

Sobre la construcción de métodos Runge–Kutta–Nyström explícitos ajustados exponencialmente y de orden alto

J.M. Franco y I. Gómez

IUMA, Universidad de Zaragoza, CPS Ingenieros, Departamento de Matemática Aplicada,
María de Luna 3, 50018 Zaragoza, Spain.

Abstract

Se analiza la construcción de métodos Runge–Kutta–Nyström (RKN) explícitos de orden elevado y ajustados exponencialmente (EF) para la resolución numérica de sistemas diferenciales con soluciones oscilatorias. Partiendo de dos métodos EFRKN básicos de referencia que son simétricos y simplécticos estudiamos dos procedimientos para construir métodos explícitos de orden alto. El primer procedimiento se basa en métodos de composición y permite construir métodos ajustados exponencialmente que son simétricos y simplécticos. El segundo procedimiento se basa en combinar distintos métodos para construir pares encajados de métodos paralelos ajustados exponencialmente que permiten su implementación en códigos a paso variable sin coste computacional añadido. Los experimentos numéricos realizados muestran el comportamiento cualitativo y la eficiencia numérica de los métodos construidos cuando se comparan con algunos métodos clásicos de la literatura científica.

Keywords: Métodos Runge–Kutta–Nyström; ajuste exponencial; métodos simétricos y simplécticos; métodos paralelos; sistemas diferenciales oscilatorios.

AMS classification: 65L05; 65L06; 65Y05

1 Introducción

En el presente trabajo abordamos la construcción de métodos Runge–Kutta–Nyström ajustados exponencialmente (EFRKN) de tipo explícito para la integración numérica de sistemas diferenciales oscilatorios. Los sistemas diferenciales oscilatorios son frecuentes en diferentes campos de las ciencias aplicadas tales como mecánica celeste, astrofísica, química, electrónica y dinámica de partículas entre otras (ver [1]). El diseño y la construcción de métodos numéricos para resolver sistemas diferenciales que poseen soluciones

periódicas u oscilantes ha sido considerado por diversos autores (ver [2–24] y las referencias citadas en estos artículos). El objetivo de estos métodos es utilizar la información disponible sobre las soluciones de los problemas correspondientes para construir algoritmos más precisos y eficientes que los algoritmos de propósito general para este tipo de problemas. Un trabajo pionero en esta materia se debe a Gautschi [14] en el cual se introdujeron métodos lineales multipaso ajustados exponencialmente para resolver sistemas diferenciales con soluciones oscilatorias. En cambio, el desarrollo de métodos RK o RKN ajustados exponencialmente (EFRK o EFRKN) se ha realizado más recientemente. Un survey detallado incluyendo una extensiva bibliografía sobre esta materia puede encontrarse en el libro de Ixaru and Vanden Berghe [16]. Un camino para construir métodos EFRK o EFRKN consiste en seleccionar los coeficientes del método de manera que integre exactamente un conjunto de funciones linealmente independientes que se eligen dependiendo de la naturaleza de las soluciones de los sistemas diferenciales que se pretenden resolver. Algunos resultados sobre la existencia y unicidad de solución para los coeficientes de un método EFRK han sido obtenidos por Ozawa [17, 18], y diversos autores [5, 10, 12, 13, 17, 19, 22] han construido métodos con coeficientes variables que integran exactamente sistemas diferenciales de primer o segundo orden cuyas soluciones pertenecen al espacio lineal generado por el conjunto de funciones $\{1, t, \dots, t^k, \exp(\pm\lambda t), t \exp(\pm\lambda t), \dots, t^p \exp(\pm\lambda t)\}$, donde $\lambda \in \mathbb{C}$ es una frecuencia determinada. En la práctica, estos métodos integran los sistemas diferenciales oscilatorios con mayor precisión que los métodos clásicos basados en funciones polinómicas.

Por otra parte, diversos autores (ver [2–4, 13, 25–27]) han comprobado que los integradores simplécticos obtienen superioridad numérica cuando se aplican a la resolución numérica de sistemas Hamiltonianos sobre intervalos de tiempo largos. Por lo tanto, para la clase de sistemas Hamiltonianos oscilatorios sería apropiado considerar métodos simplécticos ajustados exponencialmente que conserven la estructura del flujo original. Ejemplos de tales métodos se pueden encontrar en [3, 5, 6, 7] en los cuales se han construido métodos EFRK simplécticos de tipo implícito con dos y tres etapas y órdenes algebraicos cuatro y seis. Además, en [3] se ha extendido la teoría clásica de métodos RK simplécticos al caso de métodos EFRK modificados, obteniendo condiciones suficientes sobre los coeficientes de estos métodos que implican simplectitud para sistemas Hamiltonianos generales, y en [5] se ha analizado la preservación de propiedades por parte de los métodos EFRK modificados para el caso de sistemas diferenciales de primer orden.

La aparición de los ordenadores paralelos o multiprocesador ha dado lugar en las últimas décadas a un estudio intensivo para diseñar y construir nuevos integradores numéricos que utilicen las posibilidades de estas máquinas (ver por ejemplo [28–38] y las referencias citadas en ellos). En el caso de métodos RKN se han investigado diversas

clases de métodos explícitos de tipo predictor-corrector (PC) basados en métodos correctores RKN [30–34, 38]. Un objetivo común en los métodos PC iterados en paralelo consiste en reducir, para un orden de aproximación dado, el número f -evaluaciones secuenciales por paso utilizando procesadores paralelos. La principal desventaja de estos métodos es el alto coste de comunicación requerido entre los distintos procesadores lo que da lugar a una reducción significativa en la eficiencia cuando se implementan sobre algunas arquitecturas paralelas o cuando las f -evaluaciones no requieren mucho coste. Para evitar este inconveniente una alternativa consiste en considerar distintos métodos RKN explícitos de s_i -etapas ($i = 1, \dots, k$) que se implementan sobre distintos procesadores y con las aproximaciones obtenidas se construye una combinación lineal de la forma

$$y_1 = \sum_{i=1}^k \omega_i y_1^{(i)}, \quad y_1' = \sum_{i=1}^k \omega_i y_1'^{(i)} \quad \text{donde} \quad \sum_{i=1}^k \omega_i = 1, \quad (1)$$

que proporciona las aproximaciones finales y_1 e y_1' en el instante $t_1 = t_0 + h$. Estos métodos no requieren de comunicación entre los distintos procesadores excepto en la última etapa en la cual los datos necesitan ser transmitidos para calcular y_1 e y_1' . Métodos de la forma (1) han sido considerados por diversos autores [28, 35, 37] y aquí se utilizarán para construir métodos EFRKN explícitos de orden alto.

