max_{1 \leq j \leq d} \frac{\max_{1 \leq i \leq s} \|V_i^j - \tilde{V}_i^j\|^2}{\max_{1 \leq i \leq s} \|V_i^j\|^2} \right),$$

non,

$$Y = \begin{pmatrix} Q_1^1 & \dots & Q_1^d & V_1^1 & \dots & V_1^d \\ Q_2^1 & \dots & Q_2^d & V_2^1 & \dots & V_2^d \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_s^1 & \dots & Q_s^d & V_s^1 & \dots & V_s^d \end{pmatrix} \quad \tilde{Y} = \begin{pmatrix} \tilde{Q}_1^1 & \dots & \tilde{Q}_1^d & \tilde{V}_1^1 & \dots & \tilde{V}_1^d \\ \tilde{Q}_2^1 & \dots & \tilde{Q}_2^d & \tilde{V}_2^1 & \dots & \tilde{V}_2^d \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{Q}_s^1 & \dots & \tilde{Q}_s^d & \tilde{V}_s^1 & \dots & \tilde{V}_s^d \end{pmatrix}.$$

3. Hirugarren bertsioa

Iterazioaren hobekuntza, norma jakin bat aplikatuz zenbaki eskalar bakarrekin neurtu beharrean,

$$\Delta^{[k]} = |Y^{[k]} - Y^{[k-1]}| \in \mathbb{R}^{sd} \quad (8.4)$$

matrizea erabiliko dugu. Modu honetan, geratze irizpidea normaren independentea izango da eta gainera, geratze irizpide segurua eraikitze aukera emango digu.

Gure geratze irizpidea

Geratze irizpidearen abiapuntua Hairer-en geratze irizpidea izan da,

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

Geratze irizpide hau hobetzeko proposamen batzuk garatu ditugu,

1. Lehen bertsioa

Hairer-ek definitutako geratze irizpidea, batzuetan goizegi geratzen da eta ziurtasuna handitu beharra dago. Horregatik, geratze irizpidean, $k - 2$. iterazioaren informazioa erabiltzea aztertu dugu,

$$(\Delta^{[k]} = 0) \text{ edo } (\Delta^{[k]} \geq \Delta^{[k-1]} \text{ eta } \Delta^{[k]} \geq 0.81 * \Delta^{[k-2]}).$$

2. Bigarren bertsioa

Bertsio honetan, $k - 3$. iterazioaren informazioa ere erabiliz saiakera berria proposatu dugu:

$$(\Delta^{[k]} \leq tol) \text{ edo } (zat^{[k]} \geq koeff * \max(zat^{[k-1]}, zat^{[k-2]})),$$

non $zat^{[k]} = \Delta^{[k]} / \Delta^{[k-1]}$, $tol \approx 10^{-16}$ eta $koeff = 10$ den.

3. Hirugarren bertsioa

$$(\Delta^{[k]} \leq tol) \text{ edo } \left(\frac{zat^2}{(1 - zat)} \Delta^{[k-1]} \leq tol \right) \text{ edo } \left(\frac{zat}{(1 - zat)} \Delta^{[k-2]} \leq tol \right),$$

non $zat = \max(zat^{[k-1]}, zat^{[k-2]})$, $tol \approx 10^{-16}$ den.

Geratze irizpide honetan, iteraziotik irteten denean, $z \geq 1$ betetzen bada,

- (1). $\Delta^{[k]} > c tol \rightarrow$ konbergentzia arazoak (exekuzioa geratu),
- (2). $\Delta^{[k]} \leq c tol \rightarrow$ birbiltze errorea (exekuzioa jarraitu),

non $c \approx 10^4$ konbergentzia koefizientea den.

4. Laugarren bertsioa

Azkenik, honakoa proposatu dugu: (8.4) $\Delta^{[k]} \in \mathbb{R}^{sd}$ izanik, iterazioak $k = 1, 2, \dots$ jarraitzea, $\Delta^{[k]} = 0$ bete arte edo honako baldintza bi iterazio jarraietan betetzen den artean,

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

Geratze irizpide honetan, iterazioak bukatu ondoren $\exists j, \Delta_j^{[K]} \neq 0$ betetzen bada, orduan urratsa onargarria den ala ez erabaki behar dugu.

8.4. Doitasun altuko konputazioak

Konputazio zientzian, nagusiki doitasun bikoitzeko aritmetika (64-bit) aplikatzen da baina eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioarako, doitasun bikoitza ez da nahikoa. Jarraian, zenbakizko integrazio hauetan [79], doitasuna hobetzeko bi bide azalduko ditugu.

80-biteko doitasuna

Egungo *IEEE-754* (2008) estandarrak, koma-higikorrek hiru formatu definitzen ditu: arrunta (32-bit), bikoitza (64-bit) eta laukoitza (128-bit). *IEEE-754* (1985) estandar zaharrak, 80-biteko formatuaren (*double-extended* izenekoa) inplementazioa aholkatzen zuen [94] baina egungo estandarretik kanpo utzi dute. 80-biteko doitasunak, 19 zifra hamartarreko doitasuna eskaintzen du.

C lengoaiaren *long double* datu motak, 80-biteko koma-higikorrek aritmetika sustatzen du. *IA-32* koma-higikorrek eragiketa multzoak [91], 80-biteko zenbaki formatua onartzen du; 64-biteko mantisa eta 15-biteko esponentearekin. *IA-64* eragiketa multzoak, 82-biteko formatu onartzen du; 64-biteko mantisa eta 17-biteko esponentearekin.

Intel *x86* prozesadoreek, esaterako Intel Xeon Phi [27] doitasun arrunta eta bikoitza hardwarez implementatzen dute; laukoitza, softwarez; eta 80-biteko doitasuna ere hardwarez.

Laskar-ek [80, 79], eguzki-sistemaren epe luzeko zenbakizko integrazioarako, batura konpentsatua eta 80-biteko koma-higikorra erabili zituen. Integratzaile sinplektikoa C lengoaiari berridatzi zuen, Intel-en 80-biteko aritmetika erabili ahal izateko. Era berean, efemerideen kalkuluarako antzekoa gertatu da: EPM [96] (aplikazioa berridatzi zuten) eta INPOP [40] efemerideen kalkulutarako, 80-biteko aritmetika erabiltzen dute.

Honek, astronomoentzat, soluzioen doitasuna hobetzeak duen garrantzia erakusten digu. 128-biteko aritmetikaren inplementazioa software bidezkoa da eta

erabiltzeko garestiegia. 80-biteko aritmetikarekin eta batura konpentsatuarekin, zifra hamartar batzuk irabazten dituzte, konputazio kostu nahiko txikiarekin.

80-biteko doitasuna abantailak ditu baina doitasun hau erabiltzeak, hainbat errezelo sortzen ditu. *IEEE-754* estandarretik kanpo dago eta hardwarearen menpekoa da. Gainera, Laskar-en [80] zenbakizko integrazioen arabera, konputazioak x^2 garestitu zaizkio.

Doitasun nahasia

Azken urteetan, beharrezko doitasuna lortzeko, koma-higikorreko doitasun ezberdinak nahasteko joera dago.

Doitasun arrunteko aritmetikak (32-bit), doitasun bikoitzarekiko (64-bit) x^2 aldeko eraginkortasun erratioa du [32]. Aplikazio batzuetarako, doitasun arrunteko doitasuna nahikoa da eta beste batzuetarako, konputazioaren funtsa doitasun arruntean egin daiteke eta galdutako digituak modu merkean berreskuratu.

Doitasun laukoitza (128-bit), software bidez modu errazean inplementatu daiteke. Doitasun laukoitzeko zenbaki bat, doitasun bikoitzeko bi zenbakiren bidez adieraz daiteke. Ideia da, konputazioa doitasun bikoitzean egitea eta doitasun laukoitzean integrazioaren kalkulu zehatz batzuk egitea. Zenbakizko integrazioetarako batura konpentsatua, era honetan interpreta daiteke.

Batura konpentsatua merkea da. Eguzki-sistemaren gure inplementazioan batura konpentsatua aplikatzeak abantaila berezia dakar: urrats bakoitzean gehitzen dugun balioa txikia denez, batura konpentsatuarekin zifra hamartar asko mantentzen ditugu.

8.5. Aldagai aldaketa

Atalen hasieraketa

Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa, atalen hasieraketa lortzeko aplikatu daiteke. Honako ekuazio diferentziala badugu,

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

non $k(y)$ alde Kepleriarrari dagokion eta $g(y, t)$ perturbazioari. Alde Kepleriarraren fluxua ezaguna dugu,

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

Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa aplikatzen badugu,

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

aldagai berriarekiko ekuazio diferentziala mantso aldatzen den funtzioa da,

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

z aldagai berria erabiliz, atalen hasieraketa era honetan egin daiteke (8.1. irudia):

1. Y_{n-1} atalei, Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa aplikatu. Z_{n-1} aldagai berriarekiko atalak lortuko ditugu.

$$Z_{n-1,i} = \varphi_{-\Delta t}^k(Y_{n-1,i}), \quad i = 1, \dots, s.$$

2. Z_{n-1} atalak interpolatuz, $Z_n^{[0]}$ hasieraketak lortuko ditugu.

$$Z_n^{[0]} = G(Z_{n-1}, h)$$

3. $Z_n^{[0]}$ ataletatik abiatuta aldagai aldaketa deseginez, $Y_n^{[0]}$ hasieraketak lortuko ditugu.

$$Y_{n,i}^{[0]} = \varphi_{\Delta t}^k(Z_{n,i}^{[0]}), \quad i = 1, \dots, s.$$

Ohiko polinomio interpolatzailearen bidez hasieraketa ona izateko, urratsa txikia izan behar du. Teknika hau erabiliz, interpolazioaren errorea $\mathcal{O}(\epsilon)$ mailakoa izango da eta urratsa handia erabili arren, hasieraketa ona izango dugu.

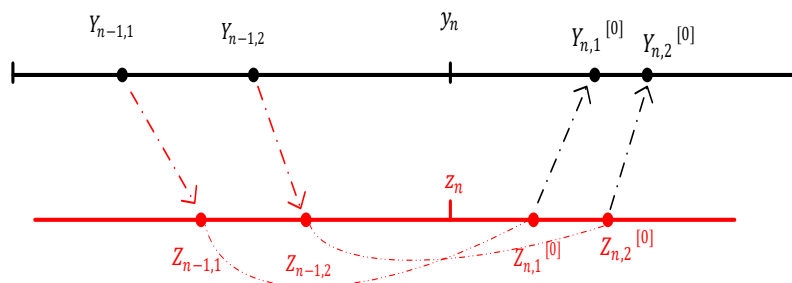
8.6. Paralelizazioa

Hasierako baliodun problemen integrazioetan

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t)), \quad f : \mathbb{R}^{d+1} \longrightarrow \mathbb{R}^d, \quad y(t_0) = y_0, \quad (8.5)$$

denboran zehar zenbakizko soluzioa sekuentzialki lortzen goaz eta beraz, ez dago paralelizazioa modu zuzenean aplikatzerik. Hala ere, hainbat teknika proposatu dira [21], eta etorkizunean paralelizazio garapen berriak espero dira.

Saha eta Tremainek [99], eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioetarako, metodo paraleloa proposatu zuten. Konputazio paraleloa lortzeko, integrazio tarteen



8.1. Irudia: Atalen hasieraketarako, Kepler fluxuan oinarritutako aldagai aldaketaren aplikazioa

(1-astea, 2-astea, ...) integrazioak prozesadoreen artean banatzen dituzte. Ondoren, teknika hau garatuz, Laskar-ek [66] bere proposamen berria egin zuen. Hairer-ek [46], Hamiltondar sistemetan inplementazio hauen analisia egin zuen eta aplikatzeko hainbat eragozpen zeudela ondorioztatu zuen.

Ebatzi nahi den problemaren ekuazio diferentzialen balioztapena, konputazio-nalki garestia bada edota dimentsio handikoa, paralelizazioa beste maila batean aplika daiteke. Paralelizazioa aplikatzeko bide bat, dimentsio handiko ekuazio-sistemaren balioztapena, osagai independentetan banatzea eta hauen konputazioa, prozesadore batzuen artean modu paraleloan kalkulatzeko da. Problema zurruna denean, metodo implizituak aplikatzen direnez, urrats bakoitzean, dimentsio handiko ekuazio-sistemak ebatzi behar dira eta horretarako, paralelizazioan oinarritutako inplementazio (*LAPACK*) eraginkorrak ditugu. Era berean, N -gorputzeko problemetan, N handia denean, gorputzen arteko interakzioak ($\mathcal{O}(N^2)$) kalkulatzeko paralelizazioan oinarritutako hainbat inplementazio [11, 24, 33] aplika daitezke.

