

Integratzaile simetrikodun 10 ordenako konposizio metodo simetrikoen bilaketa

(Search of 10-order symmetric composition methods of symmetric integrators)

Elisabete Alberdi Celaya¹, Joseba Makazaga Odria², Ander Murua Uria²

¹ Matematika Aplikatua, Bilboko Ingeniaritza Eskola, UPV/EHU

² Konputazio Zientzia eta Adimen Artifiziala, Informatika Fakultatea, UPV/EHU

elisabete.alberdi@ehu.eus

DOI: 10.1387/ekaia.19341

Jasoa: 2018-02-21

Onartua: 2018-05-17

Laburpena: Konposizio metodoek, Ekuazio Diferentzial Arruntak (EDAak) ebatzeko oinarrizko zenbakizko integrazio-metodo bat modu egokian konposatuz emaitzak hobetzeko aukera ematen dute. Lan honetan erreparatuko diegu bigarren ordenako zehaztasuna duen oinarrizko integratzaile simetriko bat erabiliz lortzen den konposizio metodo simetrikoei. Simetrien erabilerak, ordena-baldintzak sinplifikatzeaz gain, ezezagunen kopurua gutxitzea eragiten du. Asko dira honelako metodoen koefizienteak biltzen jardun duten autoreak. Honela, ezaguna da aipaturiko eran lortutako 8 ordenako metodorik onenak 17 atal dituela, eta 10 ordenako eta 31, 33 eta 35 ataleko metodo oso onak ere lortu direla. Lan honetan 10 ordenako eta 31 ataleko konposizio metodo simetrikoak lortzeko sortu ditugun bi teknika aurkezten dira.

Hitz gakoak: konposizio metodoak, konposizio simetrikoa, metodo simetrikoa.

Abstract: Composition methods are useful when solving Ordinary Differential Equations (ODEs) as they can be used to increase the order of accuracy of a given basic numerical integration scheme. We will focus on symmetric composition methods involving some basic second order symmetric integrator with different step sizes. The introduction of symmetries into these methods simplifies the order conditions and reduces the number of unknowns. Several authors have worked in the search of the coefficients of these type of methods: the best method of order 8 has 17 stages, 10-order methods of 31, 33 and 35 stages have been also found. In this work two techniques that we have built to obtain 10-order symmetric composition methods of symmetric integrators of $s = 31$ stages are explored.

Keywords: composition methods, symmetric composition, symmetric method.

1. SARRERA

Konposizio metodoak tresna ahaltsoak dira [1], [2], [3], ekuazio diferentzial arrunten (EDAen) sistemen hasierako baliodun problemen zenbakizko ebazpenerako algoritmoak eraikitzeko. Zertan datzan azaltzeko, koefiziente konstantedun EDA linealetara mugatuko gara, hau da,

$$y'(t) = Ay(t), \quad y(0) = y_0, \quad (1)$$

non A matrize karratua den (erreal zein konplexua). Ondoren datozen azalpenak EDA sistema lineala den kasuetara mugatzen ez diren arren, kasu orokorrean aritzeak funtsezkoak ez diren xehetasun teknikoetan nahastera eramango gintuzke.

Hasierako baliodun problema lineal horren soluzio zehatza $y(t) = \exp(tA)y_0$ da, non $\exp(tA)$ matrize karratua, tA matrize karratuaren esponentziala den. Matrize esponentziala serie moduan defini daiteke, hots

$$\exp(tA) = I + tA + \frac{t^2}{2}A^2 + \frac{t^3}{6}A^3 + \dots + \frac{t^n}{n!}A^n + \dots$$

Matrize esponentziala, A matrizearen forma diagonalaz (edo kasurik orokorrean, bere forma kanonikoaz) baliatuz kalkula daiteke. Hala ere, hau ez da modu eraginkorra matrize handietarako, bereziki, matrize esponentziala bera baizik $\exp(tA)y_0$ (matrize esponentzialaren y_0 bektorearekiko eragina) kalkulatzeko nahikoa denean. Matrize esponentzialaren hurbilpenak kalkulatzeko, nahikoa da $h \in \mathbb{R}$ txiki bakoitzerako $\exp(hA)$ hurbiltzen duen $\Phi(h)$ matrizea lortzeko gai izatea. Horrela, $t \in \mathbb{R}$ jakin baterako $\exp(tA)$ hurbiltzeko, n nahikoa handirako hauxe izango dugu:

$$\exp(tA) = \exp(hA)^n \approx \Phi(h)^n, \quad \text{non } h = \frac{t}{n} \text{ den.}$$

Matrize esponentzialaren hurbilpen gisa, adibidez,

$$\Phi(h) = \left(I - \frac{h}{2}A\right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2}A\right) \quad (2)$$

har daiteke. Ikus daiteke, kasu honetan $\Phi(h) \approx \exp(hA)$ hurbilpenaren ordena 2 dela, alegia, hurbilpen erroreak ($|h|$ nahikoa txikitarako) $\mathcal{O}(h^2)$ moduko goi-bornea onartzen duela. Hori adierazteko, ohikoa da honako modu honetan idaztea

$$\Phi(h) - \exp(hA) = \mathcal{O}(h^2). \quad (3)$$

Bestalde, erraz egiazta daiteke

$$\Phi(-h) = \Phi(h)^{-1} \tag{4}$$

betetzen dela, $\exp(-h A) = \exp(h A)^{-1}$ betetzen den bezala.

Horretan oinarrituz, ordena altuagoko hurbilpenak lor daitezke konposizioa erabiliz, adibidez,

$$\psi(h) = \Phi(\gamma_1 h) \Phi(\gamma_2 h) \Phi(\gamma_1 h), \tag{5}$$

non (γ_1, γ_2) koefiziente-bikotea, honako ekuazio-sistema honen soluzio erreala bakarra den

$$2\gamma_1 + \gamma_2 = 1, \quad 2\gamma_1^3 + \gamma_2^3 = 0. \tag{6}$$

Kasu horretan, (5) metodoa, (6) ekuazioak betetzen dituen koefizienteetarako, 4 ordenakoa dela ikus daiteke, hau da,

$$\Psi(h) - \exp(h A) = \mathcal{O}(h^4). \tag{7}$$

Hain zuzen, alde batetik, oinarritzko metodoa, $\Phi(h)$, simetrikoa izateagatik $\Phi(h) = \exp(h A + h^3 B + \mathcal{O}(h^5))$ formakoa dela frogatu daiteke. Bestalde, $\Phi(\gamma_i h)$ non $i = 1, 2$, (5) adierazpenean ordezkatu eta (6) kontutuan hartuz $\Psi(h)$ garatu, eta garapen hau $\exp(h A)$ -ren garapenarekin konparatuz, (7) betetzen dela ikus daiteke.

Are gehiago, (5)-(6) konposizioa 4 ordenakoa izateko (hau da, (7) betetzeko) ez da beharrezkoa $\Phi(h)$ oinarritzko hurbilpena (2) moduan definituta izatea; nahikoa da $\Phi(h)$ oinarritzko hurbilpenak (3) eta (4) betetzea (hau da, 2 ordenako metodo simetrikoa izatea).

Adibidez, demagun A matrizeak honako egitura hau daukala

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B \\ -B & 0 \end{pmatrix}, \tag{8}$$

non B matrize karratua den. Ikus daiteke (8) matrizeari dagokion $\exp(h A)$ matrizearen honako $\Phi(h)$ hurbilpen honek

$$\Phi(h) = \begin{pmatrix} I & \frac{h}{2} B \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ -hB & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \frac{h}{2} B \\ 0 & I \end{pmatrix}, \tag{9}$$

(3) eta (4) baldintzak betetzen dituela. Hau da, (8) matrizeari dagokion $\exp(h A)$ esponentzialaren (9) hurbilpena 2 ordenakoa eta simetrikoa da, eta oinarritzko $\Phi(h)$ hurbilpen horren (5) konposizio gisa lortutako $\Psi(h) \approx \exp(h A)$ hurbilpena 4 ordenakoa da.

Oinarrizko $\Phi(h)$ metodoak (3) eta (4) baldintzak betetzen baditu (hain zuzen, (2) edo (9) betetzen dituen $\Phi(h)$ metodoak betetzen dituenak), ordena altuagoko hurbilpenak lortzeko honako konposizio hauek erabil daitezke,

$$\Psi(h) = \Phi(h\gamma_1)\Phi(h\gamma_2) \cdots \Phi(h\gamma_s), \quad (10)$$

$\gamma_1, \dots, \gamma_s$ parametro errealak modu egokian aukeratuz. s konposizio eginez lortzen den era honetako matrize esponenzialaren hurbilpen metodoa s ataleko konposizio metodoa dela esaten da.