El objetivo de este trabajo de investigación es la construcción de métodos EFRKN explícitos de orden alto que integren exactamente sistemas diferenciales de segundo orden cuyas soluciones pertenecen al espacio lineal generado por el conjunto de funciones $\{\exp(\lambda t), \exp(-\lambda t)\}$, $\lambda \in \mathbb{C}$, ó $\{\sin(\omega t), \cos(\omega t)\}$ cuando $\lambda = i\omega$, $\omega \in \mathbb{R}$. La construcción de métodos EFRKN explícitos de orden bajo (hasta 4 ó 5) basada en las condiciones de orden para este tipo de métodos ya ha sido realizada (ver por ejemplo [12] y [13]). Pero para orden alto (≥ 6), las condiciones de orden de este tipo de métodos son complicadas de obtener y su resolución aún es más complicada de realizar debido a que ahora los coeficientes del método son funciones de un parámetro $z = \lambda h \in \mathbb{C}$, donde h es el paso de integración. Aquí, presentamos dos procedimientos alternativos que permiten la construcción de métodos EFRKN explícitos de orden alto. La organización del trabajo es la siguiente: La sección 2 se dedica a presentar los conceptos y resultados básicos así como la notación que utilizaremos a lo largo del documento. En la sección 3 presentamos un procedimiento basado en métodos de composición que permite construir métodos EFRKN explícitos de orden alto que son simétricos y simplécticos. En la sección 4 presentamos otro procedimiento basado en combinar distintos métodos EFRKN explícitos para construir pares encajados de métodos EFRKN paralelos de orden alto que permiten su implementación en códigos a paso variable. En la sección 5 presentamos algunos experimentos numéricos con un sistema diferencial oscilatorio que muestran el comportamiento cualitativo y la eficiencia numérica de los nuevos métodos EFRKN cuando se comparan con

algunos métodos clásicos de la literatura científica. Finalmente, la sección 6 la dedicamos a presentar algunas conclusiones.

2 Conceptos y resultados básicos

Consideramos problemas de valor inicial (IVPs) para sistemas diferenciales no stiff de segundo orden de la forma

$$y''(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad y'(t_0) = y'_0, \quad (2)$$

suponiendo que $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ es suficientemente diferenciable, de manera que para todo $(t_0, y_0, y'_0) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$, el IVP (2) tiene solución única $y(t) = y(t; t_0, y_0, y'_0)$ definida en algún entorno de t_0 con orden de derivación tan alto como sea necesario.

Un método RKN modificado de s etapas para la resolución numérica del IVP (2) es un método de un paso definido por las ecuaciones

$$\begin{aligned} Y_i &= \alpha_i y_0 + \gamma_i c_i h y'_0 + h^2 \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_0 + c_j h, Y_j), \quad i = 1, \dots, s, \\ y_1 &= \alpha_{s+1} y_0 + \gamma_{s+1} h y'_0 + h^2 \sum_{i=1}^s \bar{b}_i f(t_0 + c_i h, Y_i), \\ y'_1 &= y'_0 + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_0 + c_i h, Y_i), \end{aligned} \quad (3)$$

donde h es el paso de integración, $Y_i \approx y(t_0 + c_i h)$ son las etapas internas del método e y_1 e y'_1 representan aproximaciones a $y(t_0 + h)$ e $y'(t_0 + h)$, respectivamente. Los parámetros reales c_i , b_i y \bar{b}_i , $i = 1, \dots, s$, se conocen como los nodos y los pesos del método y los parámetros α_i y γ_i se introducen (ver [12, 13]) para poder determinar métodos EFRKN explícitos. En el caso de métodos EFRKN los coeficientes α_i , γ_i , c_i , b_i , \bar{b}_i y a_{ij} dependen del paso de integración h . Además, cuando $\alpha_i = \gamma_i = 1$, $i = 1, \dots, s + 1$, el algoritmo (3) se reduce al de un método RKN. El método RKN modificado (3) se puede representar también mediante la tabla de coeficientes

$$\begin{array}{c|cc|c} \mathbf{c} & \alpha & \gamma & \mathbf{A} \\ \hline & \alpha_{s+1} & \gamma_{s+1} & \bar{\mathbf{b}}^T \\ \hline & & & \mathbf{b}^T \end{array} = \begin{array}{c|cc|cc} c_1 & \alpha_1 & \gamma_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & \alpha_s & \gamma_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & \alpha_{s+1} & \gamma_{s+1} & \bar{b}_1 & \cdots & \bar{b}_s \\ \hline & & & b_1 & \cdots & b_s \end{array} \quad (4)$$

Un método RKN modificado tiene *orden* algebraico p si p es el mayor entero positivo de manera que el error de truncación local satisface

$$LE := \begin{pmatrix} y_1 \\ y'_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y(t_0 + h) \\ y'(t_0 + h) \end{pmatrix} = \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad h \rightarrow 0, \quad (5)$$

y este error posee un desarrollo asintótico de la forma [41]

$$LE := \begin{pmatrix} y_1 \\ y'_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y(t_0 + h) \\ y'(t_0 + h) \end{pmatrix} = d_{p+1}(t_0) h^{p+1} + \dots + d_{N+1}(t_0) h^{N+1} + \mathcal{O}(h^{N+2}), \quad (6)$$

siempre que la ecuación diferencial de (2) sea suficientemente diferenciable. Además, el desarrollo asintótico (6) implica que el error global tiene un desarrollo asintótico [41]

$$\Delta_n := \begin{pmatrix} y_n \\ y'_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y(x) \\ y'(x) \end{pmatrix} = e_p(x) h^p + \dots + e_N(x) h^N + E_h(x) h^{N+1}, \quad (7)$$

donde $x = t_0 + nh$, $E_h(x)$ está acotado para $t_0 \leq x \leq t_{end}$ y $0 \leq h \leq h_0$, y los $e_j(x)$, $j \geq p$ son soluciones de los IVPs

$$e'_j(x) = L(x, y(x)) e_j(x) + d_{j+1}(x), \quad e_j(t_0) = 0, \quad (8)$$

con

$$L(x, y(x)) = \begin{pmatrix} 0 & I \\ J_f(x) & 0 \end{pmatrix}, \quad J_f(x) := \frac{\partial f}{\partial y}(x, y(x)).$$