IRK metodoei dagokienez, $f(Y_i)$, $i = 1, \dots, s$ ataletako funtzio balioztapena paraleloan exekuta daiteke. Eguzki-sistemaren eredu errealistetan, f funtzioa konplexua izango da eta beraz, paralelizazioa aplikatzeak abantaila izango du. Bestalde, doitasun bikoitzeko integrazioetarako, Gauss metodoaren inplementazio estandar eraginkorrena, $s = 6$ ataletako kontsideratzen da [54]. Eguzki-sistemaren integrazioarako gure inplementazioa, ordea, $s = 8$ ataletako metodoa eraginkorra da eta honek, paralelizazioak abantaila handiago suposatzen du.

8.7. Inplementazioaren erabilgarritasuna

Inplementazioa, eguzki-sistemaren doitasun altuko epe luzeko integrazioetan aplikatzeaz gain, beste N-gorputzeko problema batzuetan aplikatzea eraginkorra izan daitekeen hausnartuko dugu.

Efemerideak

Eguzki-sistemaren efemerideek, eguzki-sistemaren eredu konplexuak eta epe tarte txikietarako (ehunka urtekoak) integrazioak konputatzen dituzte. Konputagailuen erabilera hasi aurretik, efemerideak teoria analitikoetan oinarritutako serie funtzioen bidez kalkulatu ziren. Soluzio hauetan, Fourier-en serie trigonometriko luzeen ebaluazioa egin behar zen. 1960. hamarkadan, eguzki-sistemaren ezagutza hobetu zenean (espazio bidaiak eta behatoki astronomikoen aurrerapenak medio), serie oso luzeak kalkulatu behar zituzten, eta orduan zenbakizko integrazioen metodoak, eraginkorragoak bilakatu ziren [70].

Eguzki-sistemaren gorputzen efemeride modernoak, aldaketa adierazten duten (3.5) ekuazio diferentzialen zenbakizko integrazioaren bidez kalkulatu dira. Integrazioaren hasierako balioak eta ereduaren parametroak, sateliteen bidez jasotako datuekin alderatzen dira.

Efemerideen soluzioak *Chebyshev* polinomio moduan adierazten dira. Zenbakizko integrazio hauetan, biribiltze errorea gai garrantzitsua da. 128-biteko aritmetikaren aukera baztertzeko da, konputazioa oso garestia delako eta 64-biteko doitasuneko aritmetika hobetzen dituzten konputazionalki teknika merkeak, aplikatu dira.

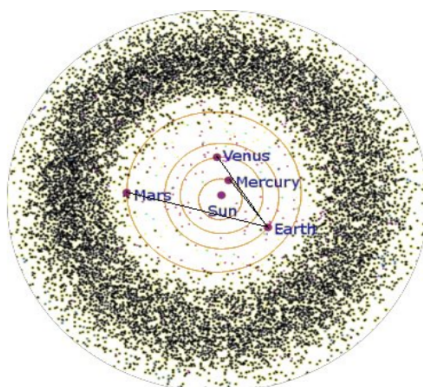
Efemerideetarako, eguzki-sistemaren eredu konplexua aplikatu da. Gorputz nagusien arteko indar grabitazionalen gain, erlatibitate efektua, asteroideek eragindako grabitazio indarrak, gorputzen formen eragina eta beste hainbat indar ez grabitazional kontutan hartzen dituzte. Mugimenduaren ekuazio diferentzialak, era honetakoak izaten dira [39],

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

Hauetakoak dira, ekuazio hauen konplexutasuna erakusten duten ezaugarri batzuk:

- Gorputz kopurua: 8 planetak, Ilargia, Pluton eta 300 asteroide. Asteroideek, bereziki Marte planetaren mugimenduarengan dute eragina (8.2. irudia) eta kontutan hartzekoak dira, barne-planetaren mugimenduaren doitasun handiko emaitzak behar ditugunean. Bost asteroide nagusien masak (Ceres, Pallas, Vesta, Iris eta Bamberga) Merkurio eta Pluton planeten mailakoak direnez, integrazioetan gehitzen dira. Gainontzeko asteroide txikien talde handiak, estimazioen bidez simulatu dira.

- Erlatibitate efektua (GR): Einstein-Infeld-Hoffmann, c^{-4} PPN hurbilketa.
- J_2 : eguzkia esferikoa ez izatearen eragina.
- Integrazioaren urrats luzera, $h = 0.055$ egunekoa da.



8.2. Irudia: Marte eta Jupiter planeten artean kokatzen dira asteroide kopuru handi bat

Hiru efemerideak

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

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

1984.urtean kalkulatu zen lehen efemeridea (DE-200) eta 2.014.urteko *DE-430* [41] efemeridea publikatutako azkena da. Azken efemeride honen integrazio tartea, 1550 – 2650 artekoa izan da.

Zenbakizko integrazio metodoa, urrats luzera eta ordena aldakorreko *Multi-step Adams* metodoa [75] (*DIVA/QIVA*) da. *QIVA* doitasun laukoitzeko (128-bit) bertsioari deitzen zaio: mugimenduaren ekuazioen Newton zatia, doitasun laukoitzean kalkulatzen da eta ekuazioaren gainontzeko zatia, doitasun bikoitzean.

2. Institut de Mécanique Céleste et de Calcul des Ephémérides (IMCCE, Paris Observatory) INPOP (Intégrateur Numérique Planétaire de l'Observatoire de Paris) izeneko efemerideak.

2.000.urteraino, efemerideen kalkulua teori analitikoetan oinarritzen zituzten. 2.003.urtean, zenbakizko integrazioaren bidezko lehen efemeridea kalkulatu zuten eta *INPOP13c* efemeridea [40, 2.014] publikatutako azkena da.

Zenbakizko integrazio metodoa: 12 ordenako *Adams-Cowell* metodoa da eta urrats finkoa aplikatzen dute.

Doitasuna: C lengoaiari inplementatuta dago eta *Intel* makinetako 80-biteko doitasuna erabiltzen du [40].

3. Institute of Applied Astronomy (IAA, St. Petersburg), EPM (Ephemerides Planets-Moon) izeneko efemerideak.

1.980. urtetik aurrera, zenbakizko integrazioen bidezko efemerideak kalkulatu dituzte eta *EPM2013* efemeridea [96, 2.014] publikatutako azkena da.

Zenbakizko integrazio metodoa, *Everhart* izeneko *IRK* metodoa (Gauss-Radau) da. 23 ordenako metodoa eta urrats luzera finkoa aplikatzen dute.

Doitasuna. Inplementazioak (ERA izeneko softwarea), *Intel* makinetako 80-biteko doitasuna erabiltzen du.

Satelite artifizialen problemak

Satelite artifizialen problemak, gure inplementazioaren erabilgarritasunaren adibide argiak dira. Problema hauetan, eredu matematiko konplexuak erabiltzen dira, konputazionalki garestiak, eta sateliteen kokapenaren eboluzioa, zehaztasun handiarekin ezagutu behar da. Ondorioz, integrazio metodo eraginkorrak eta ordena altuko metodoak aplikatu behar dira [13].

Exoplanetak

Eguzki-sistemari egokitutako splitting metodo sinplektikoak [113, 82], eguzki-sistemaren problemaren bi ezaugarri abantaila atereaz diseinatu dira. Lehenik, planeten eguzkiarekiko orbitak ia Kepleriarrak dira. Bigarrenik, N-gorputzen problemaren formulazio Hamiltondarrean oinarritzen dira eta sinplektikoak direnez, Hamiltondarra zehazki mantentzen dute.

Exoplaneta sistemak integratzeko metodo berriak behar dira [36]. Exoplaneten planeta-sistemen mugimenduak ez dira eguzki-sistemarenak bezain egonkorak. Exoplaneta sistemetan, eszentrikotasun handiko orbitak, periodo txikikoak, eta izar anitzeko planeta-sistemak aurkituko ditugu. Splitting metodo sinplektikoak, ez dira ondo egokitzen era honetako sistemak integratzeko. *IRK* Gauss metodoa, edozein sistema integratzeko aplikatu daiteke. Eguzki-sistemaren ekuazioei aldagai aldaketa modu egokian aplikatuz, metodoa lehiakorra da eta exoplaneta-sistemak integratzeko ere, baliagarria izan daitekeela pentsatzen dugu. Dena den, exoplaneta sistemen datuen doitasuna txikia da eta beraz, ez du zentzu handirik doitasun handiko integrazioak egitea.

Molekulen sistema dinamikoak

Molekulen dinamikaren problema Hamiltondarra da eta ekuazio diferentzialak era honetan idatzi daitezke,

$$\begin{aligned}\dot{q}_i &= v_i, \\ \dot{v}_i &= g(q_i), \quad i = 1, \dots, N,\end{aligned}$$

non N partikulen kopurua eta $q_i, v_i \in \mathbb{R}^3$ diren.

Molekulen sistema dinamikoaren integrazioak konputazionalki garestiak dira, N balioa handia delako, g funtzioaren konplexutasunagatik eta integrazio epea luzea izaten delako. Molekulen sistema dinamikoaren integrazioetarako, *Störmer-Verlet* (2.21) metodoa da erabilienetakoa. Sanz Sernak [86], molekulen sistema dinamikoaren integrazioetarako Gauss metodoen eraginkortasuna aztertu zuen, eta *Störmer-Verlet* metodoa eraginkorragoa zela ondorioztatu zuen. Molekulen sistema dinamikoaren integrazioetarako gure planteamenduak, aplikatu ote daitezkeen ez dago argi: aztertu egin beharko litzateke.

9. Kapituluia

Ondorioak

Sarrera

Gure helburua, alde batetik, sistema Hamiltondarren doitasun altuko eta epe luzeko integraziorako, Gauss-en IRK metodo sinplektiko implizituen implementazio eraginkorra lortzea izan da, eta bestetik, garatutako implementazio eta ideiak eguzki-sistemaren simulazio eraginkorra lortzeko aplikatzea. Helburuak lortu ote diren eztabaidatuko dugu ondoren.

Batetik, lortutako implementazioen aldeko argumentuak azalduz, sistema Hamiltondarretarako implementazio eraginkorrak lortu ditugula defenditzen dugu, eta epe luzerako doitasun altuko integraziotarako egokiak direla, biribiltze-erroreen hedapenari dagokionean optimotik gertu dagoela erakutsi baitugu, bai puntu finkoaren implementazioari dagokionean (5. kapituluia), eta baita era problema stiff-erarako Newton-en iterazioan oinarritutako implementazioari dagokionean (6. kapituluia).

Bestetik, eguzki-sistemaren simulazioen aplikazioari dagokionean, 7. kapituluian aurkeztutako lana, helmuga baino gehiago, etorkizunean egin beharreko ikerketa lan sakonagoaren abiapuntu gisa jotzen dugu. Gakoetako bat, integratu nahi den eguzki-sistemaren ereduaren konplexutasuna da. Eguzki-sistemaren ezagutza gero eta zehatzagoa denez [70], eredu gero eta konplexuagoak integratu nahi izango direla suposa daiteke. Zentzu honetan, integrazio metodoak problema konplexuen simulaziorako eraginkorra izan beharko luke. Edozein kasutan, RKIK metodoek ez dute mugatzen aplikatu nahi den problemaren formulazio matematikoa, ekuazioetan nahi diren efektuak gehitzeko aukera ematen dutelarik. Ezagutzen diren metodo sinplektiko esplizituen (splitting eta konposizio metodoen) kasuan ez bezala.

Azkenik, algoritmo baten eraginkortasuna, konputagailu hardware ingurune bati lotuta dago eta urteekin alda daiteke. Hau da, hardware jakin batean eragin-

korra den algoritmoa, hardware berriagotan zaharkituta gera daiteke. Ezaguna da, egungo konputagailuen ahalmena konputazio paraleloan oinarritzen dela eta horregatik, ideia berritzaileak aplikatu behar direla algoritmo eraginkorrak garatzeko [32]. Gure RKIK metodoak, metodo inplizituak izanik, implementazio aukera asko eskaintzen dituenek, paralelizazio gaitasuna barne, zenbakizko integrazioen arloan ideia berriak garatzeko metodo egokiak direla uste dugu.

Eguzki-sistemaren integrazioarako implementazioa

Atal honetan, eguzki-sistemaren integrazioen inguruko lanari buruz arituko gara. Azpimarratu behar dugu, RKIK metodoak implementatzerakoan, 5. kapituluaren garatutako Runge-Kutta metodo inplizituaren (IRK) implementazioaz baliatu garela. Epe luzeko integrazioetarako, metodoa sinplektikoa izatea garrantzitsua da. Baina, IRK metodoaren formulazio estandarrak, koefizienteen adierazpen finitua dela eta, sinplektikotasuna ez duenez ziurtatzen, IRK metodoa aplikatzeko formulazio berria proposatu dugu. Bestalde, implementazio estandarraren geratze irizpidea hobetu dugu. Guzti hau, 5. kapituluaren garatu duguna, funtsezkoa da gure RKIK metodoaren implementazioaren eraginkortasun eta fidagarritasunerako.

Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa, Runge-Kutta Inplizitu Konposatua (RKIK) definitzeko aplikatu duguna, ebatzi nahi dugun problemari lotuta dago. Aldagai aldaketa hau, teknika orokor baten aplikazioa da; hau da, ekuazio diferentzialetatik zati bat desagerrarazteko helburuarekin definitutako aldagai aldaketa aplikatzearena. Aldagai aldaketa honekin, ekuazio diferentzialetatik zehazki kalkula daitekeen zatia (alde Kepleriarra) desagertzen da eta mantso aldatzen diren ekuazio diferentzialak lortzen ditugu. Aldagai berriekiko ekuazio diferentziales, hiru abantaila dituzte:

- Lehenik, trunkatze errore nagusia ezabatu dugunez (alde Kepleriarrari dagokiona), integrazioan urrats luzera handiagoak erabil daitezke.
- Bigarrenik, aldagai aldaketa aplikatu ondorengo ekuazioen urratsaren gehikuntza

$$U_{j+1}^{j+1/2} = U_j^{j+1/2} + \delta_j$$

egiterakoan, δ_j doitasun arruntean kalkulatu arren, batura konpentsatua erabiliz gero, $U^{j+1/2}$ balioen doitasun erlatiboa handiago izatea lortzen dugu, eta beraz, ondoren eta aurretik aplikatu beharreko $\varphi_{h/2}$ fluxuak doitasun altuagoan aplikatuz gero, azken emaitzen biribiltze-erroreen eragina txikitzea lor daitekeela erakutsi dugu.

- Hirugarrenik, puntu-finkoaren konbergentzia azkarragoa da aldagai berriei dagokien ekuazioetan, jatorrizko ekuazioetan baino.

Gure esperimentuetan kontsideratu dugun eguzki-sistemaren eredu sinplearen integrazioen esperimentuek splitting metodoak oso eraginkorrak direla erakutsi digute. Baina gorputz gehiago eta hainbat efektu (erlatibitate efektuak, gorputzak masa puntualak ez direla, mareen eragina, eguzkiaren erradiazioaren eragina...) kontutan hartzen dituen eredu errealistagotarako, RKIK metodoak splitting metodoekiko abantaila hauek izan ditzaketela azpimarratu nahi dugu:

1. Ordena altuko metodoak

Konposizio eta splitting metodoak, 10 ordenakoak dira gehienez. Gauss-en nodoetan oinarritutako IRK metodoei dagokienez, edozein ordenako metodoak eraiki daitezke. Doitasun bikoitzeko konputazioetarako, $s = 6$ ataleko ($2s = 12$ ordenako) metodoa kontsideratzen da eraginkorrena [55], baina doitasun altuagoko konputazioetarako (64 baino bit gehiagoko koma higikorreko aritmetikekin lan egiten den kasurako), ordena altuagoko metodoak aplikatzea gomendagarria dela esan ohi da. Gauss-en nodoetan oinarritutako RKIK metodoei dagokienez, doitasun mistoko (64-bit/80-bit) inplementazioaren kasuan, $s = 8$ ataleko metodoa $s = 6$ atalekoa baino eraginkorragoa izan daitekeela ikusi dugu. Espero liteke 80 biteko eta 128 biteko doitasunak konbinatzen dituen RKIK metodoen doitasun mistoko inplementazioen kasuan, oraindik ordena altuagoko metodoak gailentzea RKIK metodoen artean, eta hauek, ordena baxuagokoak diren konposizio eta splitting metodoekiko abantaila hartzea.

2. Paralelizagarria

RKIK metodoen s -ataletako funtzioen ebaluazioak independenteak dira eta modu paraleloan exekuta daitezke. Eguzki-sistemaren eredu konplexuagoa kontutan hartzen den neurrian, paralelizazioak abantaila handiagoa suposatuko du, paralelizazioaren gaitasuna erlatiboa txikiagotu egingo delako.

3. Hamiltondar orokorrak RKIK metodoak, edozein sistema Hamiltondar perturbaturik aplikatu dakizkioke. Splitting metodoak, ordea, sistema Hamiltondar banagarrietan aplikatu ohi dira, eta perturbazio orokorrak aplikatzekotan metodoaren konplexutasuna areagotzearen truke lor liteke, eraginkortasunaren kaltetan.

4. Malgutasuna

Splitting metodoen konputazioak modu sekuentzian exekutatzen dira eta konputazioak ez ditu aldaerak onartzen. RKIK metodoaren ekuazio implizituak ebazteko, ordea, teknika ezberdinak konbina daitezke eta eraginkortasuna hobetzeko aukera asko eskaintzen dizkigu. Adibidez, iterazio gehienak problemaren eredu sinple batekin, doitasun baxuan kalkula daitezke [13] eta bukaerako iterazio pare bat eredu osoarekin, doitasun altuan.

5. Birparametrizazioa

Denbora birparametrizazioa, planetaren baten eszentrikotasuna handitzen denean edo bi gorputzen arteko gerturatzeak suerta daitezkeen eguzki-sistemaren simulaziotarako tresna baliagarria dela frogatu da [45, 97]. RKIK metodoetan denbora birparametrizazioa aplikagarria da. Splitting metodoetan, ordea, denbora birparametrizazioa aplikatzeko teknika bereziak aplikatu behar dira, metodoaren sinpletasunaren eta eraginkortasunaren kalterako.

Etorkizuneko lanak

Eguzki-sistemaren integrazioarako inplementazioa garatzeko aukerak zehaztuko ditugu. Lehengo eginbeharra, eguzki-sistemaren eredu konplexuagoak integrazioa da eta, zehazki, arlo honetan aplikatzen den eguzki-sistemaren ereduarekin [80] gure inplementazioaren jokabidea aztertzea. Eredu sinplearekin lortutako emaitzekin baikorrak izateko arrazoiak baditugu eta eredu konplexuagoekin gure inplementazioaren abantaila areagotu daitekeela pentsatzen dugu. Etorkizuneko lanak bi taldeetan banatu ditugu: etorkizun hurbilekoak eta aurreragoko lanak.

Etorkizun hurbileko lanak

1. Biribiltze erroreen hedapenaren azterketa estatistikoa, puntu-finkoaren eta Newton sinplifikatuaren inplementazioetan egin genuen moduan.
2. Aurreko azterketan, ikusten bada errore hedapenean gehikuntza sistemati-ko bat dagoela, hori ekiditeko azertu beharko litzateke puntu-finkoaren eta Newton sinplifikatuaren iterazioen arteko algoritmo eraginkorra. Horretarako, Jacobiarraren hurbilpen sinple bat erabili ahal izango litzateke. Errore hedapenik ez balego ere, bide hau jorratzea interesgarria izan daitekeela iruditzen zaigu.
3. Doitasun nahasia
Eguzki-sistemaren integrazioetan, soluzioaren doitasuna hobetzeko ahalegin berezia egiten da [79]: 80-bitoko doitasuneko aritmetika eta batura konpentsatua erabiltzen dira. Gure inplementazioarekin, 80-bitoko doitasuneko integrazioa, 128-bitoko doitasuneko konputazio batzuekin konbinatuz, emaitza onak lortuko ditugulakoan gaude.
4. Eredu deskonposaketan oinarritutako teknikak

Inplementazioa eraginkorragoa egiteko lehenengo iterazioak eredu sinpleagoarekin kalkula daitezke eta bukaerako iterazioak, eredu konplexuagoarekin.

Aurreragoko lanak

1. Denbora birparametrizazioa

Gorputzen gerturatzeen tratamendurako, denbora birparametrizazio funtzioa egokiak garatzea, birparametrizazio teknikak RKIK metodoetara egokitzea, eta hainbat test problemetarako probatzea.

2. Problema oszilakorren teknikak

Problema oszilakorren tratamendu aljebraikoan oinarritutako hobekuntza teknikak (metodo prozesatuak, promediatuen teknikak) aplika daitezke. Wisdom-ek [111] bere integrazio metodoen doitasuna hobetzeko teknikekin (*symplectic correctors*) erlazionatutakoak dira hauek.

3. Paralelizazio eta bektorizazio teknika aurreratuak

Kodeen eraginkortasuna hobetzeko, konputagailuen paralelizazio eta bektorizazio gaitasunak ondo erabili behar dira. RKIK metodoak azkartzeko, oinarritzko paralelizazioa aplikatu dugu eta honek, nolabaiteko abantaila erakutsi du. Teknikak hauek modu aurreratuagoan aplikatzeko, paralelizazio eta bektorizazio gaietan sakondu beharra ikusten dugu.

V. Atala
Eranskinak

A. Eranskina

Konputazio zientzia

A.1. Sarrera

Azken hamarkadetan, konputazio zientziaren hazkundera oso handia izan da eta bere erabilera ia zientzia arlo guztietara zabaldu da [48]. Zientzialariek ahalmen handiko tresna berria (zenbakizko simulazioa) eskuragarri dute, neurri handi batean konputagailuen teknologiaren garapen handiari esker. Egungo oinarrizko konputagailuek, orain urte gutxitako superordenagailuen ahalmen berdina dute eta superordenagailuen konputazio gaitasuna ere, maila berdinean hazi da. Zenbakizko algoritmoek ere, garapen handia izan dute; algoritmo eraginkorrakoak, 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 eraginkorrak, prozesadorearen konputazio arik eta handiena, memoria komunikazio arik eta txikiarekin, diseinatu behar dira.

Inplementazio baten eraginkortasuna ez da exekuzio denboraren arabera bakarrik neurtu behar. Hori bezain garrantzitsua da kode ona idaztea [110] eta zentzu honetan hiru ezaugarri hauek bereziki zaindu behar dira:

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

Kapitulu honetan, konputazio zientziaren funtsezko osagaiak azalduko ditugu. Lehenengo, konputazioaren eraginkortasuna aztertzeke eta exekuzioak neurtzeke tresnen zehaztapenak emango ditugu. Ondoren, konputagailu hardware berriak

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

A.2. Eraginkortasuna

Konputazio zientziaren inplementazio berri baten eraginkortasuna neurtzeko, koma-higikorrekiko eragiketa kopurua (*flops*) erabili ohi da. Problema handia denean, datuen mugimendua koma-higikorrekiko eragiketak baino garestiagoa da eta eraginkortasuna, eragiketa kopuruaren arabera neurtzea okerra izan daiteke.

Prozesadoreen maiztasun-abiadura hertzetan neurtzen da, hau da, *makina ziklo segundoko* kopuruaren arabera. Une honetako prozesadoreak gigahertz (Giga = 10^9) mailakoak dira. Koma-higikorrekiko oinarrizko eragiketa bat (\oplus , \ominus , \otimes , \oslash) exekutatzeko ziklo gutxi batzuk behar dira eta beraz, 1 GHz-ko prozesadore batek $> 10^8$ koma-higikorrekiko eragiketa segundoko exekutatzeko (> 100 megaflops) [95].

Adibidea. Demagun A, B eta C ($n \times n$) dimentsioko matrizeak ditugula eta $C = AB$ matrize arteko biderketa egiteko behar dugun denbora jakin nahi dugula.

$$c_{ij} = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} * b_{ji}.$$

- c_{ij} gai bakoitza kalkulatzeko n biderketa eta $(n-1)$ batura egin behar ditugu.
- C matrizeak n^2 osagaia ditu $\Rightarrow \mathcal{O}(n^3)$ koma-higikorrekiko ariketak exekutatu behar dira.

Matrizearen tamaina $n = 100$ bada, orduan $\mathcal{O}(n^3) = 10^6$ eragiketa egin behar ditugu. 1-GHz prozesadore batean exekutatzeko, 10^{-2} segundo baino gehiago beharko genituzke. Baina 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 exekutatzeko 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, diferentzia hau handituz joango dela. Beraz, kodearen exekuzioa azkartzeko derrigorrezkoa da konputagailuan memorien arteko datuen mugimendua minimizatzea.