1.1. Integratzaile simetrikodun konposizio metodo simetrikoak

Horrela, ohikoa da (10) konposizio gisa lortutako metodo berriari ere simetrikoa izan dadin eskatzea (hau da, $\Psi(-h) = \Psi(h)^{-1}$ bete dadin), eta horretarako nahikoa da γ_i koefizienteen segidak honako simetria baldintza hauek betetzea,

$$\gamma_i = \gamma_{s-i+1}, \quad i = 1, \dots, s. \quad (11)$$

Lan honetan 2 ordenako metodo simetriko baten konposizio simetrikokoan zentratuko gara, hau da, (11) baldintzak betetzen dituen $\gamma_1, \dots, \gamma_s$ koefiziente segidetarako definitutako (10) moduko konposizio metodoetan. Ezaguna da [4] simetria baldintzek konposizio metodoaren ordena bikoitia izatea ziurtatzen dutela.

Hain zuzen, 10 ordenako konposizio metodo simetrikoak bete beharreko ordena-baldintzak honako hamaseiak dira [5], [6]:

$$\sum_{k=1}^s \gamma_k = 1, \quad (12)$$

$$\sum_{k=1}^s \gamma_k^3 = 0. \quad (13)$$

$$\sum_{k=1}^s \gamma_k^5 = 0, \quad \sum_{k=1}^s \gamma_k^3 \left(\sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \right) = 0, \quad (14)$$

$$\sum_{k=1}^s \gamma_k^7 = 0, \quad \sum_{k=1}^s \gamma_k^5 \left(\sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \right)^2 = 0, \quad (15)$$

$$\sum_{k=1}^s \gamma_k^3 \sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \sum_{m=1}^{k'} \gamma_m^3 = 0, \quad \sum_{k=1}^s \gamma_k^3 \left(\sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \right)^4 = 0,$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=1}^s \gamma_k^9 &= 0, & \sum_{k=1}^s \gamma_k^7 \left(\sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \right)^2 &= 0, \\
 \sum_{k=1}^s \gamma_k^5 \sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \sum_{m=1}^{k'} \gamma_m^3 &= 0, & \sum_{k=1}^s \gamma_k^3 \sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \sum_{m=1}^{k'} \gamma_m^5 &= 0, \\
 \sum_{k=1}^s \gamma_k^3 \left(\sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \right)^2 \sum_{m=1}^{k'} \gamma_m^3 \sum_{n=1}^{m'} \gamma_n &= 0, & \sum_{k=1}^s \gamma_k^5 \left(\sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \right)^4 &= 0, \\
 \sum_{k=1}^s \gamma_k^3 \left(\sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \right)^3 \sum_{m=1}^{k'} \gamma_m^3 &= 0, & \sum_{k=1}^s \gamma_k^3 \left(\sum_{l=1}^{k'} \gamma_l \right)^6 &= 0.
 \end{aligned} \tag{16}$$

Komatxo bat erabiliz adierazi diren batukarien esanahia hau da:

$$\sum_{i=1}^{k'} a_i := \sum_{i=1}^{k-1} a_i + \frac{a_k}{2}.$$

2 ordenako konposizio metodo simetrikoak (12) baldintza betetzen du; 4 ordenakoak (12) eta (13) baldintzak betetzen ditu; 6 ordenakoak (12), (13) eta (14) baldintzak; 8 ordenakoak, (12)-(15) baldintzak; eta 10 ordenakoak, (12)-(16) baldintzak.

Jakinaenez [4], konposizio simetriko batek $p = 2k$ zehaztasun ordena izateko, $p \leq 10$ izanik, atal kopuru minimoa $2^k - 1$ da. Atal kopuru minimoa duen konposizio metodoan, parametro kopurua eta murrizketa aljebraikoen kopurua bera da, eta Newton-en metodoa erabil daiteke soluzioak lortzeko, soluzioen hasierako hurbilpen egokiak izanez gero. Gure kasuan, 10 ordenako eta 31 ataleko metodo simetrikoen kasuan, milaka soluzio daude, eta horien artean, irizpideren baten arabera onena edo onenak hartzen dira. Hainbat autorek erabilitako irizpidea

$$\|\mathbf{x}\|_1 = |\gamma_1| + \dots + |\gamma_s|$$

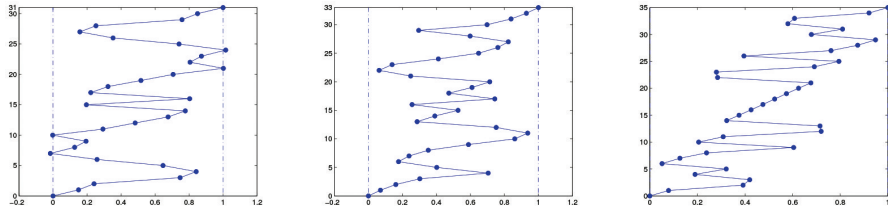
minimizatzean datza, hau da, tarte osoan ibilitako distantzia minimizatzea. Guk ere irizpide horri jarraituko diogu.

Konposizio metodo simetrikoak 8 ordena lortzeko gutxienez $s = 15$ atal izan behar ditu. Askatu beharreko sistemak ehunka soluzio baditu ere, 8 ordenako metodorik onenak [1], [7], [8] lanetan aurkitu dira. $s = 17$ atal dituen metodoaren kasuan geratzen den parametro askeak metodo hobea ($\|\mathbf{x}\|_1$ minimizatzearen zentzuan) lortzea ahalbidetzen du [1], eta 8 orde-

nako eta $s = 17$ ataleko metodorik onena [9] lanean aurkezten da. 10 ordenako metodoen atal kopuru minimoa $s = 31$ da. 10 ordenako eta $s = 31$ eta $s = 33$ ataletako lehendabiziko metodoak [9] lanean aurkeztu ziren. Lan honi 10 ordenako eta $s = 33$ ataleko metodo hobe batek [4] jarraitu zion. Ondoren, Sofroniou eta Spaletta izan dira 10 ordenako eta $s = 31$, $s = 33$ eta $s = 35$ ataletako metodo oso onak aurkitu dituztenak [10]. 10 ordenako eta $s = 31$ ataleko metodoen artean, beraiek proposatutakoa da egun ezagutzen den onena. Esan bezala, 10 ordenako metodoak (12)-(16) baldintzak betetzen ditu eta bistan da ekuazio hauen konplexutasuna. Sofroniouk eta Spalettak konputagailu ahaltzuak erabili zituzten metodo hau lortzeko: Ausazko 106 bektore sortu zituzten: osagaiak $(0, 2/3)$ edo $(-2/3, 0)$ tartean zituztenak, koefizienteen metatzeak $[0, 1]$ tartean egonik, eta tinkotasun baldintza ((12) baldintza) betez. Ausazko bektore bakoitzarekin gehienez 10^4 iterazio egin zituzten (minimizazio lokaleko algoritmo baten iterazioak). Ordena-baldintza eskalatuak erabili zituzten, baldintzok honako konstante honetaz biderkatuz: $\tilde{\kappa} = 10^8$. Zortzi prozesatzailek jardun zuten aldi berean lanean, haietako bakoitza 10^6 bektoreek osatutako hazi osoarekin. 10 ordenako eta $s = 31$ ataleko metodo honen koefizienteak hauek dira:

$$\begin{aligned}
 \gamma_1 = \gamma_{31} &= 0.14998070054317051502516939497857, \\
 \gamma_2 = \gamma_{30} &= 0.091208635101489291996105121514462, \\
 \gamma_3 = \gamma_{29} &= 0.50623124887796194535266557555255, \\
 \gamma_4 = \gamma_{28} &= 0.094789715925889154094231454089204, \\
 \gamma_5 = \gamma_{27} &= -0.19520875735034504160990960439871, \\
 \gamma_6 = \gamma_{26} &= -0.38816256756251756192331854792644, \\
 \gamma_7 = \gamma_{25} &= -0.27450555650873276528931810649505, \\
 \gamma_8 = \gamma_{24} &= 0.14264675556451861069659069043321, \\
 \gamma_9 = \gamma_{23} &= 0.067102518966825349346877396037809, \\
 \gamma_{10} = \gamma_{22} &= -0.19643186370792190448674783323248, \\
 \gamma_{11} = \gamma_{21} &= 0.29602854892160888804740587728740, \\
 \gamma_{12} = \gamma_{20} &= 0.18917810251470701571585847859316, \\
 \gamma_{13} = \gamma_{19} &= 0.19394700133244324371285167850479, \\
 \gamma_{14} = \gamma_{18} &= 0.10120067580762238380456506324802, \\
 \gamma_{15} = \gamma_{17} &= -0.58186926782264021140090352527182, \\
 \gamma_{16} &= 0.60772821879184217383575377417062.
 \end{aligned} \tag{17}$$

1. irudian Sofroniouren eta Spalettaren 10 ordenako metodoen koefizienteen metatze grafikoak egin dira. Bertan (c_i, i) bikoteak irudikatu dira, $i = 1, 2, \dots, s$ balioetarako, eta $c_i = \sum_{j=1}^i \gamma_j$ izanik.