Para cada t_0 fijo, el flujo original del IVP (2) se denotará por ψ_h de manera que $\psi_h(y_0, y'_0) = (y(t_0 + h), y'(t_0 + h))^T$, y el flujo numérico del método RKN modificado (3) se denotará por ϕ_h tal que $\phi_h(y_0, y'_0) = (y_1, y'_1)^T$. El flujo original del IVP (2) satisface la propiedad

$$(\psi_{-h} \circ \psi_h)(y_0, y'_0) = (y_0, y'_0)^T, \quad \text{para todo } y_0, y'_0 \in \mathbb{R}^m, \quad (9)$$

y cuando el flujo numérico ϕ_h también satisface la condición (9), al método de un paso se le llama simétrico. En general, para integraciones sobre intervalos de tiempo largos, los métodos numéricos simétricos muestran un comportamiento mejor que los no simétricos cuando se aplican a sistemas diferenciales reversibles, como es el caso de los sistemas mecánicos conservativos. Este hecho ha sido indicado por Hairer et al. [25] (ver Cap. V y XI), y estos autores han probado que para todo sistema diferencial cuya aplicación flujo es reversible, el flujo numérico de un método de un paso será también reversible si y solo si el método es simétrico. La clave para comprender el significado de esta propiedad es el concepto de método adjunto.

Definición 2.1 El método adjunto ϕ_h^* de un método numérico ϕ_h es la aplicación inversa del método original con paso de integración opuesto $-h$, es decir, $\phi_h^* := \phi_{-h}^{-1}$. En otras palabras, $y_1 = \phi_h^*(y_0)$ está definido implícitamente por $\phi_{-h}(y_1) = y_0$. Un método para el cual $\phi_h^* = \phi_h$ se llama simétrico.

Una de las propiedades de los métodos simétricos es que su orden algebraico es par ($p = 2q$) y el desarrollo asintótico del error global (7) contiene solo potencias pares de h :

$$\Delta_n = e_{2q}(x) h^{2q} + e_{2q+2}(x) h^{2q+2} + \cdots + e_{2q+2r}(x) h^{2q+2r} + \cdots, \quad (10)$$

con $e_{2j}(t_0) = 0$, $j \geq q$.

En el caso de sistemas Hamiltonianos asociados a sistemas diferenciales de segundo orden (2) el campo vectorial $f(t, \mathbf{q})$ (cambiando $y \rightarrow \mathbf{q}$) está definido mediante una función escalar (función potencial) $V = V(t, \mathbf{q}) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$, de manera que $f(t, \mathbf{q}) = -\mathbf{S} \nabla_{\mathbf{q}} V(t, \mathbf{q})$. Aquí \mathbf{S} es una matriz m -dimensional regular y simétrica de coeficientes constantes y $\nabla_{\mathbf{q}} V(t, \mathbf{q})$ es el vector columna que contiene las derivadas de $V(t, \mathbf{q})$ con respecto a las componentes de $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_m)^T$. Así, el sistema Hamiltoniano queda definido mediante una función Hamiltoniana separable de la forma

$$H(t, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{S} \mathbf{p} + V(t, \mathbf{q}), \quad (11)$$

y puede escribirse de forma equivalente a (2) como

$$\mathbf{q}' = \mathbf{S} \mathbf{p}, \quad \mathbf{p}' = -\nabla_{\mathbf{q}} V(t, \mathbf{q}), \quad \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0 = y_0, \quad \mathbf{p}(t_0) = \mathbf{p}_0 = \mathbf{S}^{-1} y_0'. \quad (12)$$

Para cada t_0 fijo la aplicación flujo $\psi_h(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ del sistema Hamiltoniano (12) es una transformación simpléctica para todo h en su dominio de definición (see [25, 26, 27]), es decir, la matriz Jacobiana de $\psi_h(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ satisface

$$\psi_h'(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \mathbf{J} \psi_h'(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)^T = \mathbf{J}, \quad \forall t_0 \in \mathbb{R} \text{ and } (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \in \mathbb{R}^{2m}, \quad (13)$$

y preserva la 2-forma diferencial $d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q} = dp_1 \wedge dq_1 + \cdots + dp_m \wedge dq_m$:

$$d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q} = d\mathbf{p}_0 \wedge d\mathbf{q}_0, \quad \forall (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \in \mathbb{R}^{2m}, \quad (14)$$

donde \mathbf{J} es la matriz antisimétrica $2m$ -dimensional

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0_m & I_m \\ -I_m & 0_m \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}^{-1} = -\mathbf{J}.$$

Una característica deseable en un método numérico ϕ_h para la resolución del sistema Hamiltoniano (12), además de proporcionar una aproximación precisa del flujo exacto ψ_h para un rango razonable de pasos de integración $h \in [0, h_0]$, es preservar propiedades cualitativas del flujo original ψ_h tales como la simplecticidad dada por (13) ó (14).

Definición 2.2 Un método numérico (3) definido por la aplicación flujo ϕ_h se llama simpléctico si para todo sistema Hamiltoniano (12) satisface la condición

$$\phi'_h(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \mathbf{J} \phi'_h(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)^T = \mathbf{J}, \quad \forall t_0 \in \mathbb{R} \text{ and } (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \in \mathbb{R}^{2m}, \quad (15)$$

o la condición

$$d\mathbf{p}_1 \wedge d\mathbf{q}_1 = d\mathbf{p}_0 \wedge d\mathbf{q}_0, \quad \forall (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \in \mathbb{R}^{2m}. \quad (16)$$

Uno de los más conocidos ejemplos de métodos RKN explícitos y simplécticos son los métodos de Störmer-Verlet [25, 27] los cuales poseen orden algebraico 2. Las condiciones para que un método RKN modificado y explícito sea simpléctico han sido obtenidas en [13].

A continuación introducimos algunos conceptos típicos en la terminología de métodos paralelos. Para un método RKN explícito, se define una *unidad de tiempo* secuencial como el tiempo requerido para una evaluación secuencial de la forma $f(t_n + c_i h, Y)$. En [36], los autores introducen el concepto de método r -paralelo y q -procesador en el contexto de los métodos RK que se puede extender con facilidad al caso de métodos RKN explícitos.

Definición 2.3 Un método RKN explícito de s etapas es r -paralelo y q -procesador, si r y q son los enteros más pequeños para los cuales las s etapas internas del método pueden evaluarse en r unidades de tiempo secuenciales utilizando q procesadores.