Exekuzio denboren neurketa

Unix-eko *time* agindua, konputazioen denborak ezagutzeko erabili daiteke [95]:

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

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

Agindu honek, *./a.out* C programa exekutatu 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(&time1);

elapsed_time=difftime(time1, time0);
```

CPU denborari buruzko argibide bat ematea komeni da. Neurtzen ari garen kodea sekuentzialki exekututzen bada, hau da, hari (*thread*) bakarrekoa, orduan kode zati hori exekutatzeke erabili duen CPU denbora itzuliko du. Aldiz, kodea paraleloan exekututzen bada, orduan, hari guztien CPU denboren batura itzuliko ditu.

Adibidea. Argiago azaltzeko, $C = AB$ matrize biderketaren kodearen bi ekuzioen 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:

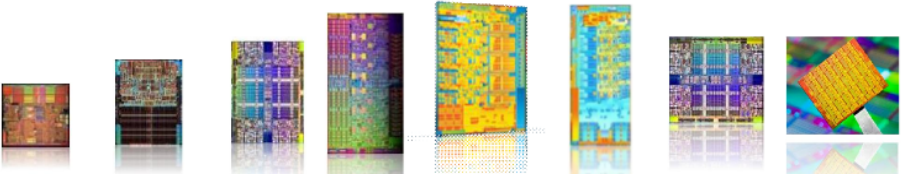
```
elapsed-time=1.0 s
elapsed-cpu-time=2.35 s
```

Elapsed-time deiturikoa, kode paraleloen denborak neurtzeko irizpidea da. Programazio paraleloan, algoritmoen ekuzio denborak egokien neurtzen duen aldagaia da baina, une berean programa bakarra exekutatzea behartuta gaude.

A.3. Hardwarea

Orokorrean, gaur-egungo konputagailuak (super-konputagailu, eramangarri,...) paraleloak dira. 1986 – 2002 urteen artean, txip barruko transistore dentsitatea handitzen zen heinean, prozesadore bakarreko konputagailuen eraginkortasuna hobetuz joan zen. Baina 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. A.1. irudian ikusi daitekeenez, Intel Xeon konputagailu familiaren paralelizazio eta bektorizazio gaitasuna gero eta handiagoak dira.



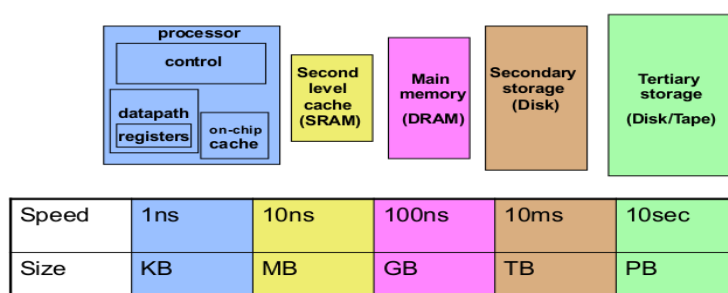
| | Intel® Xeon® processor 64-bit | Intel® Xeon® processor 5100 series | Intel® Xeon® processor 5500 series | Intel® Xeon® processor 5600 series | Intel® Xeon® processor code-named Sandy Bridge EP | Intel® Xeon® processor code-named Ivy Bridge EP | Intel® Xeon® processor code-named Haswell EP | Intel® Xeon® Processor codenamed Skylake EP |
|------------|-------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------------------|-------------------------------------------------|----------------------------------------------|---------------------------------------------|
| Core(s) | 1 | 2 | 4 | 6 | 8 | 12 | 18 | 28 |
| Threads | 2 | 2 | 8 | 12 | 16 | 24 | 36 | 56 |
| SIMD Width | 128 | 128 | 128 | 128 | 256 | 256 | 256 | 512 |

A.1. Irudia: Intel Xeon konputagailu familiaren eboluzioa: gero eta prozesadore gehiago eta bektore erregistro zabalagoak.

Memori hierarkia

Memorien arteko datuen komunikazioak, algoritmoaren eraginkortasuna baldintzatuko du eta zentzu honetan, konputagailuaren memoria hierarkiaren kudeaketa egokia egitea funtsezkoa da. Konputagailuaren memoria mota ezberdinen hierarkia (A.2.irudia) eta funtzionamendua deskribatuko dugu.

CPU-k, koma-higikorreko eragiketak exekutatzeko: erregistroetatik datuak irakurri, eragiketak kalkulatu eta emaitza erregistroetan idazten ditu. Memoria



A.2. Irudia: Memoria hierarkia

nagusia eta erregistroen artean, 2 edo 3 mailako cache memoria dugu: lehen cache memoria ($L1$) txikiena eta azkarrena da, eta beste mailak ($L2$, $L3$, ...), handiagoak eta motelagoak dira. Memoria nagusian, exekutatzen diren programak eta datuak gordetzen dira (1 – 4 GB artekoa). Azkenik, disko gogorrean konputagailuko datu (argazki, bideo,...) eta erabilgarri ditugun programa guztiak gordetzen dira.

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

Cache memoria lerroka egituratuta dago eta lerro bakoitza 64 edo 128 bytez (8 edo 16 doitasun bikoitzeko zenbaki) osatuta dago. Programa batek datu bat behar duenean, memoria nagusitik lerro tamainako datu taldea (memorian jarraian gordetako datuak) irakurriko du eta cachean idatziko du. Programatzaileak, algoritmo eraginkorrak inplementatzeko memorien arteko komunikazio hau minimizatzen saiatu behar du eta horretarako, inplementazioaren diseinua datuen memoria atzipen jarraian oinarritu behar du. Ezaugarri hau, *spatial/data locality* izenaz ezaguna da eta helburua, cachera ekartzen diren datuak, memoria nagusian idatzi aurretik gutxienez behin erabiltzea da.

Adibidea. Adibide honetan, $A = (a_{ij})_{i,j}^{n,m}$ matrize baten osagaien batura ($sum = \sum_{i,j=0}^{n,m} a_{ij}$) kalkulatzeko bi inplementazio aztertuko ditugu. C lengoian matri-zeak 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 inplementazioan, kanpo iterazioa lerroka (Algoritmoa 29): matrizearen lehen osagaia $a(1, 1)$ behar dugunean, memoria nagusitik Cachera osagai honetaz gain, jarraiko 16 osagaiak 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 inplementazioan, kanpo iterazioa zutabekak (Algoritmoa 30): bigarren osagaia ($a(2, 1)$) gehitzeko memoria irakurketa berri bat egin behar dugu.

```

int n;
double a[n][m];
sum = 0;
for i ← 1 to n do
    | for j ← 1 to m do
    | | sum+ = a(i, j);
    | end
end

```

Algoritmoa 29: Memoria atzipena eraginkorra

```

int n;
double a[n][m];
sum = 0;
for j ← 1 to m do
    | for i ← 1 to n do
    | | sum+ = a(i, j);
    | end
end

```

Algoritmoa 30: Memoria atzipena ez-eraginkorra

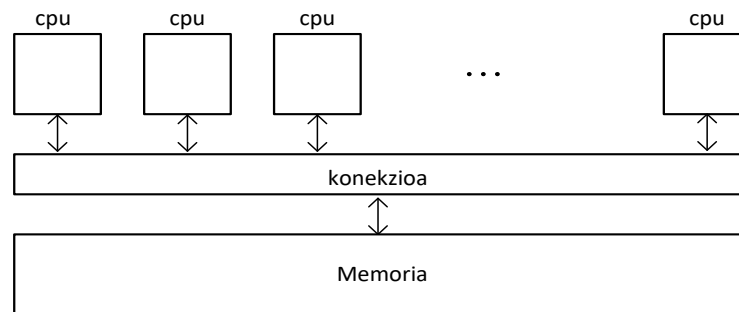
Arkitektura motak

Prozesadore anitzeko konputagailu hardware berriak, konplexuak eta heterogeneoak dira. Egoera honetan, programatzaileak zailtasun handiak ditu arkitektura berriek eskaintzen dituzten gaitasunak ondo kudeatzeko [87].

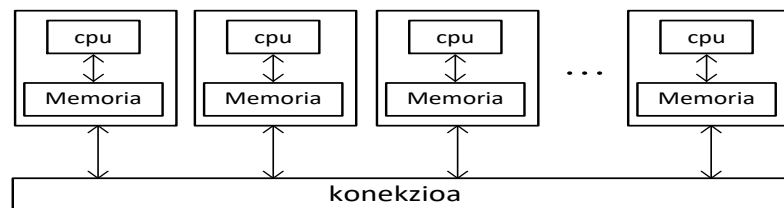
Lehen hurbilpen modura bi sistema nagusi bereiziko ditugu: memoria konpartitutako eta memoria banatutako sistemak. Memoria konpartitutako sistemetan, prozesadore guztiek memoria osoa konpartitzen dute eta inplizituki konpartitutako datuen atzipenaren bidez komunikatzen dira (A.3. irudia). Memoria banatutakotako sistemetan aldiz, prozesadore bakoitzak bere memoria pribatua du eta

esplizituki bidalitako mezuen bidez komunikatzen dira (A.4. irudia). Aipatzekoa 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. Jokoen eta animazio industrian, grafiko oso azkarrak beharrak bultzatuta sortutako teknologia da. Oinarrian, imajinak pantailaratzeko prozesagailu asko paraleloan lan egiten dute eta azken hamarkadan, GPU unitate hauek konputazio zientziara zabaldu dira.



A.3. Irudia: Memoria konpartitutako sistemak



A.4. Irudia: Memoria banatutako sistemak

Oinarrizko konputagailu paraleloa

Gure lanerako, oinarrizko konputagailu paraleloak kontsideratuko ditugu: memoria konpartitutako eta prozesadore anitzeko unitate bat edo gehiagoz osatutako

Bektorizazioa (SIMD)

Prozesadore berriei hardware bektore unitateak gehitu zaizkie, eta (AVX) bektore instrukzioetan oinarritutako paralelizazioa eskaintzen dute [91, 5]. CPU-ak bektore erregistroan gorde diren zenbaki multzo bati, eragiketa berdina aplikatzen die (*Single Instruction Multiple Data*, SIMD). Bektore erregistro hauek 512-biteko tamainakoak ($512/64 = 8$ doitasun bikoitzeko zenbaki) izan daitezke eta oro har, oinarritzko eragiketa aritmetikoak (batuketa, kenketa, biderketa eta zatiketa) aplikatu daitezke. Zentzu honetan ulertu behar da hardware bidezko bektorizazioak, doitasun bikoitzeko konputazioen eraginkortasuna $x8$ hobetzen duela eta doitasun arrunteko konputazioetan, berriz, $x16$.

Adibide moduan, hurrengo adibidearen bidez, iterazio bakoitzean 8 osagaien bektore baten batura erakutsiko nahi dugu,