1. irudia. Sofroniuren eta Spalettaren 10 ordenako metodoen koefizienteen metatze grafikoak: $s = 31$ (ezkerrean), $s = 33$ (erdian) eta $s = 35$ (eskuinean).

Lan honetan, bigarren ordenako metodo simetrikoan oinarritutako 10 ordenako eta 31 ataleko metodoen koefizienteen bilaketari erreparatuko diogu. Koefiziente hauek aurkitzeko zenbait teknika definitzea eta probatzea izango da helburua.

2. HASIERAKO PUNTUAK

Hemen, gure helburua, aipatutako metodoak sortzeko teknikak diseinatzea eta berauek probatzea da. Sofroniok eta Spalettak lortutako 10 ordenako eta 31 ataleko metodoa edota hobeak lortzea, guk diseinatutako teknikez baliatuz.

Hamasei ekuaziotako eta hamasei ezezagunetako sistema betetzen duten puntuen artean, norma euklidearra minimizatzen dutenak interesatzen zaizkigu bereziki. Horiek aurkitzeko abiapuntu gisa, (12)-(16) sistemako batukari bakarreko bost ekuazioak betetzen dituzten hainbat puntu aukeratu ditugu. Bost ekuazio hauei ordena-baldintza sinpleak deituko diegu, berauek baitira konplexutasunaren aldetik ekuaziorik sinpleenak, eta gainera, $\mathbf{x} = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ ezezagunak bost ekuazio hauek betetzen baditu, bere edozein permutaziook ere beteko ditu. Baldintza sinpleen azpisistema hori betetzen duten $\mathbf{x} = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ puntuen multzotik, zehazki bost osagai ezberdin dituzten puntuak aukeratu ditugu, hain zuzen, multzo horretan $\|\mathbf{x}\|_2$ lokalki minimizatzen duten puntuak direlako.

Hamasei osagai izanik, bost osagai ezberdin dituzten eskema ezberdinak daude. Horietatik, 12 γ_i koefiziente berdina eta gainontzeko 4 γ_i koefiziente ezberdin dituen eskemak $\|\mathbf{x}\|_2$ balioa globalki minimizatzen du. Eskema hau (12, 1, 1, 1, 1) denotatuko dugu. Puntu hauek aurki daitezke, berdinak diren 12 koefizienteen artean 11 berdintza ezarriz eta bost ordena-baldintza sinpleek osatutako ekuazio-sistema ebatziz. 11 berdintzek eta bost ordena-baldintza sinpleek osatzen duten 16 ekuaziotako sistemak soluzio erreal bat dauka. Soluzio erreal honetan permutazioak aplikatuz, bost ordena-baldintza sinpleak betetzen dituzten eta globalki $\|\mathbf{x}\|_2$ minimiza-

tzen duten $15!/12! = 2.730$ puntu lortzen dira. Baina puntu hauek behar beste koefiziente negatibo ez dituztenez, zaila da beren inguruan gainontzeko 11 ordena-baldintzak beteko dituzten puntuak aurkitzea. Bost osagai ezberdin dituzten 16 osagaitako puntuen gainontzeko eskemek, hala nola (11, 2, 1, 1, 1), (10, 3, 1, 1, 1), (10, 2, 2, 1, 1), ... eskemek, $\|\mathbf{x}\|_2$ balioa globalki minimizatu ez arren, lokalki minimizatzea lortzen dute, balio hau nahiko txikia izanik. Baina berriro, zaila da beren inguruan gainontzeko 11 ordena-baldintzak betetzen dituzten puntuak aurkitzea.

Sofroniouren eta Spalettaren (17) soluzioa (9, 4, 1, 1, 1) eskema duen minimo lokal batetik hurbil dagoenez, eskema honi jarraituz $\|\mathbf{x}\|_2$ lokalki minimizatzen duten puntuak aukeratu ditugu. Berriro 16 ekuazio-ekuazio-sistema (11 berdintzak eta bost ordena-baldintza sinplek osatua) ebati dugu eta emaitza erreal bat lortu dugu. Emaitza erreal honetan permutazioak aplikatuz, $15!/(9! \cdot 4!) = 150.150$ puntu lortu ditugu. Berauetatik, 21.871 puntu dira koefizienteen metatzeak $[0, 1]$ tartean dituztenak eta berarek erabili ditugu hasierako puntu gisa.

3. LEHENENGO TEKNIKA

Atal honetan 10 ordenako eta $s = 31$ ataleko konposizio metodo simetrikoak sortzeko diseinatu dugun lehenengo teknika aurkeztuko dugu. (11) adierazpeneko berdintzak honela geratzen dira $s = 31$ kasuan:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \gamma_{31}, & \gamma_5 &= \gamma_{27}, & \gamma_9 &= \gamma_{23}, & \gamma_{13} &= \gamma_{19}, \\ \gamma_2 &= \gamma_{30}, & \gamma_6 &= \gamma_{26}, & \gamma_{10} &= \gamma_{22}, & \gamma_{14} &= \gamma_{18}, \\ \gamma_3 &= \gamma_{29}, & \gamma_7 &= \gamma_{25}, & \gamma_{11} &= \gamma_{21}, & \gamma_{15} &= \gamma_{17}, \\ \gamma_4 &= \gamma_{28}, & \gamma_8 &= \gamma_{24}, & \gamma_{12} &= \gamma_{20}. \end{aligned} \quad (18)$$

Helburua da (12)-(16) 16 ordena-baldintzak beteko dituzten $\gamma_i, i = 1, \dots, 16$ koefizienteak aurkitzea. $\mathbf{x} = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ denotatuko dugu bila gabiltzan ezezaguna. Ez dago parametro askerik $s = 31$ kasuan.

Eremu bornatu batean lan egingo dugu, (12) baldintza (tinkotasun baldintza) beste honekin ordezkatzuz:

$$\sum_{k=1}^s \gamma_k^2 = 16. \quad (19)$$

(19) baldintzak esan nahi du, $\mathbf{y} = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 31}$ puntuak 0 zentrudun eta 4 erradiodun esfera batean daudela. Esferaren erradio gisa edozein aukera liteke, baina biribiltze-erroreen eragina ezberdina izango da aukeratutako erradioaren arabera; dagokion matrize jakobiarraren baldintzapen zenbakian islatzen delarik eragin hori. Hain zuzen, baldintzapen zenbaki horiek

minimizatze aldera aukeratu dugu 4 erradioa. Kontuan hartuz (18) adierazpeneko simetria-baldintzak, esferan egotea haxe bilakatzen da:

$$\sum_{k=1}^{15} 2\gamma_k^2 + \gamma_{16}^2 = 16 \Leftrightarrow \sum_{k=1}^{15} \gamma_k^2 + \frac{\gamma_{16}^2}{2} - 8 = 0. \quad (20)$$

(12)-(16) sistemaren soluzioen, eta (13)-(16) eta (20) sistemaren soluzioen artean korrespondentzia unibokoa dago $\sum \gamma_i \neq 0$ denean. Guk askatuko dugun sistema (20) eta (13)-(16) ekuazioek sortua izango da. Tinkotasun baldintzatik esferan egotearen baldintzara ((12)-tik (20)-ra), edota alderantziz, esferatik tinkotasun baldintzara pasatzeko, honako eragiketa hauek egitea aski da:

- Esferatik tinkotasun baldintzara pasatzeko: $\mathbf{y}_s = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 31}$ puntuak (20) eta (13)-(16) baldintzak betetzen baditu, $\mathbf{y}_c = (\tilde{\gamma}_i)_{i=1, \dots, 31}$ puntuak (12) eta (13)-(16) baldintzak beteko ditu,

$$\tilde{\gamma}_i = \frac{\gamma_i}{\lambda}, \quad \text{eta} \quad \lambda = \sum_{i=1}^{31} \gamma_i \quad \text{izanik.} \quad (21)$$