Otra forma equivalente de expresar esta definición es que se puede realizar una partición de la matriz A del método RKN (después de una permutación de las etapas) en r bloques o superetapas

$$A = \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ A_{21} & 0 & & & & \\ A_{31} & A_{32} & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \\ A_{r1} & A_{r2} & \cdots & A_{r,r-1} & 0 & \end{pmatrix}, \quad (17)$$

donde A_{ij} es una matriz de tamaño $\mu_i \times \mu_j$ y las derivadas segundas $f(t_0 + c_{\sigma+1} h, Y_{\sigma+1}), \dots, f(t_0 + c_{\sigma+\mu_i} h, Y_{\sigma+\mu_i})$ de cada bloque se pueden calcular en paralelo sobre μ_i procesadores de forma que un paso del método RKN se calcula en r unidades de tiempo secuenciales ($q = \max\{\mu_i, 2 \leq i \leq r\}$).

Una cota sobre el orden algebraico alcanzable por un método RKN explícito r -paralelo y q -procesador se ha obtenido en [42] y viene recogida en el siguiente resultado:

Teorema 2.4 El orden algebraico de un método RKN explícito r -paralelo y q -procesador cuya matriz A se puede partir como en (17) es como mucho $2r$, independientemente del número de procesadores q y del número de etapas s .

Los métodos RKN explícitos con orden algebraico $p = 2r$ se denominan métodos *P-optimales*.

La idea de construir métodos numéricos que integren exactamente un conjunto de funciones linealmente independientes distintas de los polinomios ha sido propuesto por diversos autores (ver por ejemplo [9, 17, 18, 19, 22, 24]). Esta idea consiste en determinar los coeficientes del método de manera que éste integre exactamente, en el intervalo $[t_0, t_0 + h]$, al conjunto de funciones escalares linealmente independientes

$$\mathcal{F} = \langle u_1(t), u_2(t), \dots, u_r(t) \rangle, \quad r \leq s.$$

En el caso de métodos RKN modificados (3) que son exactos para las funciones del espacio lineal generado por \mathcal{F} , sus coeficientes quedan determinados por la solución de los sistemas lineales siguientes

$$\mathbf{b}^T u_k''(t\mathbf{e} + h\mathbf{c}) = \frac{u_k'(t+h) - u_k'(t)}{h}, \quad k = 1, \dots, r, \quad (18)$$

$$\bar{\mathbf{b}}^T u_k''(t\mathbf{e} + h\mathbf{c}) = \frac{u_k(t+h) - \alpha_{s+1} u_k(t) - h\gamma_{s+1} u_k'(t)}{h^2}, \quad k = 1, \dots, r, \quad (19)$$

$$\mathbf{A} u_k''(t\mathbf{e} + h\mathbf{c}) = \frac{u_k(t\mathbf{e} + h\mathbf{c}) - \alpha u_k(t) - h(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{c}) u_k'(t)}{h^2}, \quad k = 1, \dots, r, \quad (20)$$

donde $\mathbf{e} = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s$, $\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{c} = (\gamma_1 c_1, \dots, \gamma_s c_s)^T \in \mathbb{R}^s$, y para un vector $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_s)^T \in \mathbb{R}^s$ y una función escalar g denotamos por $g(\mathbf{v})$ al vector real s -dimensional $(g(v_1), \dots, g(v_s))^T$.

En particular, cuando $r = s$ los coeficientes $\mathbf{b} = (b_i)$, $\bar{\mathbf{b}} = (\bar{b}_i)$ y $\mathbf{A} = (a_{ij})$ definidos por los sistemas lineales (18)–(20) quedan determinados de forma única para todo $h > 0$, si la matriz

$$\begin{pmatrix} u_1''(t + c_1 h) & \cdots & u_1''(t + c_s h) \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ u_s''(t + c_1 h) & \cdots & u_s''(t + c_s h) \end{pmatrix}, \quad (21)$$

es no singular, y estos coeficientes son h -dependientes.

El caso más habitual consiste en considerar funciones exponenciales y trigonométricas como conjunto de referencia: $\mathcal{F}_1 = \langle \exp(\lambda t), \exp(-\lambda t) \rangle$ o $\mathcal{F}_2 = \langle \sin(\omega t), \cos(\omega t) \rangle$. El caso trigonométrico \mathcal{F}_2 se obtiene de \mathcal{F}_1 con $\lambda = i\omega$. Para el conjunto de funciones de referencia \mathcal{F}_1 los sistemas lineales (18)–(20) se reducen a

$$\mathbf{b}^T \cosh(\mathbf{c} z) = \frac{\sinh(z)}{z}, \quad \mathbf{b}^T \sinh(\mathbf{c} z) = \frac{\cosh(z) - 1}{z}, \quad (22)$$

$$\bar{\mathbf{b}}^T \cosh(\mathbf{c} z) = \frac{\cosh(z) - \alpha_{s+1}}{z^2}, \quad \bar{\mathbf{b}}^T \sinh(\mathbf{c} z) = \frac{\sinh(z) - z\gamma_{s+1}}{z^2}, \quad (23)$$

$$\mathbf{A} \cosh(\mathbf{c} z) = \frac{\cosh(\mathbf{c} z) - \alpha}{z^2}, \quad \mathbf{A} \sinh(\mathbf{c} z) = \frac{\sinh(\mathbf{c} z) - z(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{c})}{z^2}, \quad (24)$$

donde $z = \lambda h$.

Hasta el momento se han construido métodos EFRKN explícitos y simpléticos con orden algebraico hasta cuatro (ver [13]). En las secciones siguientes presentamos algunos procedimientos que permiten construir métodos EFRKN simétricos y simpléticos (SSEFRKN) y explícitos de orden alto, así como pares encajados de métodos EFRKN explícitos también de orden alto.

3 Métodos SSEFRKN explícitos de orden alto

En esta sección presentamos un procedimiento basado en métodos de composición que permite construir métodos EFRKN explícitos simétricos y simpléticos (métodos SSEFRKN explícitos) de orden alto. Este procedimiento, como en el caso de métodos RKN clásicos, se basa en partir de un método básico exponencialmente ajustado y explícito ϕ_h que sea simétrico y simplético, y mediante una composición simétrica de éste método de referencia construir integradores de orden alto.