```

for  $i = 0; i < n; i += 8$  do
    |    $A[i : (i + 8)] = A[i : (i + 8)] + B[i : (i + 8)];$ 
end

```

Algoritmoa 31: SIMD (bektorizazioa)

A.4. Programazio lengoaiak (Paralelizazioa)

Fortran eta C, aplikazio zientifikoetan gehien erabiltzen diren programazio lengoaiak dira [60]. Fortran (formula translation) 1950 hamarkadan garatutako goimailako 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 bakoitzean funtzionalitate berriak eta C lengoiairekin 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 lengoiairen 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 inplementatzeko, bi dira interfaze aplikazio programa (API) moduan inplementatuta dauden sistema nagusiak [95]:

1. *MPI* (Message Passing Interface). Erabiliena da, memoria banatutako sistematarako pentsatua baina memoria konpartitutako sistemetan ere aplikatu daitekeena.

2. *OpenMP* (Open Specifications for MultiProcessing). Erabiltzeko errazagoa eta memoria konpartitutako sistemetan bakarrik aplikatu daitekeena.

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

Azkenik, konputazio zientzian *problema ebazteko inguruneak* (Problem Solving Environments) deituriko softwareak aipatuko ditugu. Ingurune hauek, programazio leihoko interaktibo batean, goi-mailako lengoai batean inplementazioen garapena eta emaitzen azterketa egiteko aukera eskaintzen dute. Matlab eta Mathematica [114] programazio ingurune nagusienak dira. Guk Mathematica bi modutara erabili dugu. Lehenik, prototipoak garatzeko tresna gisa: ideiak garatu eta probatu, inplementazioa C lengoaian egin aurretik. Bigarrenik, gure C inplementazioen esperimentuak Mathematica ingurunetik exekutatu eta emaitzak grafikoki aztertu ditugu. Era honetan, irakurleari Mathematicako dokumentuetan esperimentuen zehaztasun guztiak eta esperimentu berdina errepikatzeak aukera ematen diogu.

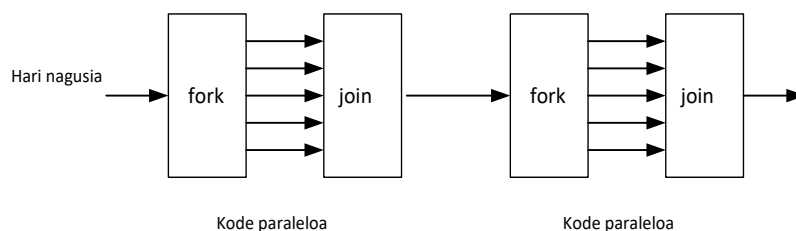
OpenMP

OpenMP [2] memoria konpartitutako sistemetan programazio paraleloa exekutatzeke interfaze aplikazio programa (API) da. *OpenMP* programazioan, memoria osoaren atzipena duten prozesadore multzo batek osatzen du konputazio sistema.

Hasieran programaren hari bakarra prozesadore batean exekutatu da, kode-paraleloko unera iritsi arte. Orduan, hari multzo independenteak exekutatu dira une paraleloa bukaera iritsi arte. Exekuzio kontrolari, *fork-join* ereduak deitzen zaio eta grafikoki (A.7. irudian) adierazi dugu.

- OpenMP programaren hasieran prozesu bakarra dago, hari (thread) nagusia.
- FORK: hari nagusiak, hari talde paraleloa sortzen du.
- JOIN: kode-paraleloko hari guztiak bukatzen dutenean (sinkronizazioa), hari nagusiak soilik jarraitzen du.

Paralelizazioan hari kopurua zehaztu behar da, eta ohikoa izaten da hari bat prozesadore bakoitzeko sortzea. Konpilazio direktiben bidez (C kodean *pragma* izeneko preprozesadore aginduak), paralelizazioa nola exekutatu behar den zehazten da.



A.7. Irudia: OpenMp programazio eredua

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

Algoritmo batean, kodearen zati bat da paralelizagarria [95]. Suposa dezagun, konputazioaren %50 sekuentziala dela eta beste %50 paraleloan exekutatu daitekeela. Zati sekuentzialak, lortu daitekeen konputazio optimoena (zati paralelizagarriaren exekuzio denbora zero dela kontsideratzea) 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 kontsideratuz, 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 kontsideratuko 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 milisegundoko mailako eragiketak izan daitezke.

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

A.5. Aljebra lineal dentsorako liburutegiak

Zenbakizko integrazioen aljebra lineala, konputazioaren alde konplexua da. Aljebra linealeko eragiketak inplementatzen dituzten kalitate handiko liburutegiak daude eta inplementazio berriak, liburutegi hauetan oinarritzea gomendagarria da [61]. Liburutegi hauek, ondo probatutako softwareak dira, konplexutasun handikoak, modu seguruan eta azkarrean exekutatzeko diseinatu dira.

Hauek dira, aljebra linealerako liburutegi aipagarrienak:

1. BLAS (Basic Linear Algebra Subroutines): matrize eta bektoreen arteko eragiketa aritmetikoak biltzen dituen liburutegia.
2. LAPACK (Linear Algebra Package): aljebra linealaren problemak ebazteko liburutegia.

Inplementazio hauen funtzioak *Fortran* lengoaian garatuta daude eta ezaugarri hauek dituzte:

1. Datu-mota hauetarako aplikatu 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 trianguluarrak
TR=TRiangular ; TB=TRiangular Band; TP=Triangular Packed.

BLAS

BLAS liburutegiak [1], bektore eta matrizeen arteko funtzio 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 garrantzitsua, behe-mailako eragiketa hauen konputazioak ematen du. Behe-mailako eragiketen hauen optimizazioak, konputagailu bakoitzaren arabekoak dira eta espezializazio handia eskatzen du. Fabrikatzaile bakoitzak optimizatutako bere BLAS liburutegia du (AMD-ACML, Intel-MKL). Bestalde, optimizatutako BLAS instalazioa, *ATLAS* (Automatically Tuned Linear Algebra Software) izeneko aplikazioaren bidez ere egin daiteke.

Inplementazio guztiek, interfaze berdina erabiltzen dute eta beraz, BLAS-en oinarritutako garapena edozein konputagailuan erabili daiteke (portabilitatea). *BLAS* liburutegia, Fortran lengoaian inplementatuta dago eta C lengoaiatik *BLAS* funtzioen erabilpena errazteko, *cblas* interfazea erabiltzea gomendagarria da.

Adibidea. *BLAS* liburutegiaren eraginkortasuna, *cblas_dgemm()* matrizeen biderkadura funtzioaren bidez aztertu dugu eta gure implementazio arrunta baino $10\times$ azkarragoa dela baieztatu dugu (Taula A.1.).

LAPACK

LAPACK, 1992. urtean garatu zen [4, 59] eta aljebra linealaren problemak ebazteko funtzioen liburutegia da. Jatorrizko bertsioa *Fortran 77* lengoaian inplementatuta 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 ebazpena: $AX = b$.
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 inplementazioa, gehien bat BLAS-3 taldeko funtzioetan oinarritzen da.

LAPACK liburutegia C-lengoaiatik LAPACK funtzioei deitzeko interfazea da. LAPACK liburutegiaren funtzioak, hiru taldeetan banatzen dira [4, 1]:

A.1. Taula: BLAS liburutegiaren eraginkortasuna. C lengoaiako gure garapena (C-arrunta) eta BLAS liburutegiaren `cblas_dgemm()` implementazioak konparatu ditugu. n tamainako ezberdineko matrizeak biderkatu ditugu, eta biderketa bakoitza n_{test} alditan errepikatu dugu, kasu guztiek eragiketa aritmetiko kopuru berdina izan ditzaten

| n | ntests | C-Arrunta | | cblas_dgemm | |
|-----|--------------------|-----------|--------|-------------|--------|
| | | Wall T. | CPU T. | Wall T. | CPU T. |
| 10 | 5.00×10^8 | 478. | 478. | 205. | 206. |
| 20 | 6.25×10^7 | 491. | 491. | 92. | 91. |
| 30 | 1.85×10^7 | 474. | 474. | 78. | 78. |
| 40 | 7.81×10^6 | 523. | 523. | 66. | 66. |
| 50 | 4.00×10^6 | 493. | 493. | 64. | 64. |
| 60 | 2.31×10^6 | 479. | 479. | 58. | 58. |
| 70 | 1.45×10^6 | 475. | 475. | 43. | 170. |
| 80 | 9.76×10^5 | 469. | 469. | 45. | 177. |
| 90 | 6.85×10^5 | 491. | 491. | 47. | 186. |
| 100 | 5.00×10^5 | 466. | 466. | 39. | 156. |
| 200 | 6.25×10^4 | 504. | 504. | 34. | 138. |
| 400 | 7.81×10^3 | 657. | 657. | 35. | 140. |

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

Adibidea.

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

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

Adibidea.

LAPACKE-dgetrf (LAPACK-ROW-MAJOR, n , m , A, lda, ipiv);

Errutina honek A ($n \times m$) tamainako matrizearen LU faktORIZAZIOA kalkulatzeko du, $A = P * L * U$.

LAPACKE-dgetrs (LAPACK-ROW-MAJOR, trans, n , nrhs, A, lda, ipiv, B, ldb);

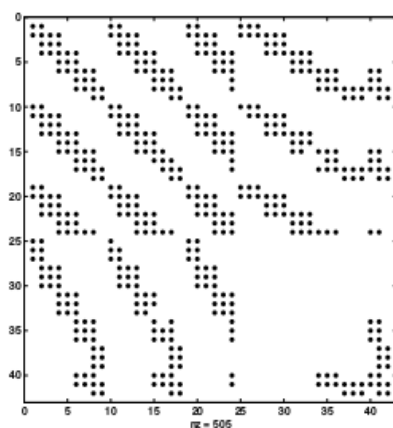
Errutina honek $A * X = B$ ekuazio sistemaren X soluzioa kalkulatzeko du.

3. Errutina laguntzaileak.

Matrize bakanak

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

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



A.8. Irudia: Matrize bakanak

Matrizearen bakantasuna, konputazioaren memoria eta exekuzio denbora gutxitzeko erabil daiteke.

1. Doitasun bikoitzeko $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matrizea,
 - (a) Dentsoa: $8mn$ byte.
 - (b) Bakana: $\approx 16n_{nz}$ (gordetzeko teknikaren arabera).
2. $y = y + Ax$, $y, x \in \mathbb{R}^n$ eta $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$,
 - (a) Dentsoa: $\mathcal{O}(mn)$, eragiketa aritmetikoak.
 - (b) Bakana: $\mathcal{O}(n_{nz})$, eragiketa aritmetikoak.

A.6. Konpiladorea

Konpiladorearen zeregina konplexua da, goi mailan idatzitako programari dagokion makina kodea sortzea (konputagailuaren errekursoak modu eraginkorrean

erabiltzen dituenak) [109]. 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 estandarrek eskaintzen dituzte. Orokorrean, 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 gomendagarriena.

Maila altuagoko optimizazioak aplikatu daitezke, baina optimizazio hauek arrisurtsuak 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, lengoiaia berezi bat erabiliz, konpilazio prozesua automatizatzeko programa moduko bat dugu [109].

A.7. Laburpena

Algoritmo bat inplementatzen 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 inplementazio berrietan erabiltzea komenigarria da.

Kapitulu honi dagokion gomendatutako bibliografia: [95, 109, 48, 61]. LAPACK eta BLAS liburutegiak erabiltzeko informazio interesgarria "Intel Math Kernel Library. Reference Manual"[1] dokumentuan aurki daiteke.

B. Eranskina

Ekuazioen garapenak

B.1. Kepler-en fluxua

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

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{\mu}{\|q\|}, \quad (\text{B.1})$$

non m eta μ konstanteen balioak formulazioaren araberakoak diren.

Koordenatu sistema $q = q_2 - q_1$ duen formulazioa aukeratzen badugu, konstanteen balioak hauek dira,

$$m = (1/m_1 + 1/m_2)^{-1}, \quad \mu = Gm_1m_2,$$

eta ekuazio diferentzialak era honetan definitzen dira,

$$\dot{q} = p, \quad \dot{p} = -\frac{kq}{\|q\|^3}, \quad (\text{B.2})$$

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

Kepler problemaren soluzio zehatza kalkula daiteke: une bateko kokapen eta abiadurak emanik, Δt denbora tarte bat igarotakoan (positiboa ala negatiboa), kokapen eta abiadura zehatzak konputatu daitezke. Eguzki-sistemaren integrazioetarako, Kepler problema doitasun handian eta era eraginkorrean kalkulatzeko, funtsezkoa da. Kepler problemaren erreferentziazko inplementazioak, Danby [29] eta J.Wisdom-enak [112] ditugu.

Kepler-en fluxua, era honetan kalkulatu da. Lehenik, koordenatu kartesia-rretatik ($q, p \in \mathbb{R}^3$), koordenatu eliptikoetara (a, e, i, Ω, E) itzulpena egingo dugu. Koordenatu eliptikoetan, E (*eccentric anomaly*) aldagaia izan ezik, beste aldagaia konstante mantentzen dira: beraz, E_0 balioa emanda, Δt denbora tarte aurrera egin eta E_1 balio berria kalkulatu dugu. Horretarako, Kepler-en izeneko

ekuazioetan oinarrituko gara,

$$\begin{aligned} t_0 &= e \sin(E_0), \\ t_1 &= e \sin(E_1). \end{aligned} \tag{B.3}$$

Azkenik, koordenatu eliptikoetatik koordenatu cartesianetara itzulpena eginenez, kokapen eta abiadura berriak eskuratuko ditugu.

$$\begin{aligned} (t_0, q_0, v_0) \in \mathbb{R}^6 &\longrightarrow (t_0, a, e, i, \Omega, E_0) \in \mathbb{R}^6 \\ &\downarrow \Delta t \\ (t_1, q_1, v_1) \in \mathbb{R}^6 &\longleftarrow (t_1, a, e, i, \Omega, E_1) \in \mathbb{R}^6 \end{aligned}$$

Gorputz baten orbita Kepleriarra hiru motakoa izan daiteke: $H(q_0, p_0) < 0$ denean orbita eliptikoa da, $H(q_0, p_0) > 0$ orbita hiperbolikoa eta $H(q_0, p_0) = 0$ orbita parabolikoa. Kepler fluxuaren C implementazioa, orbita eliptikoetarako garatu dugu eta zehaztasunak, B.1. eranskinean eman ditugu. (B.2) problemari dagokion fluxua, era honetan defini daiteke,

$$\begin{aligned} \varphi_{\Delta t}^k : \mathbb{R}^6 &\longrightarrow \mathbb{R}^6, \\ u_0 &\rightsquigarrow u_1. \end{aligned}$$

non $u = (q, v) \in \mathbb{R}^6$ den.

Kepler fluxuaren implementazioa