- Tinkotasun baldintzatik esferara pasatzeko: $\mathbf{z}_c = (\hat{\gamma}_i)_{i=1, \dots, 31}$ puntuak (12) eta (13)-(16) baldintzak betetzen baditu, $\mathbf{z}_s = (\tilde{\gamma}_i)_{i=1, \dots, 31}$ esferan dagoen honako puntu honek (13)-(16) baldintzak beteko ditu:

$$\mathbf{z}_s = \frac{(\mathbf{z}_c - \mathbf{c})}{\|\mathbf{z}_c - \mathbf{c}\|} \cdot R + \mathbf{c}, \quad (22)$$

\mathbf{c} esferaren zentroa izanik, gure kasuan $\mathbf{c} = \mathbf{0}$, eta erradioa $R = 4$ izanik. Beraz,

$$\tilde{\gamma}_i = \frac{\hat{\gamma}_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^s \hat{\gamma}_i^2}} \cdot 4, \quad i = 1, \dots, 31.$$

Bete beharreko (20) eta (13)-(16) baldintzek osatutako hamasei ekuaziozko sistema $F(\mathbf{x}) = 0$ bezala idatziko dugu. Helburua da sistema honen soluzioa izango den $\mathbf{x} = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ lortzea. Horretarako honako prozesu honi jarraituko diogu:

- Esferan dagoen $\mathbf{x}_0 = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ hasierako puntu bat izango dugu.
- $F(\mathbf{x})$ funtzioa $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ puntuaren inguruan partzialki linealizatuko dugu (3.1. atala).

- Hasierako puntu berriak lortuko dira (3.2. atala).
- Hasierako puntu berriei minimizazio lokala aplikatuko zaie (3.3. atala).
- Minimizazio lokalaren ostean $\|F(\mathbf{x})\|$ nahikoa txikia bada, Newton-en metodoa aplikatuz $F(\mathbf{x}) = 0$ sistemaren soluzioa aurkituko da.

3.1. Linealizazio partziala

Tinkotasun-baldintza esferan egotearekin ordezkaturaz, bost ordena-baldintza sinpleak hauek dira:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{15} \gamma_k^2 + \frac{\gamma_{16}^2}{2} - 8 = 0, \quad \sum_{k=1}^s \gamma_k^3 = 0, \quad \sum_{k=1}^s \gamma_k^5 = 0, \\ \sum_{k=1}^s \gamma_k^7 = 0, \quad \sum_{k=1}^s \gamma_k^9 = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

2. atalean zehaztutako baldintzak betetzen dituen $\mathbf{x}_0 = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ hasierako puntu bat izango dugu. Hau da: bost baldintza sinpleak betetzen ditu (23), (9, 4, 1, 1, 1) eskemari jarraitzen dio, norma euklidearra lokalki minimizatzen du eta koefizienteen metatzeak $[0, 1]$ tartean daude (hau da, $c_i \in [0, 1]$, $c_i = \sum_{j=1}^i \gamma_j$ izanik, $i = 1, 2, \dots, s$).

$F(\mathbf{x})$ funtzioa honela linealiza daiteke: $F(\mathbf{x}) \approx F(\mathbf{x}_0) + F'(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$. Matrizen jakobiarrak, $J_0 = F'(\mathbf{x}_0)$, balio singularren bidez deskonposatuko dugu:

$$J_0 = P \cdot D \cdot Q^T, \quad (24)$$

P eta Q matrize ortogonalak izanik, eta D matrize diagonalak.

Honako aldagai-aldaketa hau egingo dugu:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + Q\mathbf{z} \Rightarrow \mathbf{z} = Q^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0). \quad (25)$$

\mathbf{z} aldagaiaren menpeko funtzio berri bat definituko dugu:

$$R(\mathbf{z}) = P^T \cdot F(\mathbf{x}_0 + Q\mathbf{z}).$$

Funtzio honen deribatua hauxe da:

$$R'(\mathbf{z}) = P^T \cdot F'(\mathbf{x}_0 + Q\mathbf{z}) \cdot Q. \quad (26)$$

Gure helburua $F(\mathbf{x}) = 0$ egingo duen \mathbf{x} kalkulatzeko da. Edo gauza bera dena, $R(\mathbf{z}) = 0$ egingo duen \mathbf{z} kalkulatzeko da.

Honako hau daukagu (26) adierazpenean $\mathbf{z} = 0$ ordezkatur, jakobiarraren deskonposaketa (24) erabiliz, eta P eta Q matrizeen ortogonaltasuna kontuan izanik:

$$R'(0) = P^T \cdot \underbrace{F'(\mathbf{x}_0)}_{P \cdot D \cdot Q^T} \cdot Q = P^T \cdot P \cdot D \cdot Q^T \cdot Q - D \Rightarrow R'(0) = D. \quad (27)$$

Newton-en metodoa erabiliz honako hau lortzen da:

$$R(\mathbf{z}) \approx R(0) + R'(0) (\mathbf{z} - 0) = R(0) + D\mathbf{z}. \quad (28)$$

Eta (28) adierazpenetik, $R(\mathbf{z}) = 0$ ebaz daiteke:

$$\mathbf{z} \approx -D^{-1} \cdot R(0), \quad (29)$$

$R(0) = P^T \cdot F(\mathbf{x}_0)$ izanik. Eta \mathbf{z} -ren balioa (25) adierazpenean ordezkatur, $F(\mathbf{x}) \approx 0$ betetzen duen \mathbf{x} kalkula daiteke, $F(\mathbf{x})$ -ren linealizazioa $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ -ren ingurunean ona baldin bada.

3.2. Hasierako puntu berriak

\mathbf{x}_0 hasierako puntu bat emanik, hasierako puntu gehiago lortzeko prozesua honetan datza:

1. Linealizazioko parte esanguratsua zehaztu.
2. Linealizazioko parte ez-esanguratsua zehaztu.
3. Sortutako puntu berriak hasierako puntu izaera duen erabaki.

3.2.1. Linealizazioko parte esanguratsua

F funtzioaren linealizazioa azaldu da 4.1 atalean. Orokorrean gertatzen dena da D matrize diagonaleko balio batzuk oso txikiak direla, eta ondorioz, parte ez-lineala parte lineala baino esanguratsua bihurtzen dela, linealizazioak balioa galduz. Horregatik, linealizazioa aplikatuko den parte zehaztu beharra dago. $\mathbf{x}_0 = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ hasierako puntua emanik, linealizazioa aplikatuko zaien osagaiak identifikatzea da helburua. Puntu honentzat 16 ordena-baldintzen eta jakobiarraren balioak kalkulatu dira.

$$F_0 = F(\mathbf{x}_0), \quad (30)$$

$$J_0 = J(\mathbf{x}_0), \quad (31)$$

$F_0 = (F_{0,i})_{i=1, \dots, 16}$ bektorea eta $J_0 = (J_{0,i})_{i=1, \dots, 16}$ matrizea izanik.

Ondoren, J_0 jakobiarra deskonposatzen da balio singularrak erabilia (24); eta (25) aldagai aldaketa erabilia, \mathbf{z}_1 balioa lortzen da (29) adierazpenetik:

$$\mathbf{z}_1 = -D^{-1}R(0). \quad (32)$$

Era honetan $\mathbf{z}_1 = (z_{1,j})_{j=1, \dots, 16}$ lortzen da. Eta (25) aldagai aldaketa erabilia \mathbf{x}_1 kalkulatzeko da: $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + Q\mathbf{z}_1$. Linealizazioko osagai guztiak hartuko dira kontuan honako hau betetzen bada:

$$\|F(\mathbf{x}_1)\| < p_1 \cdot \|F(\mathbf{x}_0)\|, \quad (33)$$

p_1 erabaki beharreko konstante bat izanik ($p_1 \in (0, 1)$). (33) baldintzak esan nahi du, kalkulaturako \mathbf{x}_1 balioak \mathbf{x}_0 balioak baino hobeto betetzen dituela 16 ordena-baldintzak. Esan daiteke, \mathbf{x}_1 hasierako puntua \mathbf{x}_0 baino hobe dela.