3.1 Métodos básicos de referencia SSEFRKN

Primero construimos métodos básicos de referencia SSEFRKN que son extensiones de los métodos clásicos de Störmer-Verlet [27, 25] representados por las tablas de coeficientes

$$\begin{array}{c}
 \text{SV}_1 : \quad \begin{array}{c|c} 1/2 & 0 \\ \hline & 1/2 \\ \hline & 1 \end{array}
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{c}
 \text{SV}_2 : \quad \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & \\ 1 & 1/2 & 0 \\ \hline & 1/2 & 0 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}
 \end{array}
 \quad (25)$$

La versión exponencialmente ajustada del método SV_1 (EFSV_1) viene definida por las ecuaciones

$$Y_1 = \alpha_1 y_0 + \frac{h}{2} \gamma_1 y'_0 \approx y(t_0 + \frac{h}{2}), \quad (26)$$

$$y_1 = y_0 + h \gamma_2 y'_0 + h^2 \bar{b}_1 f(t_0 + \frac{h}{2}, Y_1) \approx y(t_0 + h), \quad (27)$$

$$y'_1 = y'_0 + h b_1 f(t_0 + \frac{h}{2}, Y_1) \approx y'(t_0 + h), \quad (28)$$

o la tabla de coeficientes

$$\begin{array}{c}
 \text{EFSV}_1 : \quad \begin{array}{c|cc|c} 1/2 & \alpha_1 & \gamma_1 & 0 \\ \hline & 1 & \gamma_2 & \bar{b}_1 \\ \hline & & & b_1 \end{array}
 \end{array}
 \quad (29)$$

Calculando el adjunto ϕ_h^* e imponiendo que $\phi_h^* = \phi_h$ (Definition 2.1), las condiciones para que el método (26)–(28) sea simétrico vienen dadas por

$$\bar{b}_1 = \frac{b_1 \gamma_2}{2}, \quad \gamma_1 = \alpha_1 \gamma_2. \quad (30)$$

Si el método (26)–(28) se aplica al sistema Hamiltoniano (12), entonces

$$d\mathbf{p}_1 \wedge d\mathbf{q}_1 = d\mathbf{p}_0 \wedge d\mathbf{q}_0 + h^2 \left(\gamma_2 b_1 - \bar{b}_1 - \frac{b_1 \gamma_1}{2\alpha_1} \right) df_1 \wedge d\mathbf{p}_0, \quad (31)$$

con $f_1 = f(t_0 + h/2, Y_1)$, y el método será simpléctico (Definition 2.2) si satisface la condición

$$\bar{b}_1 = b_1 \left(\gamma_2 - \frac{\gamma_1}{2\alpha_1} \right). \quad (32)$$

Observar que las condiciones de simetría (30) implican la condición de simplectitud (32).

Si ahora imponemos que el método (26)–(28) sea exacto para toda función del espacio lineal \mathcal{F}_1 , las condiciones (22)–(24) implican que

$$\alpha_1 = \cosh(z/2), \quad \gamma_1 = \frac{\sinh(z/2)}{z/2}, \quad \gamma_2 = \frac{2 \sinh(z/2)}{z \cosh(z/2)}, \quad \bar{b}_1 = \frac{2 \sinh^2(z/2)}{z^2 \cosh(z/2)}, \quad b_1 = \gamma_1, \quad (33)$$

y los coeficientes (33) satisfacen las condiciones de simetría (30) y simplectitud (32). En consecuencia, el nuevo método EFSV₁ es simétrico, simpléctico y tiene orden algebraico 2.

La versión exponencialmente ajustada del método SV₂ (EFSV₂) viene definida por las ecuaciones

$$y_1 = y_0 + h \gamma_2 y'_0 + h^2 \bar{b}_1 f(t_0, y_0) \approx y(t_0 + h), \quad (34)$$

$$y'_1 = y'_0 + h (b_1 f(t_0, y_0) + b_2 f(t_0 + h, y_1)) \approx y'(t_0 + h), \quad (35)$$

o la tabla de coeficientes

$$\text{EFSV}_2 : \begin{array}{c|cc|cc} 0 & 1 & 1 & 0 & & \\ 1 & 1 & \gamma_2 & \bar{b}_1 & 0 & \\ \hline & 1 & \gamma_2 & \bar{b}_1 & 0 & \\ \hline & & & b_1 & b_2 & \end{array} \quad (36)$$

Imponiendo que $\phi_h^* = \phi_h$, las condiciones para que el método (34)–(35) sea simétrico vienen dadas por

$$\bar{b}_1 = b_1 \gamma_2, \quad b_2 = b_1. \quad (37)$$

Si el método (34)–(35) se aplica al sistema Hamiltoniano (12), entonces

$$d\mathbf{p}_1 \wedge d\mathbf{q}_1 = d\mathbf{p}_0 \wedge d\mathbf{q}_0 + h^2 (\gamma_2 b_1 - \bar{b}_1) df_0 \wedge d\mathbf{p}_0, \quad (38)$$

con $f_0 = f(t_0, y_0)$, y el método será simpléctico si satisface la condición

$$\bar{b}_1 = b_1 \gamma_2. \quad (39)$$

Observar que las condiciones de simetría (37) implican la condición de simplectitud (39).

Si ahora imponemos que el método (34)–(35) sea exacto para toda función del espacio lineal \mathcal{F}_1 , las condiciones (22)–(24) implican que

$$\gamma_2 = \frac{\sinh(z)}{z}, \quad \bar{b}_1 = \frac{\cosh(z) - 1}{z^2}, \quad b_2 = b_1 = \frac{\sinh(z)}{z(1 + \cosh(z))}, \quad (40)$$

y los coeficientes (40) satisfacen las condiciones de simetría (37) y simplectitud (39). En consecuencia, el nuevo método EFSV₂ es simétrico, simpléctico y tiene orden algebraico 2.

Notamos que cuando $z = 0$ los métodos EFSV₁ y EFSV₂ se reducen a los métodos clásicos SV₁ y SV₂. Además, en el caso trigonométrico ($\lambda = i\omega$) resulta que $z = i\nu$ con $\nu = \omega h$, y los coeficientes de los métodos EFSV₁ y EFSV₂ se obtienen teniendo en cuenta las relaciones $\cosh(i\nu) = \cos(\nu)$ y $\sinh(i\nu) = i \sin(\nu)$.

3.2 Métodos de composición exponencialmente ajustados

Dado un método básico de referencia ϕ_h y s números reales $\delta_1, \dots, \delta_s$, un *método de composición* Φ_h viene definido por

$$\Phi_h = \phi_{\delta_1 h} \circ \phi_{\delta_2 h} \circ \dots \circ \phi_{\delta_s h}, \quad \sum_{i=1}^s \delta_i = 1, \quad (41)$$

donde $\phi_{\delta_i h}$ representa al método de referencia con paso de integración $\delta_i h$. Además, un método RKN modificado ϕ_h está ajustado al espacio lineal \mathcal{F} , si para toda función $u(t) \in \mathcal{F}$

$$\phi_h(u(t_0), u'(t_0)) = \begin{pmatrix} u(t_0 + h) \\ u'(t_0 + h) \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Teorema 3.1 *Sea Φ_h un método de composición definido por (41)*

i) *Si el método de referencia ϕ_h está ajustado al espacio lineal \mathcal{F} , entonces el método de composición Φ_h también está ajustado a \mathcal{F} .*

ii) Si el método de referencia ϕ_h es simétrico y los coeficientes δ_i satisfacen $\delta_i = \delta_{s+1-i}$, para todo i (composición simétrica), entonces el método de composición Φ_h es simétrico.

iii) Si el método de referencia ϕ_h es simpléctico, entonces el método de composición Φ_h también es simpléctico.