Keplerren ekuazioa, kokapen eta abiadura berriak kalkulatzeko oinarritzkoa 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 integrazio konstantea da. E (*eccentric anomaly*) eta t -ren arteko erlazio hau erabiliz kalkulatu da mugimendua. Mugimendu eliptikoaren kasura mugarituko gara ($0 \leq e < 1$) eta Keplerren ekuazioa transzendentala denez, zenbakizko metodo baten bidez ebartziko 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 ebazteko, 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 zailtasun 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 ordezkaturaz,

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

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 ordezkatu dugu,

$$x \approx \sin(x), \quad \cos(x) \approx 1 - \frac{x^2}{2}$$

eta honako berdintza lortuko dugu,

$$\begin{aligned} & (se \cos(n\Delta t) + ce \sin(n\Delta t)) \frac{x^2}{2} \\ & + (1 + se \sin(n\Delta t) - ce \cos(n\Delta t))x - (se) = 0. \end{aligned}$$

Azkenik, goiko ekuazio hau askatuz ($Ax^2+Bx+C=0 \rightarrow x = -B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}/2A$) lortuko dugu,

$$\Delta E^{[0]} = x + n\Delta t.$$

Koordenatu barizentrikoen kalkulua ekuazio hauen bidez egingo dugu,

$$(q_1, v_1) = (q_0, v_0) + (q_0, v_0) \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

$$b_{11} = (C - 1) \frac{a}{\|q\|},$$

$$b_{21} = \Delta t + (S - \Delta E) \frac{a^{\frac{3}{2}}}{\mu^{\frac{1}{2}}}$$

$$b_{12} = \frac{s}{\|q\| \sqrt{a} (1 - ce C + se S)},$$

$$b_{22} = \frac{C - 1}{1 - ce C + se S}.$$

Non osagai bakoitzaren definizioa,

$$C = \cos(\Delta E), \quad S = \sin(\Delta E),$$

$$ce = e \cos(E_0) = \|q\| \|v\|^2 - 1,$$

$$se = e \sin(E_0) = \frac{(q \cdot v)}{\sqrt{\mu a}},$$

$$a = \frac{\mu \|q\|}{2\mu - \|q\| \|v\|^2},$$

$$n = \frac{\mu^{\frac{1}{2}}}{a^{\frac{3}{2}}}.$$

Ezabapen arazoa. ΔE txikia denean, $\cos(\Delta E) - 1$ espresioaren kalkuluaren ezabapen arazoak biribiltze errore handia eragin dezake. Hori konpontzeko balio-kidetasun trigonometriko hau erabiliko dugu,

$$\cos(\Delta E) - 1 = -\frac{\sin^2(\Delta E)}{1 + \cos(\Delta E)}.$$

Eta beraz, Keplerren ekuazioak hauek izango dira,

$$f(\Delta E) = \Delta E - ce \sin(\Delta E) + se \left(\frac{\sin^2(\Delta E)}{1 + \cos(\Delta E)} \right) - n\Delta t = 0$$

Eta (q_1, v_1) balioak kalkulatzeko,

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

B.2. Koordenatu sistemak

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

$$H(q, p) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \frac{\|p_i\|^2}{m_i} - G \sum_{0 \leq i < j \leq N} \frac{m_i m_j}{\|q_i - q_j\|}. \quad (\text{B.4})$$

Koordenatu Heliozentrikoak

Koordenatu barizentrikoetatik abiatuta eta aldagai aldaketa bat aplikatuz ekuazio koordenatu heliozentrikoen $Q_i, P_i \in \mathbb{R}^3$, $i = 0, \dots, N$ arabera berridatziko ditugu.

Aldagai aldaketa

Lehenik honako aldagai aldaketa aplikatuko dugu,

$$Q_0 = q_0, \quad Q_i = q_i - q_0, \\ P_0 = \sum_{i=0}^N p_i, \quad P_i = p_i, \quad i = 1, \dots, N.$$

Hamiltondarra era honetan deskonposatu daiteke,

$$H = H_K + (T_1 + U_1)$$

non

$$\begin{aligned}
 H_K &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|P_i\|^2}{2\mu_i} - \frac{Gm_0m_i}{\|Q_i\|} \right), \quad \mu_i = \frac{m_0m_i}{(m_0 + m_i)}, \\
 T_1 &= \frac{1}{m_0} \left(\sum_{0 < i < j \leq N} P_i P_j \right), \\
 U_1 &= - \sum_{0 < i < j \leq N} \frac{Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|}.
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Hamiltondarra abiaduraren arabera idazteko $V_i = P_i/\mu_i$ berdintza ordezkatu-ko dugu,

$$\begin{aligned}
 H_K &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|V_i\|^2 \mu_i}{2} - \frac{Gm_0m_i}{\|Q_i\|} \right), \quad \mu_i = \frac{m_0m_i}{(m_0 + m_i)}, \\
 T_1 &= m_0 \left(\sum_{0 < i < j \leq N} \frac{m_i m_j V_i V_j}{(m_0 + m_i)(m_0 + m_j)} \right), \\
 U_1 &= - \sum_{0 < i < j \leq N} \frac{Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|}.
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

Ekuazio diferentzialak

Hamiltondar bakoitza independenteki kontsideratuta dagokio ekuazio diferentzialak lortzen ditugu:

1. H_K .

$$\begin{aligned}
 \dot{Q}_i &= \nabla_p H_k \Rightarrow \dot{Q}_i = P_i \left(\frac{m_0 + m_i}{m_0 m_i} \right), \\
 \dot{P}_i &= -\nabla_q H_k \Rightarrow \dot{P}_i = -\frac{Gm_0 m_i}{\|Q_i\|^3} Q_i, \quad i = 1, \dots, N.
 \end{aligned}$$

2. T_1 .

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

3. U_1 .

$$\dot{Q}_i = \nabla_p U_1 \Rightarrow \dot{Q}_i = 0,$$

$$\dot{P}_i = -\nabla_q U_1 \Rightarrow \dot{P}_i = \sum_{j \neq i, j=1}^N \left(\frac{-Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|^3} (Q_i - Q_j) \right), \quad i = 1, \dots, N.$$

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 .

$$\dot{Q}_i = 0,$$

$$\dot{V}_i = -\frac{G(m_0 + m_i)}{m_0} \sum_{j \neq i, j=1}^N \left(\frac{m_j}{\|Q_i - Q_j\|^3} (Q_i - Q_j) \right), \quad i = 1, \dots, N.$$

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

$$v_i = \frac{m_0}{m_0 + m_i} V_i, \quad i = 1, \dots, N$$

$$P_0 = \sum_{i=0}^N p_i = \sum_{i=0}^N m_i v_i = 0 \Rightarrow m_0 v_0 + \sum_{i=1}^N m_i v_i = 0 \Rightarrow v_0 = -\frac{1}{m_0} \sum_{i=1}^N m_i v_i.$$

Koordenatu Jacobiarrak

Koordenatu barizentrikoetatik abiatuta eta aldagai aldaketa bat aplikatuz, ekuazioak koordenatu Jacobiarren $Q_i, P_i \in \mathbb{R}^3, i = 0, \dots, N$ arabera berridatziko ditugu.

Aldagai aldaketa

Lehenik honako aldagai aldaketa aplikatuko dugu,

$$Q_0 = (m_0 q_0 + \dots + m_n q_n) / \eta_N, \quad Q_i = q_i - \left(\sum_{j=0}^{i-1} m_j q_j \right) / \eta_{i-1}$$

$$P_0 = \sum_{i=0}^N p_i, \quad P_i = \left(\eta_{i-1} p_i - m_i \sum_{j=0}^{i-1} p_j \right) / \eta_i, \quad i = 1, \dots, N.$$

non $\eta_i = \sum_{j=0}^i m_j$ den.

Era berean, Jacobi masak $m'_i = (\eta_{i-1} m_i) / \eta_i$ eta $\mu'_i = m_i \eta_{i-1}$ ekuazioetan ordezkatzeko ditugu. Hamiltondarra era honetan deskonposatu daiteke,

$$H = H_K + H_I,$$

non

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

$$H_I = \left(\frac{\mu'_i}{Q_i} - \frac{Gm_0 m_i}{q_i} \right) - \sum_{0 < i < j \leq N} \frac{Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|}.$$

B.3. Newton eraginkorraren garapena

Formulazio estandarrean honako ekuazio sistema askatzeko metodoa proposatzen da,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y = r. \quad (\text{B.7})$$

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

Kasu orokorra

Honako ekuazio sistemari,

$$(I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J) \Delta Y - \frac{1}{2}(e_s \otimes I_d) \Delta z = r, \quad (\text{B.8})$$

$$(-he_s^T B \otimes J) \Delta Y + \Delta z = 0, \quad (\text{B.9})$$

aldagai aldaketa hau, aplikatuko diogu.

$$\Delta Y = (Q \otimes I_d) W. \quad (\text{B.10})$$

1. Lehen urratsa.

Ekuazioa sistemaren lehen ekuazioari (B.8), aldagai aldaketa (B.10) aplikatu eta $(Q^{-1} \otimes I_d)$ gaia ezkerretik biderkatuz,

$$(Q^{-1} \otimes I_d) (I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J) (Q \otimes I_d) W - (Q^{-1} \otimes I_d) \left(\frac{1}{2} e_s \otimes I_d \right) \Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d) r.$$

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,

$$Q^{-1} \bar{A} Q = \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.11})$$

eta beraz,

$$(I_s \otimes I_d - h \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{pmatrix} \otimes J) W - \frac{1}{2} (Q^{-1} e_s \otimes I_d) \Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d) r.$$

Eta $I_s \otimes I_d$ bloke moduan idatzia,

$$I_s \otimes I_d = \begin{pmatrix} I_m \otimes I_d & 0 \\ 0 & I_{s-m} \otimes I_d \end{pmatrix} \quad (\text{B.12})$$

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

3. Hirugarren urratsa.

Bigarren ekuazioari (B.8) aldagai aldaketa (B.10) aplikatuz,

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

eta garatuz,

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

Kasu simetrikoa

Kasu orokorraren emaitzan, kasu simetrikoa ordezkatzuz

$$W = \begin{pmatrix} W' \\ W'' \end{pmatrix}, \quad Q = (Q_1 \quad Q_2)$$

dagokion ekuazioak lortuko ditugu ekuazioak.

Honako berdintza hauek kontutan hartuz, $Q^{-1} = Q^T B$, $es^T B Q_2 = 0$, $Q_2^T B es = 0$ honako ekuazioak lortuko ditugu,

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

C. Eranskina

Inplementazioak

Lan honetan, ekarpen bakoitzari dagokion C lengoaiako implementazio bat garatu dugu eta [kode bilgunean](#) eskuragarri jarri dugu. Kodea eskuragarri jartzeari, lehentasuna eman diogu [8, 110]. Batetik, garapenak modu argian dokumentatzea behartu gaitu; bertan zehaztasun guztiak aztertu daitezke eta gure lanaren baliagarritasuna baieztatu daiteke. Bestetik, ikerlariei gure lana erabiltzeko eta hobetzeko aukera eskaintzen diegu.

Konputazio zientzian, idatzitako kodearen 200 lerro oro, errore bat izaten dela [43] estimatzen da. Gure implementazioak ondo frogatu baditugu ere, errorerik ez denik izango ezin dugu ziurtatu. Akatsen bat izatekotan, larria ez izatea espero dugu eta edozein kasutan erabiltzaileak jakinaraztea eskertu genuke.

Inplementazioen kodea antolatzeke, irizpide berdinak erabili ditugu. Lehenengo, implementazioen egitura orokorra azaldu dugu eta ondoren, garapen bakoitzaren argibideak emango ditugu.

C.1. Egitura orokorra

Inplementazioen edukia, direktorio hauetan banatu dugu:

1. CoefficientsData

Mathematican, IRK Gauss kolokazio metodoaren koefizienteak sortzeko aplikazio bat garatu dugu. Gure esperimentuetarako $s = 6$, $s = 8$, $s = 9$ eta $s = 16$ ataletako Gaussen metodoak aplikatu ditugu eta metodo bakoitzari dagokien doitasun bikoitzeko (64-bit) koefizienteak, azpidirektorio batean bildu ditugu.

2. PerturbationsData

Errorearen azterketa estatistikoak egiteko, hasierako balio ezagun baten $P = 1000$ hasierako balio perturbatuak sortu ditugu; hasierako balio originalaren

osagai bakoitza ausaz perturbatu dugu ($\mathcal{O}(10^{-6})$ tamainako errore erlatiboarekin). Problema bakoitzari dagokion, $P = 1000$ hasierako balio perturbatuak, fitxategi bitar batean idatzi dugu eta horrela, fitxategi hauetatik hasierako balioak irakurrita, esperimentu bera errepikatu daiteke.

3. Packages

Esperimentuak, Mathematica ingurunetik exekutatu ditugu eta direktorio honetan, soluzioen azterketak egiteko hainbat funtzio garatu ditugu. Bate-tik, problema bakoitzari dagokion ekuazio diferentzialak eta Hamiltondarra inplementatu ditugu. Bestetik, esperimentuen grafikoak irudikatzeko funtzio laguntzaileak garatu ditugu.

4. Examples

Mathematica erabiliz egindako zenbakizko integrazioen adibideak eman ditugu. Adibide bakoitza, azpidirektorio batean bildu dugu: zenbakizko integrazioa eta honen analisia, modu independentean exekutatu daitezke. Horretarako, integrazioaren soluzioak fitxategi bitarretan idazten dira eta analisiak, fitxategi hauek irakurriko ditu.

5. Code

C lengoian garatutako gure inplementazioa.

Exekuzioa

Code/Readme.txt fitxategian, inplementazioaren argibideak eman ditugu. Inplementazioa bi modutan exekutatu daiteke.

1. Linux terminala

Exekuzioa Linux terminalatik exekutatu daiteke eta exekutatzeko adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu.

2. Mathematica ingurunetik

Bestalde, inplementazioa Mathematicatik exekutatzeko prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu. Mathematicatik gure C inplementazioaren funtzio nagusia deitu ahal izateko, 'math-IRK.tm' eta 'math-IRK.c' fitxategiak definitu ditugu. Exekutagarria, 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 inplementazioan, OpenMP erabili dugu: *PARALLEL* konpilazio parametroarekin aktibatu daiteke eta orduan, prozesadore kopurua 'threadcount' aldagaian, zehaztu behar da.

C.2. IRK puntu-finkoa

Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren inplementazioa, <https://github.com/mikelehu/IRK-FixedPoint> helbidean eskuragarri dago. Bi modutara exekutatu daiteke: puntu-finkoaren iterazio estandarra edo puntu-finkoaren iterazio partizionatua.

Code/Readme.txt fitxategian, IRK puntu-finkoaren inplementazioaren argibide guztiak eman ditugu. Integrazioaren funtzio nagusiaren deia honakoa da:

```
IRKFP ( t0 , t1 , h, &method , &u, &system , &options , &the stat ) ;
```

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutatzeke adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu. Bestalde, inplementazioa Mathematicatik exekutatzeke prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu.

Inplementazio honetan, ez dugu *BLAS* liburutegia erabili.

C.3. IRK Newton

Newton sinplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren inplementazioa, <https://github.com/mikelehu/IRK-Newton> helbidean eskuragarri dago. Bi inplementazio exekutatu daitezke: Newton sinplifikatuaren inplementazio eraginkorra eta artikuluan, proposatutako Newton iterazioan oinarritutako IRK inplementazio berria.

Code/Readme.txt fitxategian, IRK puntu-finkoaren inplementazioaren argibide guztiak eman ditugu. Integrazioaren funtzio nagusiaren deia honakoa da:

```
IRKNEWTON ( t0 , t1 , h, &method , &u, &system , &options , &the stat ) ;
```

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutatzeke adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu. Bestalde, inplementazioa Mathematicatik exekutatzeke prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu.

Inplementazio honetan, *BLAS* eta *LAPACK* liburutegiak erabili ditugu.

C.4. IRK Eguzki-sistema

Kepler-en fluxuaren aldagai aldaketan oinarritutako IRK metodoaren inplementazioa, <https://github.com/mikelehu/IRK-SolarSystem> helbidean eskuragarri dago.

Code/Readme.txt fitxategian, inplementazioaren argibide guztiak eman ditugu. Integrazioaren funtzio nagusiaren deia honakoa da:

```
IRKFPSS ( t0 , t1 , h, &method , &u, &system , &options , &the stat );
```

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutzeko adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu. Bestalde, inplementazioa Mathematicatik exekutzeko prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu.

C.5. Konposizio-Splitting metodoak

Newton sinplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren inplementazioa, <https://github.com/mikelehu/Composition> helbidean eskuragarri dago. Bi inplementazio exekutatu daitezke: konposizio metodoak (CO1035) eta splitting metodoak (ABAH1064).

Code/Readme.txt fitxategian, konposizio/splitting inplementazioaren argibide guztiak eman ditugu. Integrazioaren funtzio nagusiaren deia honakoa da:

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

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutzeko adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu. Bestalde, inplementazioa Mathematicatik exekutzeko prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu.

Eguzki-sistemari egokitutako Splitting metodoak aplikatzeko, Kepler fluxuaren inplementazio berri bat garatu dugu. Inplementazio honen C kodean, 'Kepler.c' fitxategian aurkitzen da.

D. Eranskina

Zerrendak

Irudien Zerrenda

| | |
|--------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2.1. Pendulu arrunta | 21 |
| 2.2. Kolokazio metodoen simetria | 26 |
| 2.3. Atalen hasieraketa: interpolazioa | 28 |
| 3.1. Pendulu bikoitz arrunta | 41 |
| 3.2. Pendulu bikoitz zurruna | 42 |
| 3.3. Planeten tamainen proportzioak | 46 |
| 4.1. Koma-higikorreko zenbakien multzoa | 54 |
| 4.2. 32-biteko koma-higikorra | 54 |
| 4.3. Batuketaren biribiltze errorea | 60 |
| 5.1. IRK metodoaren geratze irizpidea | 73 |
| 5.2. Energia erroreak jatorria | 82 |
| 5.3. Energia diferentzien banaketa | 83 |
| 5.4. Energia erroreak batezbesteko eta desbideratze estandarra | 85 |
| 5.5. Newton sinplifikatuaren iterazioa: energia errorea | 85 |
| 5.6. Kokapen erroreak | 86 |
| 5.7. Erroreak estimazioa | 88 |
| 6.1. Biribiltze erroreak azterketa | 118 |
| 7.1. RKIK metodoaren integrazio eskema orokorra | 125 |
| 7.2. Puntu-finkoaren eraginkortasun grafikoak | 129 |
| 7.3. RKIK metodoen eraginkortasun konparaketa (FCN) | 130 |
| 7.4. RKIK eraginkortasun konparaketa (CPU Time) | 131 |
| 7.5. Metodo sinplektikoen eraginkortasun grafikoa (FCN) | 132 |
| 7.6. Metodo sinplektikoen eraginkortasun grafikoa (CPU Time) | 132 |
| 7.7. Energia errorea | 134 |
| 7.8. Kokapen eta abiadura erroreak | 135 |
| 7.9. Erdi-ardatz nagusiaren eta eszentrikotasunaren errorea | 136 |
| 7.10. Momentu angeluarra | 137 |

| | |
|-----------------------------------------------------------------------|-----|
| 8.1. Atalen hasieraketa (Kepler fluxuaren aldagai aldaketa) | 156 |
| 8.2. Asteroideak | 158 |
| A.1. Intel Xeon konputagailuak | 173 |
| A.2. Memoria hierarkia | 174 |
| A.3. Memoria konpartitutako sistemak | 176 |
| A.4. Memoria banatutako sistemak | 176 |
| A.5. UMA sistemak | 177 |
| A.6. NUMA sistemak | 177 |
| A.7. OpenMP programazio modeloa | 180 |
| A.8. Matrize bakanak | 185 |

Taulen Zerrenda

| | | |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2.1. | CO1035 konposizio metodoa | 33 |
| 2.2. | $CSABA_4$ splitting metodoa | 37 |
| 2.3. | $ABAH1064$ splitting metodoa | 38 |
| 2.4. | Integrazio metodo sinplektikoen laburpena | 38 |
| 3.1. | Eguzki-sistemaren parametro nagusienak | 46 |
| 3.2. | Kanpo-planeten masak | 48 |
| 3.3. | Kanpoko planeten problemaren hasierako balioak | 49 |
| 3.4. | Planeten GM balioak | 50 |
| 3.5. | 9-planeten hasierako balioak | 51 |
| 3.6. | Eguzki-sistemaren planeta, Ilargia eta asteroide nagusien parametroak | 52 |
| 3.7. | Ilargiaren Lurrarekiko hasierako balioak | 52 |
| 4.1. | IEEE-754 koma-higikorreko formatuak | 55 |
| 5.1. | Puntu-fikoaren iterazio portzentaia eta iterazio kopuruaren batezbestekoa | 83 |
| 6.1. | Inplementazio estandarraren eta gure implementazioaren konparaketa | 104 |
| 6.2. | Puntu-finkoa versus Newton iterazioa | 117 |
| A.1. | BLAS liburutegiaren eraginkortasuna | 184 |

Bibliografia

- [1] *Intel Math Kernel Library. Reference Manual*. Intel, 2015.
- [2] *The openmp api specification for parallel programming*, 2017.
- [3] Sverre Aarseth, Christopher Tout, and Rosemary Mardling. *The Cambridge n-body lectures*, volume 760. Springer, 2008.
- [4] Edward Anderson, Zhaojun Bai, Christian Bischof, L Susan Blackford, James Demmel, Jack Dongarra, Jeremy Du Croz, Anne Greenbaum, Sven Hammarling, Alan McKenney, et al. *LAPACK Users' guide*. SIAM, 1999.
- [5] KV Vladimirov Andrey. *Test-driving intel xeon phi coprocessors with a basic n-body simulation*. *Coflax International*, 3:2, 2013.
- [6] Mikel Antonana, Joseba Makazaga, and Ander Murua. *Efficient implementation of symplectic implicit runge-kutta schemes with simplified newton iterations*. *arXiv preprint arXiv:1703.07697*, 2017.
- [7] Mikel Antonana, Joseba Makazaga, and Ander Murua. *Reducing and monitoring round-off error propagation for symplectic implicit runge-kutta schemes*. *Numerical Algorithms*, pages 1–20, 2017.
- [8] Harald Atmanspacher and Sabine Maasen. *Reproducibility: Principles, Problems, Practices, and Prospects*. John Wiley & Sons, 2016.
- [9] Marc Baboulin, Alfredo Buttari, Jack Dongarra, Jakub Kurzak, Julie Langou, Julien Langou, Piotr Luszczek, and Stanimire Tomov. *Accelerating scientific computations with mixed precision algorithms*. *Computer Physics Communications*, 180(12):2526 – 2533, 2009.
- [10] Pavan Balaji. *Programming models for parallel computing*. MIT Press, 2015.
- [11] Josh Barnes and Piet Hut. *A hierarchical $O(n \log n)$ force-calculation algorithm*. *nature*, 324(6096):446–449, 1986.

- [12] André Berger. *A brief history of the astronomical theories of paleoclimates*. Springer, 2012.
- [13] Gregory Beylkin and Kristian Sandberg. [Ode solvers using band-limited approximations](#). *Journal of Computational Physics*, 265:156–171, 2014.
- [14] Jeff Bezanson, Alan Edelman, Stefan Karpinski, and Viral B Shah. [Julia: A fresh approach to numerical computing](#). *SIAM*, 2014.
- [15] Theodore A Bickart. [An efficient solution process for implicit runge–kutta methods](#). *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 14(6):1022–1027, 1977.
- [16] Sergio Blanes, Fernando Casas, Ariadna Farres, Jacques Laskar, Joseba Makazaga, and Ander Murua. [New families of symplectic splitting methods for numerical integration in dynamical astronomy](#). *Applied Numerical Mathematics*, 68:58–72, 2013.
- [17] Ben K Bradley, Brandon A Jones, Gregory Beylkin, Kristian Sandberg, and Penina Axelrad. [Bandlimited implicit runge–kutta integration for astrodynamics](#). *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 119(2):143–168, 2014.
- [18] Dirk Brouwer. [On the accumulation of errors in numerical integration](#). *The Astronomical Journal*, 46:149–153, 1937.
- [19] Luigi Brugnano, Gianluca Frasca Caccia, and Felice Iavernaro. [Efficient implementation of gauss collocation and hamiltonian boundary value methods](#). *Numerical Algorithms*, 65(3):633–650, 2014.
- [20] VA Brumberg. [Celestial mechanics: Past, present, future](#). *Solar System Research*, 47(5):347–358, 2013.
- [21] Kevin Burrage. [Parallel methods for initial value problems](#). *Applied Numerical Mathematics*, 11(1-3):5–25, 1993.
- [22] John C Butcher. [On the implementation of implicit runge-kutta methods](#). *BIT Numerical Mathematics*, 16(3):237–240, 1976.
- [23] John Charles Butcher. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. Second edition, Wiley, 2008.
- [24] J Carrier, Leslie Greengard, and Vladimir Rokhlin. [A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations](#). *SIAM journal on scientific and statistical computing*, 9(4):669–686, 1988.

- [25] John E Chambers. [A hybrid symplectic integrator that permits close encounters between massive bodies](#). *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 304(4):793–799, 1999.
- [26] Philippe Chartier, Ander Murua, and Jesus Maria Sanz-Serna. [Higher-order averaging, formal series and numerical integration i: B-series](#). *Foundations of Computational Mathematics*, 10(6):695–727, 2010.
- [27] Martyn Corden. [Differences in floating-point arithmetic between intel® xeon® processors and the intel® xeon phi™ coprocessor x100 product family](#), 2013.
- [28] Robert M Corless and Nicolas Fillion. [A graduate introduction to numerical methods](#). *AMC*, 10:12, 2013.
- [29] John Danby. Fundamentals of celestial mechanics. *Richmond: Willman-Bell,| c1992, 2nd ed.*, 1, 1992.
- [30] Theodorus Jozef Dekker. [A floating-point technique for extending the available precision](#). *Numerische Mathematik*, 18(3):224–242, 1971.
- [31] DumitruN. Deleanu. [Fast detection of chaotic or regular behavior of double pendulum system: application of the fast norm vector indicator method](#).
- [32] Jack Dongarra, Stanimire Tomov, Piotr Luszczek, Jakub Kurzak, Mark Gates, Ichitaro Yamazaki, Hartwig Anzt, Azzam Haidar, and Ahmad Abdelfattah. [With extreme computing, the rules have changed](#). *Computing in Science & Engineering*, 19(3):52–62, 2017.
- [33] Michael Driscoll, Evangelos Georganas, Penporn Koanantakool, Edgar Solomonik, and Katherine Yelick. [A communication-optimal n-body algorithm for direct interactions](#). In *Parallel & Distributed Processing (IPDPS), 2013 IEEE 27th International Symposium on*, IEEE, 2013, pages 1075–1084.
- [34] Martin J Duncan, Harold F Levison, and Man Hoi Lee. [A multiple time step symplectic algorithm for integrating close encounters](#). *The Astronomical Journal*, 116(4):2067, 1998.
- [35] Siegfried Eggl and Rudolph Dvorak. [An introduction to common numerical integration codes used in dynamical astronomy](#). In *Dynamics of small solar system bodies and exoplanets*, Springer, 2010, pages 431–480.
- [36] Daniel C Fabrycky. [Non-keplerian dynamics](#). *arXiv preprint arXiv:1006.3834*, 2010.

- [37] Ariadna Farrés, Jacques Laskar, Sergio Blanes, Fernando Casas, Joseba Makazaga, and Ander Murua. [High precision symplectic integrators for the solar system](#). *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 116(2): 141–174, 2013.
- [38] Kang Feng and Mengzhao Qin. [Symplectic geometric algorithms for hamiltonian systems](#). Springer, 2010.
- [39] A. Fienga. [International workshop in astronomy and dynamics](#). In *INPOP planetary ephemerides: from 2013 to 2015.*, Observatoire de Paris, 2015.
- [40] A Fienga, H Manche, J Laskar, and Mickael Gastineau. [Inpop06: a new numerical planetary ephemeris](#). *Astronomy & Astrophysics*, 477(1):315–327, 2008.
- [41] William M Folkner, James G Williams, Dale H Boggs, Ryan S Park, and Petr Kuchynka. [The planetary and lunar ephemerides de430 and de431](#). *Interplanet. Netw. Prog. Rep.*, 196:1–81, 2014.
- [42] Laurent Fousse, Guillaume Hanrot, Vincent Lefèvre, Patrick Pélissier, and Paul Zimmermann. [Mpfr: A multiple-precision binary floating-point library with correct rounding](#). *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 33(2):13, 2007.
- [43] Daan Frenkel and Berend Smit. [Understanding molecular simulation: from algorithms to applications](#), volume 1. Academic press, 2001.
- [44] Toshio Fukushima. [Reduction of round-off error in symplectic integrators](#). *The Astronomical Journal*, 121(3):1768, 2001.
- [45] Toshio Fukushima. [Numerical comparison of two-body regularizations](#). *The Astronomical Journal*, 133(6):2815, 2007.
- [46] Martin J Gander and Ernst Hairer. [Analysis for parareal algorithms applied to hamiltonian differential equations](#). *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 259:2–13, 2014.
- [47] GNU. [libquadmath v 1.3](#), 2008.
- [48] Stefan Goedecker and Adolfo Hoisie. [Performance optimization of numerically intensive codes](#). SIAM, 2001.
- [49] KR Grazier, WINewman, James M Hyman, Philip W Sharp, and David J Goldstein. [Achieving brouwer’s law with high-order stormer multistep methods](#). *ANZIAM Journal*, 46:786–804, 2005.

- [50] E. Hairer and C. Lubich. [Numerical solution of ordinary differential equations](#). In *The Princeton Companion to Applied Mathematics*, Nicholas J. Higham, Mark R. Dennis, Paul Glendinning, Paul A. Martin, Fadil Santosa, and Jared Tanner, editors, Princeton University Press, Princeton, NJ, USA, 2015, pages 293–305.
- [51] E Hairer, SPNørsett, and G Wanner. [Solving ordinary differential equations I: nonstiff problems, vol. 8](#). 1993.
- [52] E Hairer and G Wanner. [Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems](#). Springer, Berlin, 1996.
- [53] E. Hairer and G. Wanner. [Initial value problems](#). In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, springer, 2015, pages 691–694.
- [54] Ernst Hairer, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. [Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations](#), volume 31. Springer Science & Business Media, 2006.
- [55] Ernst Hairer, Robert I McLachlan, and Alain Razakarivony. [Achieving brouwer’s law with implicit runge–kutta methods](#). *BIT Numerical Mathematics*, 48(2):231–243, 2008.
- [56] Wayne B Hayes. [Is the outer solar system chaotic?](#) *Nature Physics*, 3(10): 689–691, 2007.
- [57] David M Hernandez and Edmund Bertschinger. [Symplectic integration for the collisional gravitational n-body problem](#). *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 452(2):1934–1944, 2015.
- [58] Yozo Hida, Xiaoye S Li, and David H Bailey. [Algorithms for quad-double precision floating point arithmetic](#). In *Computer Arithmetic, 2001. Proceedings. 15th IEEE Symposium on*, IEEE, 2001, pages 155–162.
- [59] Nicholas J Higham. [Accuracy and stability of numerical algorithms](#). Siam, 2002.
- [60] Nicholas J Higham. [Programming languages: An applied mathematics view](#). 2015.
- [61] Leslie Hogben. [Handbook of linear algebra](#). Chapman and Hall/CRC, 2013.
- [62] IEEE. [Ieee standard for floating-point arithmetic](#). 2008.

- [63] Tomoaki Ishiyama, Keigo Nitadori, and Junichiro Makino. [4.45 pflops astrophysical n-body simulation on k computer: the gravitational trillion-body problem](#). In *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, IEEE Computer Society Press, 2012, page 5.
- [64] Takashi Ito and Kiyotaka Tanikawa. Trends in 20th century celestial mechanics. *Publ. Natl. Astron. Obs. Jpn*, 9:55–112, 2007.
- [65] Laurent O. Jay. Preconditioning of implicit runge-kutta methods. *Scalable Computing: Practice and Experience*, 10, 2009.
- [66] Hugo Jiménez-Pérez and Jacques Laskar. [A time-parallel algorithm for almost integrable hamiltonian systems](#). *arXiv preprint arXiv:1106.3694*, 2011.
- [67] MP Calvo JM Sanz-Serna. *Numerical Hamiltonian problems*. Chapman and Hall, 1994.
- [68] Mioara Joldeş, Olivier Marty, Jean-Michel Muller, and Valentina Popescu. [Arithmetic algorithms for extended precision using floating-point expansions](#). *IEEE Transactions on Computers*, 65(4):1197–1210, 2016.
- [69] W Kahan. Further remarks on reducing truncation errors. *Communications of the ACM*, 8(1):40, 1965.
- [70] George H Kaplan, John A Bangert, Agnes Fienga, William Folkner, Catherine Hohenkerk, Marina Lukashova, Elena V Pitjeva, P Kenneth Seidelmann, Michael Sveshnikov, Sean Urban, et al. [Historical reflections on the work of iau commission 4 \(ephemerides\)](#). *arXiv preprint arXiv:1511.01546*, 2015.
- [71] KV Kholoshevnikov and ED Kuznetsov. [Review of the works on the orbital evolution of solar system major planets](#). *Solar System Research*, 41(4): 265–300, 2007.
- [72] Sergei A Klioner. [Basic celestial mechanics](#). *arXiv preprint arXiv:1609.00915*, 2016.
- [73] D Knuth. The art of computer programming: Vol 2/sem numerical algorithms, 1969.
- [74] Sergei Kopeikin, Michael Efroimsky, and George Kaplan. [Relativistic celestial mechanics of the solar system](#). John Wiley & Sons, 2011.

- [75] Fred T Krogh. [An adams guy does the runge-kutta](#). 1997.
- [76] Anne Kvaerno and Ben Leimkuhler. [A time-reversible, regularized, switching integrator for the n-body problem](#). *SIAM Journal on Scientific Computing*, 22(3):1016–1035, 2000.
- [77] MP Laburta. [Construction of starting algorithms for the rk-gauss methods](#). *Journal of computational and applied mathematics*, 90(2):239–261, 1998.
- [78] Jacques Laskar. [The limits of earth orbital calculations for geological time-scale use](#). *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 357(1757):1735–1759, 1999.
- [79] Jacques Laskar. [Numerical challenges in long term integrations of the solar system](#). In *Computer Arithmetic (ARITH), 2015 IEEE 22nd Symposium on*, IEEE, 2015, pages 104–104.
- [80] Jacques Laskar, Agnes Fienga, Mickael Gastineau, and Herve Manche. [La2010: a new orbital solution for the long-term motion of the earth](#). *Astronomy & Astrophysics*, 532:A89, 2011.
- [81] Jacques Laskar and Mickael Gastineau. [Existence of collisional trajectories of mercury, mars and venus with the earth](#). *Nature*, 459(7248):817–819, 2009.
- [82] Jacques Laskar and Philippe Robutel. [High order symplectic integrators for perturbed hamiltonian systems](#). *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 80(1):39–62, 2001.
- [83] Benedict Leimkuhler and Sebastian Reich. *Simulating hamiltonian dynamics*, volume 14. Cambridge University Press, 2004.
- [84] Harold F Levison and Martin J Duncan. [The long-term dynamical behavior of short-period comets](#). *Icarus*, 108(1):18–36, 1994.
- [85] Werner Liniger and Ralph A Willoughby. [Efficient integration methods for stiff systems of ordinary differential equations](#). *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 7(1):47–66, 1970.
- [86] Sanz Serna J.M. Diaz J.C Lopez Marcos, M.A. Are gauss-legendre methods useful in molecular dynamics ? *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 1996.

- [87] Piotr Luszczek, Jakub Kurzak, and Jack Dongarra. [Looking back at dense linear algebra software](#). *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 74(7):2548–2560, 2014.
- [88] Robert I McLachlan. [Composition methods in the presence of small parameters](#). *BIT Numerical Mathematics*, 35(2):258–268, 1995.
- [89] Robert I McLachlan and Pau Atela. [The accuracy of symplectic integrators](#). *Nonlinearity*, 5(2):541, 1992.
- [90] A Morbidelli. [Modern integrations of solar system dynamics](#). *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 30(1):89–112, 2002.
- [91] Jean-Michel Muller, Nicolas Brisebarre, Florent De Dinechin, Claude-Pierre Jeannerod, Vincent Lefevre, Guillaume Melquiond, Nathalie Revol, Damien Stehlé, and Serge Torres. *Handbook of floating-point arithmetic*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [92] Nobelprize.org. [The nobel prize in chemistry 2013](#), May 2014.
- [93] Hans Olsson and Gustaf Sderlind. [The approximate runge-kutta computational process](#). *BIT Numerical Mathematics*, 40(2):351–373, 2000.
- [94] Michael L Overton. *Numerical computing with IEEE floating point arithmetic*. Siam, 2001.
- [95] Peter Pacheco. *An introduction to parallel programming*. Elsevier, 2011.
- [96] EV Pitjeva and NP Pitjev. [Development of planetary ephemerides epm and their applications](#). *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 119(3-4):237–256, 2014.
- [97] Kevin P. Rauch and M. Holman. [Dynamical chaos in the wisdom-holman integrator: origins and solutions](#). 1998.
- [98] Yousef Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, 2003.
- [99] Prasenjit Saha, Joachim Stadel, and Scott Tremaine. [A parallel integration method for solar system dynamics](#). *arXiv preprint astro-ph/9605016*, 1996.
- [100] Prasenjit Saha and Scott Tremaine. [Symplectic integrators for solar system dynamics](#). *The Astronomical Journal*, 104:1633–1640, 1992.
- [101] Prasenjit Saha and Scott Tremaine. [Long-term planetary integration with individual time steps](#). *arXiv preprint astro-ph/9403057*, 1994.

- [102] Jesús María Sanz-Serna. [Symplectic integrators for hamiltonian problems: an overview](#). *Acta numerica*, 1:243–286, 1992.
- [103] JM. Sanz-Serna. [Hamiltonian systems](#). In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, springer, 2015, pages 617–624.
- [104] JM. Sanz-Serna. [Symplectic methods](#). In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, springer, 2015, pages 1451–1458.
- [105] PW Sharp. [Long initial value test problems from simulations of the solar system](#). Technical report, Department of Mathematics, The University of Auckland, New Zealand, 2001.
- [106] Mark Sofroniou and Giulia Spaletta. [Derivation of symmetric composition constants for symmetric integrators](#). *Optimization Methods and Software*, 20(4-5):597–613, 2005.
- [107] Pat H Sterbenz. *Floating-point computation*. Prentice Hall, 1973.
- [108] Gerald J Sussman and Jack Wisdom. [Chaotic evolution of the solar system](#). Technical report, DTIC Document, 1992.
- [109] Robert van de Geijn Victor Eijkhout and Edmond Chow. *Introduction to High Performance Scientific Computing*. lulu.com, 2011.
- [110] Greg Wilson, DA Aruliah, C Titus Brown, Neil P Chue Hong, Matt Davis, Richard T Guy, Steven HD Haddock, Kathryn D Huff, Ian M Mitchell, Mark D Plumbley, et al. [Best practices for scientific computing](#). *PLoS Biol*, 12(1):e1001745, 2014.
- [111] Jack Wisdom. [Symplectic correctors for canonical heliocentric n-body maps](#). *The Astronomical Journal*, 131(4):2294, 2006.
- [112] Jack Wisdom and David M Hernandez. [A fast and accurate universal kepler solver without stumpff series](#). *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 453(3):3015–3023, 2015.
- [113] Jack Wisdom and Matthew Holman. [Symplectic maps for the n-body problem](#). *The Astronomical Journal*, 102:1528–1538, 1991.
- [114] Wolfram Research, Inc. [Mathematica](#).

- [115] Dexuan Xie. A new numerical algorithm for efficiently implementing implicit runge-kutta methods. *Department of Mathematical Sciences. University of Wisconsin, Milwaukee, Wisconsin, USA, 2009.*
- [116] Haruo Yoshida. [Recent progress in the theory and application of symplectic integrators](#). In *Qualitative and Quantitative Behaviour of Planetary Systems*, Springer, 1993, pages 27–43.