(33) baldintza betetzen ez bada, ez dira kontsideratuko linealizazioko osagai guztiak. Hau da, \mathbf{x}_1 hasierako puntua ez da \mathbf{x}_0 baino hobe. Baina linealizazioa erabiliko diren osagaiak aukera daitezke, (33) baldintzaren antzekoa den beste bat erabilia. Linealizatuko den partea zehazteko honako pausoei jarraituko diegu (ikusi 2. irudia):

- a) Egin $i = 0$.
- b) Egin $\mathbf{z}_1(16 - i) = 0$. Hau da, $\mathbf{z}_1 = (z_{1,1}, z_{1,2}, \dots, z_{1,15}, 0)$. Honek esan nahi du 0 balioa jartzen dela \mathbf{z}_1 bektoreko $j = 16 - i + 1, \dots, 16$ posizioetan.
- c) Egin $i \leftarrow i + 1$.
- d) Berkalkulatu \mathbf{x}_1 (25) erabilia: $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + Q\mathbf{z}_1$.
- e) Ebaluatu $F(\mathbf{x}_1)$.
- f) Moduluak konparatu:

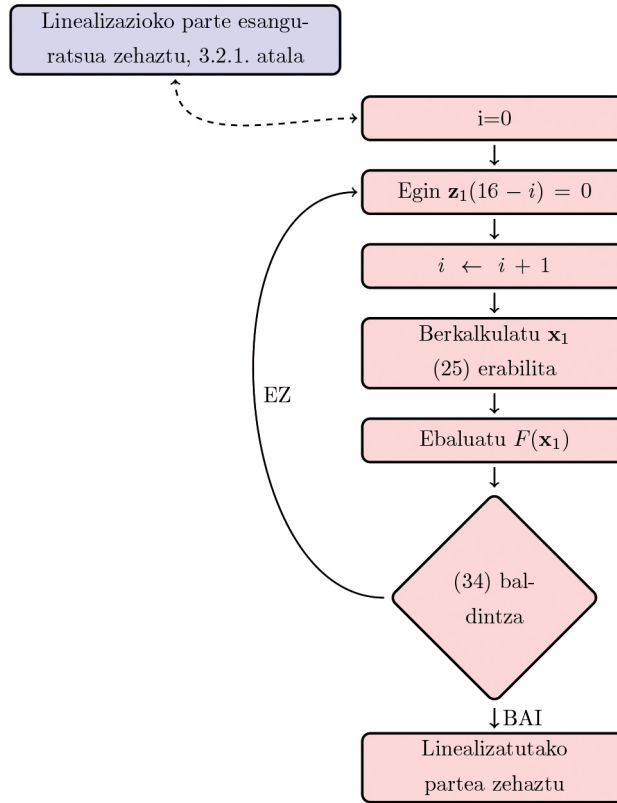
$$\|F(\mathbf{x}_1)_{j=1, \dots, 16-i}\| < p_1 \cdot \|F(\mathbf{x}_0)_{j=1, \dots, 16-i}\|. \quad (34)$$

- (g) (f) baldintza ez bada betetzen, (b) pausora itzuli.

Prozesu honen bidez linealizatuko den zatia zehazten da eta \mathbf{z}_1 -eko gaintzeko osagaietan 0 balioa ezarriko da. Hau da, linealizatuko diren osagaiak $j = 1, \dots, 16 - i$ dira eta gaintzeko osagaiak ($j = 16 - i + 1, \dots, 16$) 0 izango dira.

$$\mathbf{z}_{1,\text{lin}} = (z_{1,j}), \quad j = 1, \dots, 16 - i, \quad (35)$$

$$\mathbf{z}_{1,\text{zero}} = (0)_j, \quad j = 16 - i + 1, \dots, 16. \quad (36)$$



2. irudia. Linealizazioko parte esanguratsua zehazteko prozesua.

3.2.2. Linealizazioko parte ez-esanguratsua

\mathbf{z}_1 puntuan zeroak jarri diren posizioetan balioak ausaz kokatzea izango da hurrengo pausoa ($z_{1,j}$ posizioak, non $j = 16 - i + 1, \dots, 16$). Osagai hauek $(-1, 1)$ tartean ausaz aukeratuko dira. Izan bedi $\mathbf{z}_{1,random}$ ausaz beteko den \mathbf{z}_1 -en partea. Behin ausazko osagaiak ezarri ostean, $\mathbf{z}_{1,random}$ honako hau betetzeko eran eskalatuko da:

$$\|\mathbf{z}_{1,random}\| = \|\mathbf{z}_{1,lin}\| \cdot p_2, \quad (37)$$

p_2 zehaztu beharreko parametroa izanik. Azkenik, \mathbf{z}_1 bektore osoa, honako hau da: $\mathbf{z}_1 = [\mathbf{z}_{1,lin}, \mathbf{z}_{1,random}]$.

3.2.3. Sortutako puntu berriak hasierako puntu izaera duen erabaki

Momentuz, linealizazioko parte esanguratsua zehaztu dugu eta parte ez-esanguratsua 4.2.2 atalean azaldutakoaren arabera osatu da. Era honetan osatu den bektorea, hau da, $\mathbf{z}_1 = [\mathbf{z}_{1,lin}, \mathbf{z}_{1,random}]$, $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + Q\mathbf{z}_1$ hasierako puntu berriak kalkulatzeko erabiliko da, honako baldintza hau betetzen denean:

$$\|R(\mathbf{z}_1)\| < p_3 \cdot \|R(0)\|, \quad (38)$$

p_3 zehaztu beharreko parametro bat izanik. Bakarrik (38) baldintza betetzen denean kalkulatu da hasierako $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + Q\mathbf{z}_1$ puntu berria. Bestela, berriro ere $\mathbf{z}_{1,random}$ ausazko parte ezarriko da, 4.2.2 atalean azaldu den moduan.

3.3. Hasierako puntu berriei minimizazio lokala aplikatu

Aurreko ataletan sortu den \mathbf{x}_1 hasierako puntu berria emanik, $F(\mathbf{x})$ minimizatzen duen puntua kalkulatu da. Honetarako MATLAB-eko «lsqnonlin» agindua erabili da era honetan definitu dugun funtzioa minimizatzeko:

$$M(\mathbf{x}_1) = \left[F(\mathbf{x}_1), k \cdot \left(\sum_{i=1}^{15} \gamma_i + \frac{\gamma_{16}}{2} - \sum_{i=1}^{15} \tilde{\gamma}_i + \frac{\tilde{\gamma}_{16}}{2} \right) \right]. \quad (39)$$

$\mathbf{x}_0 = (\tilde{\gamma})_{i=1, \dots, 16}$ hasierako puntua izanik, $\mathbf{x}_1 = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ prozesuari jarraituz sortu den hasierako puntu berria eta $k = 10^{-5}$. (39) adierazpeneko bigarren parteak esan nahi du, aurkitu nahi ditugun puntuek \mathbf{x}_0 puntuaren antzeko tamaina izatea nahi dugula. Azkenik, minimizazio lokalaren prozesutik lortutako puntu bakoitzetik abiatuz Newton-en metodoa $F(\mathbf{x}) = 0$ ekuazio-sistemarako aplikatuz, sistema horren soluzio bat lortzen da.

3.4. Lehenengo teknika aplikatuz lortutako emaitzak

Hasierako 21.871 puntuei lehenengo teknika aplikatu zaie parametro ezberdinak aukeratuz. Honela, $p_1 = 0,5$, $p_2 = 1$ eta $p_3 = 0,5$ parametroak aukeratuz eta beraietako bakoitzarekin 200 hasierako puntu berri sortuz, Sofronioux eta Spalettak lortutako (17) soluzioa lortu da, baina ez da soluzio berririk lortu.

4. BIGARREN TEKNIKA

Atal honetan 10 ordenako eta $s = 31$ ataleko konposizio metodo simetrikoak sortzeko bigarren teknika aurkeztuko dugu. (9, 4, 1, 1, 1) eskemari jarraitzen dioten hasierako 21.871 puntu ditugu. 16 ezezaguneko eta

15 baldintzako ekuazio-sistema osatuko dugu. 15 baldintzak koefizienteen arteko berdintzak edota ordena-baldintzak izango dira. Ezarritako 15 baldintzak betetzen dituzten puntuek kurba bat definitzen dute. Baldintza berri bat (berriro berdintza edota ordena-baldintza) definitu ahal izango den funtzio berri bat definituko dugu, test baldintza deituko duguna. Eta 15 baldintzek definitzen duten kurban barrena mugituz, test baldintza ea noiz betetzen den zehazteko balioko digun funtzio berri bat ere definituko dugu ((40) adierazpeneko f_{16} funtzioa, hain zuzen). 15 baldintzetako kurban egonik test baldintza betetzen duen puntu bat aurkitzen denean, 15 baldintzetako bat test baldintzagatik truka daiteke eta hasieran genituen 15 baldintzetatik 14 baldintza eta test baldintza betetzen dituen kurba aurkitu ahal izango da. Prozesuaren helburua izango da, 5 ordena-baldintza sinpleenak eta koefizienteen arteko 11 berdintza betetzen dituen puntu batetik abiatuz, 16 ordena-baldintzak betetzen dituen puntua (edo puntuak) aurkitzea, horretarako test baldintzan gainontzeko 11 ordena-baldintzak banan-banan txertatuz. Prozesu hau alderantzikagarria da, posible izanik berriro 15 baldintzak betetzen zituen kurba lortzea. Baldintza batzuetatik beste batzuetara igarotzeko prozesua C lengoaiari inplementatu da eta zenbait *MEX* funtzio erabili dira MATLAB-etik haiei deia egiteko.