Dem: i) Si ϕ_h satisface (42) para toda función $u(t) \in \mathcal{F}$, entonces se tiene que

$$(\phi_{\delta_1 h} \circ \phi_{\delta_2 h})(u(t_0), u'(t_0)) = \phi_{\delta_1 h}(u(t_0 + \delta_2 h), u'(t_0 + \delta_2 h)) = \begin{pmatrix} u(t_0 + (\delta_1 + \delta_2)h) \\ u'(t_0 + (\delta_1 + \delta_2)h) \end{pmatrix}. \quad (43)$$

En consecuencia, para toda función $u(t) \in \mathcal{F}$

$$\Phi_h(u(t_0), u'(t_0)) = \begin{pmatrix} u(t_0 + (\sum_{i=1}^s \delta_i)h) \\ u'(t_0 + (\sum_{i=1}^s \delta_i)h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(t_0 + h) \\ u'(t_0 + h) \end{pmatrix}. \quad (44)$$

ii) Φ_h es simétrico por ser una composición simétrica de métodos simétricos [25].

iii) Φ_h es simpléctico por ser una composición de métodos simplécticos (la composición de transformaciones simplécticas es una transformación simpléctica [25]). \square

El Teorema 3.1 asegura que si el método EFRKN de referencia es simétrico y simpléctico, y los coeficientes del método de composición Φ_h son simétricos ($\delta_i = \delta_{s+1-i}$, para todo i), entonces el método Φ_h es un método EFRKN simétrico y simpléctico. En consecuencia, utilizando los métodos EFSV₁ y EFSV₂ como métodos de referencia se pueden construir métodos de composición EFRKN simétricos y simplécticos de orden alto.

Las condiciones de orden para métodos de composición con coeficientes simétricos pueden encontrarse en [25], así como los coeficientes δ_i . A continuación presentamos los coeficientes para métodos de orden 6 y 8.

- Orden 6 con $s = 9$ etapas

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \delta_9 = 0.392161444007314139 \\ \delta_2 &= \delta_8 = 0.332599136789359438 \\ \delta_3 &= \delta_7 = -0.706246172557639359 \\ \delta_4 &= \delta_6 = 0.082213596293550800 \\ \delta_5 &= 0.798543990934829963 \end{aligned} \quad (45)$$

- Orden 8 con $s = 17$ etapas

$$\begin{aligned}
\delta_1 &= \delta_{17} = 0.130202483088890081 \\
\delta_2 &= \delta_{16} = 0.561162981775108384 \\
\delta_3 &= \delta_{15} = -0.389474962644847286 \\
\delta_4 &= \delta_{14} = 0.158841906555155601 \\
\delta_5 &= \delta_{13} = -0.395903894133237577 \\
\delta_6 &= \delta_{12} = 0.184539640978315707 \\
\delta_7 &= \delta_{11} = 0.258374387686322047 \\
\delta_8 &= \delta_{10} = 0.295011723609310299 \\
\delta_9 &= -0.605508533830034512
\end{aligned} \tag{46}$$

4 Métodos paralelos EFRKN explícitos de orden alto

Ahora investigamos la construcción de una familia de métodos paralelos EFRKN explícitos que consisten de k métodos EFRKN explícitos de s_i etapas ($i = 1, \dots, k$) que se implementan sobre distintos procesadores, y las aproximaciones obtenidas se combinan para obtener la solución numérica y_1 e y'_1 en $t_1 = t_0 + h$. Utilizando la notación de Iserles and Nørsett [35] se pueden representar en la forma

$$\begin{array}{c|cc|c} \mathbf{c}_1 & \alpha^{(1)} & \gamma^{(1)} & \mathbf{A}_1 \\ \hline & \alpha_{s+1}^{(1)} & \gamma_{s+1}^{(1)} & \bar{\mathbf{b}}_1^T \\ \hline & & & \mathbf{b}_1^T \end{array} + \dots + \begin{array}{c|cc|c} \mathbf{c}_k & \alpha^{(k)} & \gamma^{(k)} & \mathbf{A}_k \\ \hline & \alpha_{s+1}^{(k)} & \gamma_{s+1}^{(k)} & \bar{\mathbf{b}}_k^T \\ \hline & & & \mathbf{b}_k^T \end{array} \tag{47}$$

donde \mathbf{c}_i , \mathbf{b}_i , $\bar{\mathbf{b}}_i$, $\alpha^{(i)}$, $\gamma^{(i)}$, $\alpha_{s+1}^{(i)}$, $\gamma_{s+1}^{(i)}$ y \mathbf{A}_i son los coeficientes de cada método EFRKN de s_i etapas que proporcionan las aproximaciones $y_1^{(i)}$ e $y'_1{}^{(i)}$ en $t_1 = t_0 + h$, y las aproximaciones finales se obtienen tomando una combinación lineal de ellos

$$y_1 = \sum_{i=1}^k \omega_i y_1^{(i)}, \quad y'_1 = \sum_{i=1}^k \omega_i y'_1{}^{(i)}, \quad \sum_{i=1}^k \omega_i = 1. \tag{48}$$

Los métodos (47)–(48) también se pueden representar mediante la tabla de Butcher

\mathbf{c}_1	$\alpha^{(1)}$	$\gamma^{(1)}$	\mathbf{A}_1	0	\cdots	0
\mathbf{c}_2	$\alpha^{(2)}$	$\gamma^{(2)}$	0	\mathbf{A}_2	\cdots	0
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
\mathbf{c}_k	$\alpha^{(k)}$	$\gamma^{(k)}$	0	0	\cdots	\mathbf{A}_k
	$\sum_{i=1}^k \omega_i \alpha_{s+1}^{(i)}$	$\sum_{i=1}^k \omega_i \gamma_{s+1}^{(i)}$	$\omega_1 \bar{\mathbf{b}}_1^T$	$\omega_2 \bar{\mathbf{b}}_2^T$	\cdots	$\omega_k \bar{\mathbf{b}}_k^T$
			$\omega_1 \mathbf{b}_1^T$	$\omega_2 \mathbf{b}_2^T$	\cdots	$\omega_k \mathbf{b}_k^T$

(49)