Aipatutako 15 baldintzak (f_1 - f_{15}), test baldintza (g), eta beste bi osagai (f_{16} eta f_{18}) dituen hemezortzi osagaiko $\tilde{F} = (f_i)_{i=1, \dots, 18}$ funtzioa definitu dugu:

$$\begin{cases} f_1 = \rho_1, \\ f_i = \lambda_i \rho_i + (1 - \lambda_i) \sum_{j=1}^{16} (\alpha_{i,j} \gamma_j) - \alpha_{i,17}, & i = 2, \dots, 15, \\ f_{16} = (1 - \nu)(\beta \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) - (t - t_0)) + \nu((1 - t) \beta \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + tg(\mathbf{x})), \\ g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{15} \mu_i \rho_{i+1} + \sum_{i=1}^{16} (\xi_i \gamma_i) - \xi_{17}, \\ f_{18} = -2 \left(\frac{a_0}{R} \right)^2, \end{cases} \quad (40)$$

\mathbf{x}_0 hasierako puntu bat izanik. Helburua 16 ordena-baldintzak betetzen dituen \mathbf{x} puntua lortzea da. \tilde{F} funtzioko 17. osagaiari g ($f_{17} = g$) deitu diogu eta horixe da test funtzioa.

(40) adierazpeneko parametroak hauek dira:

- \mathbf{x} da kalkulatu behar den 16 osagaiko ezezaguna: $\mathbf{x} = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$.
- 0 zentrudun eta $R = 4$ erradiodun esferan egotearen baldintza ρ_1 da.
- ρ_i da i . ordena-baldintza, $i = 2, \dots, 16$.
- λ_i parametroak, $i = 2, \dots, 15$ izanik, 0 edo 1 balioak har ditzake.
- μ_i parametroak, $i = 1, \dots, 15$ izanik, 0 edo 1 balioak har ditzake.

- $\alpha_{i,j}$ parametroak, $i = 2, \dots, 15$ eta $j = 1, \dots, 17$ izanik, $-1, 0$ edo 1 balioak har ditzake.
- ξ_i parametroak, $i = 1, \dots, 17$ izanik, $-1, 0$ edo 1 balioak har ditzake.
- (40) adierazpeneko f_{18} funtzioa koefizienteen neurri bat da:

$$a_0 = \frac{2 \sum_{i=1}^{15} \gamma_i + \gamma_{16}}{2}. \quad (41)$$

Esferaren zentrua eta erradioa kontuan izanik 285 parametro ditu \tilde{F} funtzioak.

f_i funtzioak, $i = 2, \dots, 15$ izanik, eta g funtzioa erabiltzen dira ordena-baldintzak (ρ_i , $i = 2, \dots, 16$) edota γ_i koefizienteen arteko berdintzak ezartzeko. Aipaturiko funtzio hauetako bakoitzean ordena-baldintza bat edota bi koefizienteen arteko berdintza bat ezar daiteke bakarrik. λ_i , μ_i , $\alpha_{i,j}$ eta ξ_i parametroak erabiltzen dira ordena-baldintzak edota koefizienteen arteko berdintzak ezartzeko:

- λ_i eta μ_i parametroak erabiltzen dira ordena-baldintzak ezartzeko (1 erabiltzen da ordena-baldintza aktibatzeke eta 0 bestela). Ohartu parametro hauek ρ_i ordena-baldintzak biderkatzen dituztela.
- $\alpha_{i,j}$ eta ξ_i parametroak erabiltzen dira $\mathbf{x} = (\gamma_i)_{i=1, \dots, 16}$ ezezaguneko koefizienteen arteko berdintzak ezartzeko. Ohartu parametro hauek γ_i koefizienteak biderkatzen dituztela. Adibidez, f_4 ekuazioan $\gamma_2 = \gamma_{12}$ ezartzeko, honako hauek lirakeke parametroak: $\lambda_4 = 0$ (ρ_4 ordena-baldintza desaktibatzeke), $\alpha_{4,2} = 1$, $\alpha_{4,12} = -1$ (edo $\alpha_{4,2} = -1$, $\alpha_{4,12} = 1$), $\alpha_{4,j} = 0$, $j = 2, 3, \dots, 11, 13, \dots, 17$ balioetarako. Era berean, \tilde{F} funtzioko 17. osagaien berdintza bera ezartzeko honela aukeratu dira parametroak: $\xi_2 = 1$, $\xi_{12} = -1$ eta gainontzekoak $\xi_i = 0$ (edota $\xi_2 = -1$, $\xi_{12} = 1$ eta gainontzekoak $\xi_i = 0$).

\tilde{F} funtzioko lehenengo 15 osagaiak dira, daukagun puntuak betetzen dituen baldintzak (ordena-baldintzak edo koefizienteen arteko berdintzak). g funtzioan beste baldintza bat ezar daiteke, eta \tilde{F} funtzioko lehenengo 15 osagaietako baldintzak betetzen dituzten puntuetatik g funtzioan ezarritako baldintza ere betetzen duen puntua kalkula daiteke f_{16} funtzioa erabiliz.

Baldintza batzuk betetzen dituen puntu bat badaukagu, puntu honetatik baldintza bakarrean ezberdintzen den beste puntu bat kalkula daiteke, aldi bakoitzean \tilde{F} funtzioko 17. osagaien baldintza bat ezarriz. Honek esan nahi du, hasierako 15 ordena-baldintzak eta γ_i koefizienteen arteko berdintza bat betetzen dituen puntu bat badaukagu, 16 ordena-baldintzak betetzen dituen puntu bat lortzen saia gaitezkeela.

(40) adierazpeneko f_{16} funtzioak bi parte ditu. $(1 - \nu)$ terminoak biderkatzen duen batugaia hiperplano higikor bat da eta lehenengo 15 f_i osagaiek definitzen duten kurban barrena mugitzea ahalbidetzen du, g funtzioan ezarritako baldintza betetzen duen puntua aurkitu arte. β parametroa, mugitzen ari garen kurbarekiko paraleloa den 16 osagaiko bektore bat da. Kurban barrena ibilitako distantzia t parametroak neurtzen du. f_{16} -ko bigarren batugaia ν parametroak biderkatzen duena da eta, $\nu = 1$ denean eta $t = 0$ -tik $t = 1$ -era mugitu ostean, g funtzioan idatzitako baldintza betetzen duen puntua lortu dela adierazten du.