4.1 Una familia de pares encajados de métodos EFRKN paralelos

Consideramos un método básico de referencia simétrico y de orden 2 (EFSV₁ o EFSV₂) que denotaremos por su aplicación flujo ϕ_h , y construimos un nuevo método $\Phi_h^{(s)}$ conectando s pasos de $\phi_{\Delta t}$ con tamaño $\Delta t = h/s$, es decir,

$$\Phi_h^{(s)} = \phi_{h/s} \circ \phi_{h/s} \circ \cdots \circ \phi_{h/s}, \quad (s\text{-veces}). \quad (50)$$

El nuevo método $\Phi_h^{(s)}$ también es simétrico (por ser una composición simétrica de métodos simétricos), tiene orden 2 y un desarrollo asintótico del error global (10) de la forma

$$\Delta_n^{(s)} = \frac{1}{s^2} e_2(x) h^2 + \frac{1}{s^4} e_4(x) h^4 + \cdots + \frac{1}{s^{2m}} e_{2m}(x) h^{2m} + \cdots \quad (51)$$

Dada una secuencia arbitraria s_1, s_2, \dots, s_k de enteros positivos satisfaciendo

$$0 < s_1 < s_2 < \cdots < s_k, \quad (52)$$

se puede construir el esquema k -procesador

$$\Phi_h = \sum_{i=1}^k \omega_i \Phi_h^{(s_i)}, \quad \sum_{i=1}^k \omega_i = 1, \quad (53)$$

donde cada uno de los métodos $\Phi_h^{(s_i)}$ puede evaluarse en un procesador diferente ($\Phi_h^{(s_i)}$ se determina conectando s_i pasos de ϕ_h con tamaño h/s_i como in (50)), y cuyo error global admite un desarrollo asintótico de la forma

$$\Delta_n(\Phi_h) := \sum_{i=1}^k \omega_i \Delta_n^{(s_i)} = \sum_{i=1}^k \frac{\omega_i}{s_i^2} e_2(x) h^2 + \cdots + \sum_{i=1}^k \frac{\omega_i}{s_i^{2m}} e_{2m}(x) h^{2m} + \cdots, \quad (54)$$

En consecuencia, si los pesos ω_i se eligen satisfaciendo las condiciones

$$\sum_{i=1}^k \omega_i = 1, \quad \sum_{i=1}^k \frac{\omega_i}{s_i^{2j}} = 0, \quad j = 1, \dots, m-1, \quad (55)$$

entonces la expresión del error global (54) se reduce a

$$\Delta_n(\Phi_h) = \sum_{i=1}^k \frac{\omega_i}{s_i^{2m}} e_{2m}(x) h^{2m} + \mathcal{O}(h^{2m+2}). \quad (56)$$

Teniendo en cuenta que el error local coincide con el error global cometido en el primer paso ($LE(\Phi_h) := \Delta_1(\Phi_h)$) y el desarrollo asintótico $e_{2j}(t_0+h) = e_{2j}(t_0) + h e'_{2j}(t_0) + \mathcal{O}(h^2)$ con $e_{2j}(t_0) = 0$, se tiene que

$$LE(\Phi_h) = \sum_{i=1}^k \frac{\omega_i}{s_i^{2m}} e'_{2m}(t_0) h^{2m+1} + \mathcal{O}(h^{2m+2}), \quad (57)$$

y el método Φ_h definido en (53) con los pesos ω_i satisfaciendo las condiciones (55) tiene orden algebraico $p = 2m$.

A continuación veremos que si el esquema básico de referencia es de tipo EFRKN, entonces el esquema k -procesador (53) es un método EFRKN.

Teorema 4.1 *Si el método de referencia ϕ_h está ajustado al espacio lineal \mathcal{F} , entonces el método Φ_h definido en (53) también está ajustado a \mathcal{F} .*

Dem: Por el Teorema 3.1 el método de composición $\Phi_h^{(s_i)}$ está ajustado al espacio lineal \mathcal{F} . Por lo tanto, para toda función $u(t) \in \mathcal{F}$

$$\Phi_h(u(t_0), u'(t_0)) = \sum_{i=1}^k \omega_i \Phi_h^{(s_i)}(u(t_0), u'(t_0)) = \sum_{i=1}^k \omega_i \begin{pmatrix} u(t_0+h) \\ u'(t_0+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(t_0+h) \\ u'(t_0+h) \end{pmatrix}. \quad (58)$$

□

Entonces, para los métodos básicos de referencia EFSV₁ y EFSV₂ podemos escribir el siguiente resultado:

Teorema 4.2 *Si el método de referencia ϕ_h es un método EFRKN simétrico de orden 2 (EFSV₁ ó EFSV₂), entonces el método EFRKN definido en (53) tiene orden maximal $2k$ cuando los pesos estan dados por*

$$w_i = \begin{cases} 1, & \text{para } k = 1, \\ \frac{s_i^{2k-2}}{k \prod_{\substack{j \neq i \\ j=1}} (s_i^2 - s_j^2)}, & \text{para } k \geq 2, \quad i = 1, \dots, k, \end{cases} \quad (59)$$

y el término principal del error local es

$$LE(\Phi_h) = \frac{(-1)^{k+1}}{s_1^2 s_2^2 \dots s_k^2} e'_{2k}(t_0) h^{2k+1} + \mathcal{O}(h^{2k+2}). \quad (60)$$

Dem: El orden maximal $2k$ se sigue de (55) con $m = k$ y los pesos (59) se obtienen resolviendo el sistema lineal de tipo Vandermonde resultante. Sustituyendo los pesos (59) en la expresión del error local (57) se obtiene (60). \square

Observaciones.

1. Para $k \geq 4$, el teorema 4.2 proporciona un procedimiento para construir una familia de métodos EFRKN explícitos de orden elevado ($p \geq 8$) que requieren s_k f -evaluaciones secuenciales por paso.
2. El procedimiento (53) también permite la construcción de otro esquema paralelo

$$\Phi_h^* = \sum_{i=1}^{k-1} \omega_i^* \Phi_h^{(s_i)}, \quad (61)$$

con los pesos definidos por

$$w_i^* = \frac{s_i^{2k-4}}{\prod_{\substack{j \neq i \\ j=1}}^{k-1} (s_i^2 - s_j^2)}, \quad i = 1, \dots, k-1, \quad (62)$$

y orden algebraico $2k - 2$. Por lo tanto, existe una familia de pares encajados de orden $2k(2k - 2)$ que permite la implementación de los métodos paralelos EFRKN en códigos a paso variable sin coste adicional.