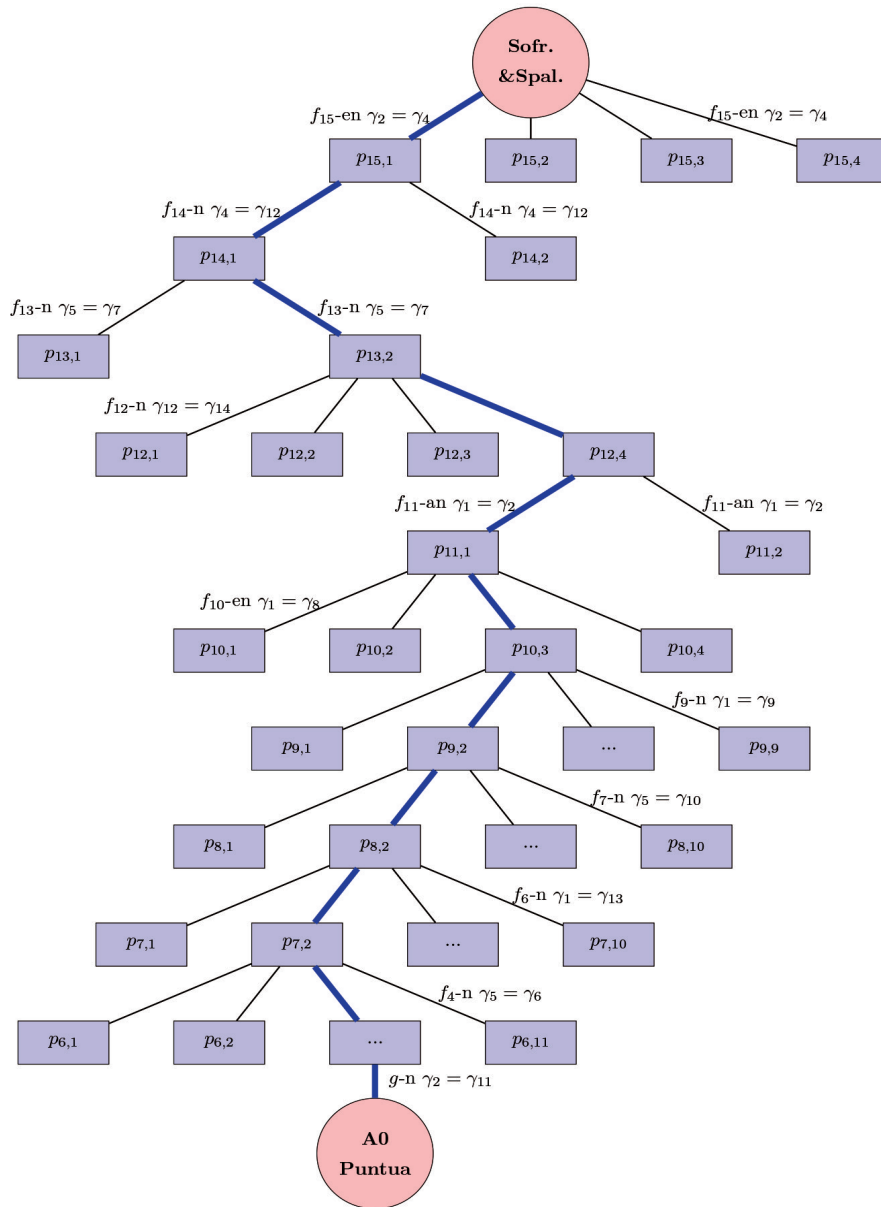
4.1. Bigarren teknika aplikatu aurretiko zenbait azterketa

Bigarren teknika erabiliz egin dugun lehenengo saiakera izan da ikus-tea ea lor dezakegun, Sofroniouk eta Spalettak lortu zuten (17) soluziotik abiatuz, 21.871 hasierako puntuetako bat. 3. irudian adierazi da Sofroniouren eta Spaletaren soluziotik abiatuz hasierako puntuetako bat lortzerainoko bidea. Prozesu honi jarraitu ostean, 21.871 hasierako puntuetako ondorengo lortu da:

$$\begin{aligned}
 \gamma_1 = \gamma_{31} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_2 = \gamma_{30} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_3 = \gamma_{29} &= 0.356988485581094, \\
 \gamma_4 = \gamma_{28} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_5 = \gamma_{27} &= -0.202029287967921, \\
 \gamma_6 = \gamma_{26} &= -0.202029287967921, \\
 \gamma_7 = \gamma_{25} &= -0.202029287967921, \\
 \gamma_8 = \gamma_{24} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_9 = \gamma_{23} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_{10} = \gamma_{22} &= -0.202029287967921, \\
 \gamma_{11} = \gamma_{21} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_{12} = \gamma_{20} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_{13} = \gamma_{19} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_{14} = \gamma_{18} &= 0.127878789499696, \\
 \gamma_{15} = \gamma_{17} &= -0.420682194566747, \\
 \gamma_{16} &= 0.441803510720145.
 \end{aligned} \tag{42}$$

(42) puntuak bost ordena-baldintza sinpleak betetzen ditu eta (9, 4, 1, 1, 1) eskemari jarraitzen dio. Bere γ_i koefizienteen artean dauden berdintzak honako hauek izanik:

$$\begin{cases} \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_4 = \gamma_8 = \gamma_9 = \gamma_{11} = \gamma_{12} = \gamma_{13} = \gamma_{14}, \\ \gamma_5 = \gamma_6 = \gamma_7 = \gamma_{10}. \end{cases} \tag{43}$$



3. irudia. Sofroniuren eta Spalettaren soluziorako bidea.

(42) puntuan γ_1 koefizientea 9 aldiz agertzen da, γ_5 koefizientea 4 aldiz, eta γ_3 , γ_{15} eta γ_{16} behin.

3. irudiaren inguruan zenbait ohar ematea komeni da.

- Sofronioug eta Spalettak lortutako (17) puntua **Sofr. & Spal.** deitu da 3. irudian (goiko aldean). Puntu honek 16 ordena-baldintzak betetzen ditu.
- 3. irudiko prozesua burutu ostean (42) puntua lortu da, «A0 Puntua» deitu da (irudiaren azpiko aldean). Puntu honek 5 ordena-baldintza sinpleei eta (9, 4, 1, 1, 1) eskemari jarraitzen die.
- 5 ordena-baldintza sinpleak $\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_5$ eta ρ_8 dira, eta f_1, f_2, f_3, f_5 eta f_8 funtzioetan aktibatzen dira, hurrenez hurren.
- Hamaika pauso eman behar dira **Sofr. & Spal.** puntutik abiatuz «A0 Puntua» lortzeko. Pauso hauetako bakoitzean ordena-baldintza bat galtzen da eta γ_i koefizienteen arteko berdintza bat irabazten da. Pauso bakoitzean zein berdintza zein funtziotan ezarri den adierazi da. Adibidez, lehenengo pausoa $\gamma_2 = \gamma_4$ berdintza ezarri da f_{15} funtzioan, ρ_{15} ordena-baldintza galduz. Era honetan, ρ_{1-14} eta ρ_{16} ordena-baldintzak eta $\gamma_2 = \gamma_4$ berdintza betetzen dituzten lau puntu lortu dira. Pauso bakoitzean lortu diren puntuak $p_{i,j}$ notazioa erabilia adierazi dira, i indizeak adierazten du zenbat ordena-baldintza betetzen diren, eta j indizeak pauso horretan lortutako puntu kopurua zenbatzen du.
- Bukaeraraino jarraitu ez diren adarrak ez dira azertu.
- Koefizienteen berdintzak ezartzeko ordenak garrantzia dauka. Hau da, prozesuko une batean berdintza bat lortu ez izateak ez du esan nahi beste une batean berdintza hori ezarri ezin denik.

3. irudiko prozesuari behetik gora ere jarraitu ahal izan diogu eta hori egin dugunean, Sofroniougren eta Spalettaren soluzioaz gain, 16 ordena-baldintzak betetzen dituen beste puntu hau ere aurkitu dugu:

$$\begin{aligned}
 \gamma_1 = \gamma_{31} &= 0.154573955942749, \\
 \gamma_2 = \gamma_{30} &= 0.084916229764423, \\
 \gamma_3 = \gamma_{29} &= 0.510725963869653, \\
 \gamma_4 = \gamma_{28} &= 0.096972445176156, \\
 \gamma_5 = \gamma_{27} &= -0.196353863540888, \\
 \gamma_6 = \gamma_{26} &= -0.391377961592734, \\
 \gamma_7 = \gamma_{25} &= -0.278523979360953, \\
 \gamma_8 = \gamma_{24} &= 0.144663174620264, \\
 \gamma_9 = \gamma_{23} &= 0.066283988663858, \\
 \gamma_{10} = \gamma_{22} &= -0.199028217131776, \\
 \gamma_{11} = \gamma_{21} &= 0.299036966780720, \\
 \gamma_{12} = \gamma_{20} &= 0.189133242229514, \\
 \gamma_{13} = \gamma_{19} &= 0.198214273246474, \\
 \gamma_{14} = \gamma_{18} &= 0.101260161817474, \\
 \gamma_{15} = \gamma_{17} &= -0.587096566393321, \\
 \gamma_{16} &= 0.613200371816777.
 \end{aligned}
 \tag{44}$$

Sofroniok eta Spalettak lortutako (17) soluzioak $\|\gamma_{sof}\|_1 = 7,5447$ betetzen du, eta (44) soluzio berriak aldiz $\|\gamma_{new}\|_1 = 7,6095$. Hau da, $[0, 1]$ tartean emaitza berriaren koefizienteek distantzia handiagoa egiten dute Sofroniok eta Spalettak lortutako emaitzak baino.

Helburua 21.871 hasierako puntu bakoitzarekin 3. irudian puntu bakkarekin egindako prozesua gorantza egitea da: 5 ordena-baldintza sinpleak betetzen dituzten puntuetatik abiatuz, 16 ordena-baldintzak betetzen dituzten puntuak lortzerainoko bidea eginez. Prozesu honek ordea denbora asko eramaten du, prozesuko pauso bakoitzean hainbat puntu sortzen baitira eta haietako bakoitzaren adarrei jarraitu beharko bailitzaieke. Gainera, kontuan izan behar da, adar hauetako batzuek ez gaituztela soluzioetara eramango eta komenigarria da horrelakoetan, prozesua berandu izan baino lehen moztea. Helburu honekin, 3. irudiko adarretan agertu diren ia puntu guztiak kalkulatu dira, puntu bakoitzaren honako hiru ezaugarriak aztertuz:

1. *Distantzia topologikoa*: kantitate honek bi punturen artean dauden tarteko puntu kopurua adierazten du, hau da, puntu bat zenbat tarteko puntuk bereizten duen beste puntu batetik. Puntu batetik abiatuz eta norantza bati jarraituz aurkitzen den lehenengo puntuaren distantzia topologikoa 1 da, bigarren puntuarena 2, e.a. Puntu bereitik beste norantzan abiatuz zenbaketa berari jarraitzen zaio. Hau da, puntu batetik abiatuz, norantza batean zein bestean lortzen den k . puntuaren distantzia topologikoa k da. Batzuetan, aztertu beharreko norantza biek kurba itxia definituko dute, ezarritako baldintza betetzen duten puntuak aurkitu ondoren berriro ere hasierako puntuan eroriz.
2. Koefizienteen neurri bat: (41) adierazpeneko $f_{18} = -2\left(\frac{a_0}{R}\right)^2$ funtzioa erabiliko da koefizienteen neurri gisa.
3. 16 ordena-baldintzen modulua: ordena-baldintzak (40) adierazpeneko $f_1 - f_{15}$ eta g funtzioetan aktiba daitezke. Baldintzok osatutako bektorearen $G(\mathbf{x}) = (f_1, f_2, \dots, f_{15}, g)$ modulua $\|G(\mathbf{x})\|$ aztertuko da.

Azterketa aurrera eramateko 3. irudian aztertu ez diren adarretako punturik gehienak kalkulatu dira. Gehienak esaten dugu, adar guztietako puntu guztiak lortzeko prozesua luzea baita eta 4., 5. eta 6. pausoetan lortu diren lehenengo 50 puntuekin jarraitu du prozesuak. Gainontzeko pausoetan puntu guztiak kontsideratu dira. Azterketa honetatik atera diren ondorioak dira:

- Distantzia topologikoari dagokionez, hasierako pausoetan distantzia topologikoak handiagoak dira; eta gero, txikiagoak. Horregatik,

lehenengo pausoan, lortzen diren puntu guztiak kontsideratuko dira eta 2-11 pausoetarako ezarriko da $(d_2, d_3, \dots, d_{11})$ distantzia topologikoen bektorea. Aldagai honi *distop* deituko diogu.

- Koefizienteen neurriari dagokionez, $[-0.20, -0.13]$ tartean dago soluzioa lortzea ahalbidetzen duten puntuen f_{18} balioa. Aldagai honi *[top, bottom]* deituko diogu.
- 16 ordena-baldintzen modulua ($\|G(\mathbf{x})\|$) ez da esanguratsua.
- Bestalde, egindako azterketatik ondorioztatzen da, oso koefiziente txikiak dituen puntu bat lortzen denean, zaila egiten dela puntu hori jarraituz emaitza onak lortzea. Horregatik, f_{18} baliorako behe limite bat jarriko dugu, *limit*, eta balio hori baino koefiziente txikiagoak dituen puntua lortzen denean, adarraren garapena bertan behera gertatuko da.

4.2. Bigarren teknika aplikatuz lortutako emaitzak

Ondoren, bigarren teknika aplikatuz lortu diren zenbait emaitza aurkezten dira. Hiru saiotako emaitzak aurkezten dira. Lehenengo saioan, (42) adierazpeneko \mathbf{x}_0 hasierako puntutik abiatu gara eta parametroen honako balio hauek aukeratu ditugu: *distop* = [7, 6, 5, 4, 3, 2, 1, 1, 1, 1], *bottom* = -0.1, *top* = -0.3 eta *limit* = -0.01. \mathbf{x}_0 hasierako puntuan 3. irudian adierazitako eran ezarriko ditugu koefizienteen arteko berdintzak. Parametro hauekin prozesuari jarraituz ez da izan posible Sofroniuren eta Spalettaren soluzioa (17) lortzea, ezta (44) soluzio berria lortzea ere. Egin beharreko 11 pausoetako 9.era iristean ez dugu izan punturik, eta prozesua bertan behera geratu da.

Ditugun 21.871 hasierako puntuetako bakoitzarekin prozesuari jarraitu diogu, parametroen honako balio hauek aukeratuz: *distop* = [7, 6, 5, 4, 4, 4, 2, 2, 2, 2], *bottom* = -0.1, *top* = -0.4 and *limit* = -0.01. Guztira 506 soluzio lortu dira, berauetatik 88 ezberdinak. Lortutako soluzioen $\|\gamma\|_1$ -ren tarte [7.8786, 10.5766] izan da. Sofroniuren eta Spalettaren soluzioa (17) eta gure soluzio berria (44) ez dira lortu prozesuaren baitan.

(42) adierazpeneko hasierako puntutik abiatuz 500 saiakera egin ditugu, parametroen honako balio hauek aukeratuz: *distop* = [7, 6, 5, 4, 4, 4, 2, 2, 2, 2], *bottom* = -0.1, *top* = -0.4 and *limit* = -0.01. Guztira 15 soluzio lortu dira, berauetatik 11 ezberdinak. Lortutako 11 soluzioetako zazpik $\|\gamma\|_1$ -ren balioa $\|\gamma_{new}\|_1 = 7.6095$ baino txikiagoa dute. Lortutako 11 soluzioetako hiruk $\|\gamma\|_1$ -ren balioa $\|\gamma_{sof}\|_1 = 7.5447$ baino txikiagoa dute. Hiru soluzio hauetatik abiatuz ordena-baldintzen minimizazio lokala burutuz, Sofroniuren eta Spalettaren soluzioa lortu da.

5. ONDORIOAK

Lan honetan bigarren ordenako integratzaile simetrikoak darabiltzaten n ordenako eta s ataleko konposizio metodo simetrikoak sortzeko bi teknika aurkeztu dira eta $n = 10$ eta $s = 31$ kasuan aplikatu dira. Teknika biak izan dira gai Sofroniouk eta Spalettak lortu zuten soluzioa lortzeko eta bigarren teknikak, beste soluzio batzuk ere eman dizkigu. Teknika hauek erabil daitezke ekuazio polinomikodun sistemak askatzeko (bereziki, ordena altuko zenbakizko integratzaileen sorreran ageri direnak askatzeko).

6. ESKER ONAK

Lan hau partzialki Eusko Jaurlaritzako Ikerketa Talde kontsolidatuen diruz (IT649-13 diru-laguntza) «Mathematical Modeling, Simulation, and Industrial Applications (M2SI)», eta Espainiako Ekonomia eta Lehiakortasuneko Ministeritzako MTM2013-46553-C3-2-P eta MTM2016-76329-R (AEI/FEDER, EU) proiektuen diruz lagundua izan da.

7. BIBLIOGRAFIA

- [1] MCLACHLAN R.I. 1995. «On the numerical integration of ordinary differential equations by symmetric composition methods». *SIAM J. Sci. Comput.*, 16, 151-168.
- [2] YOSHIDA H. 1990. «Construction of higher order symplectic integrators». *Phys. Lett. A*, 150, 262-268.
- [3] SUZUKI M. 1990. «Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and monte carlo simulations». *Phys. Lett. A*, 146, 319-323.
- [4] HAIRER E., LUBICH C. eta WANNER G. 2004. *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- [5] MURUA A. eta SANZ-SERNA J.M. 1999. «Order conditions for numerical integrators obtained by composing simpler integrators». *Philos. T. Roy. Soc. A*, 357, 1079-1100.
- [6] BLANES S., CASAS F. eta MURUA A. 2008. «Splitting and Composition Methods in the Numerical Integration of Differential Equations». *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl.*, 45, 89-145.
- [7] SUZUKI M. 1994. «Quantum monte carlo methods and general decomposition theory of exponential operators and symplectic integrators». *Phys. A*, 205, 65-79.
- [8] SUZUKI M. eta UMENO K. 1993. «Higher-order decomposition theory of exponential operators and its applications to QMC and nonlinear dynamics».

Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics VI, Springer Proceedings in Physics, 76, 74-86.

- [9] KAHAN W. eta LI R.C. 1997. «Composition constants for raising the orders of unconventional schemes for ordinary differential equations». Math. Comput., 66, 1089-1099.
- [10] SOFRONIOU M. eta SPALETTA G. 2005. «Derivation of symmetric composition constants for symmetric integrators». Optim. Method. Softw., 20, 597-613.