Entonces, considerando los métodos básicos de referencia EFSV₁ y EFSV₂ y seleccionando una secuencia (52) podemos calcular en paralelo sobre k procesadores

$$\Phi_h^{(s_i)}(y_0, y'_0) = (y_1^{(s_i)}, y_1'^{(s_i)})^T, \quad i = 1, \dots, k,$$

(cada método $\Phi_h^{(s_i)}$ se evalúa en un procesador) y después evaluar

$$(y_1, y_1')^T = \sum_{i=1}^k \omega_i \Phi_h^{(s_i)}(y_0, y'_0),$$

$$\text{Est}(h) = \sum_{i=1}^{k-1} (\omega_i - \omega_i^*) \Phi_h^{(s_i)}(y_0, y'_0) + \omega_k \Phi_h^{(s_k)}(y_0, y'_0),$$

donde $\text{Est}(h)$ representa una estimación del error local basada en el par encajado $2k(2k - 2)$. En la Tabla I mostramos los pesos ω_i y ω_i^* para el caso de la secuencia $s_i = i$, $i = 1, \dots, k$, con $k = 4, 5, 6$, y los métodos se denotarán por EFRKN $p(s_1, \dots, s_k)$ donde p indica el orden.

TABLA I: Pesos ω_i y ω_i^* para los pares encajados $p(p - 2)$ con $p = 8, 10, 12$

EFRKN8(1,2,3,4)		EFRKN10(1,2,3,4,5)		EFRKN12(1,2,3,4,5,6)	
w_i	w_i^*	w_i	w_i^*	w_i	w_i^*
$\frac{1}{360}$	$\frac{1}{24}$	$\frac{1}{8640}$	$\frac{1}{360}$	$\frac{1}{302400}$	$\frac{1}{8640}$
$\frac{16}{45}$	$\frac{16}{15}$	$\frac{64}{945}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{8}{945}$	$\frac{64}{945}$
$\frac{729}{280}$	$\frac{81}{40}$	$\frac{6561}{4480}$	$\frac{729}{280}$	$\frac{2187}{4480}$	$\frac{6561}{4480}$
$\frac{1024}{315}$		$\frac{16384}{2835}$	$\frac{1024}{315}$	$\frac{65536}{14175}$	$\frac{16384}{2835}$
		$\frac{390625}{72576}$		$\frac{9765625}{798336}$	$\frac{390625}{72576}$
				$\frac{17496}{1925}$	

5 Experimentos numéricos

En esta sección presentamos algunos experimentos numéricos con un sistema diferencial oscilatorio para mostrar el comportamiento cualitativo y la eficiencia numérica de los nuevos métodos EFRKN construidos en las secciones 3 y 4 cuando se comparan con algunos métodos clásicos de la literatura científica. El criterio utilizado en las comparaciones numéricas se basa en calcular el máximo del error global en la solución ($MGE = \log_{10}(\max \|y(t_n) - y_n\|)$) o en el Hamiltoniano ($MGEH = \log_{10}(\max |H(0) - H_n|)$), y los cálculos se realizan en aritmética de doble precisión (16 dígitos).

El sistema diferencial oscilatorio considerado es el problema gravitacional de los dos cuerpos (problema plano de Kepler) definido mediante el Hamiltoniano

$$H(p, q) = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) - (q_1^2 + q_2^2)^{-1/2},$$

con las condiciones iniciales $q_1(0) = 1 - e$, $q_2(0) = 0$, $p_1(0) = 0$, $p_2(0) = ((1 + e)/(1 - e))^{1/2}$, donde e ($0 \leq e < 1$) representa la excentricidad de la órbita elíptica. La solución exacta de este PVI es una órbita elíptica 2π -periódica con semieje mayor 1 dada por

$$q_1(t) = \cos(u(t)) - e, \quad q_2(t) = \sqrt{1 - e^2} \sin(u(t)),$$

donde $u(t)$ es la solución de la ecuación de Kepler: $t = u(t) - e \sin(u(t))$. La integración se realiza en el intervalo $[0, 20]$ con los valores de los parámetros $e = 0.001$, $\lambda = i\omega$ con $\omega = (q_1^2 + q_2^2)^{-3/2}$ como en [3].

5.1 Comparaciones a paso fijo

Los nuevos métodos de composición EF de la sección 3 se han comparado con los métodos de composición simétricos de coeficientes constantes y órdenes 6 y 8 (SIM6 y SIM8) dados en [25]. La Figura 1 muestra el máximo del error global en la solución (MGE) con respecto al número de f -evaluaciones secuenciales requeridas por cada método para los pasos $h = 0.8/2^j$, $j \geq 0$.

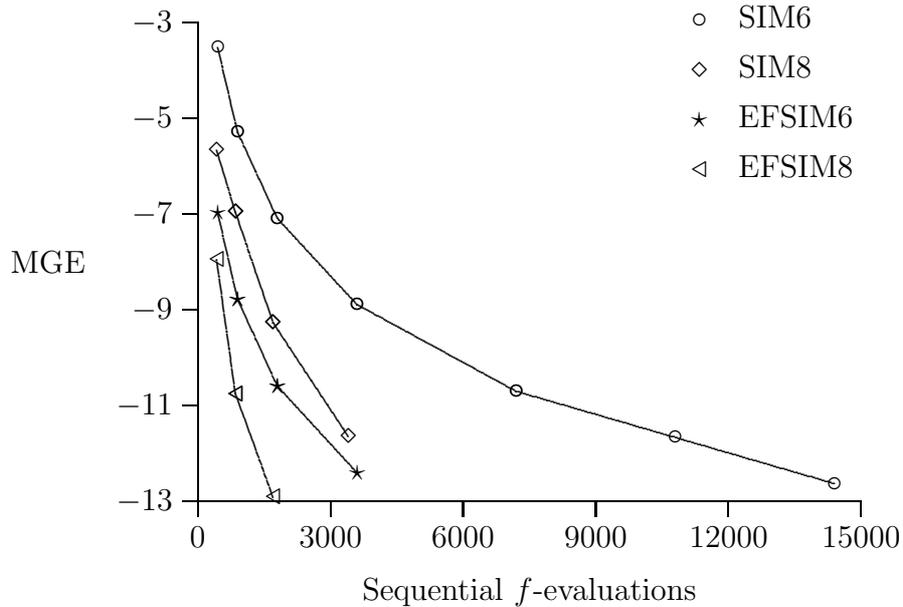


Figura 1: Curvas de eficiencia (a paso fijo).

La Figura 2 muestra el máximo del error global en el Hamiltoniano (MGEH) como una función del tiempo en los instantes finales $t_{end} = 10^j$, $j = 1, \dots, 5$, con paso de integración $h = 0.8$.

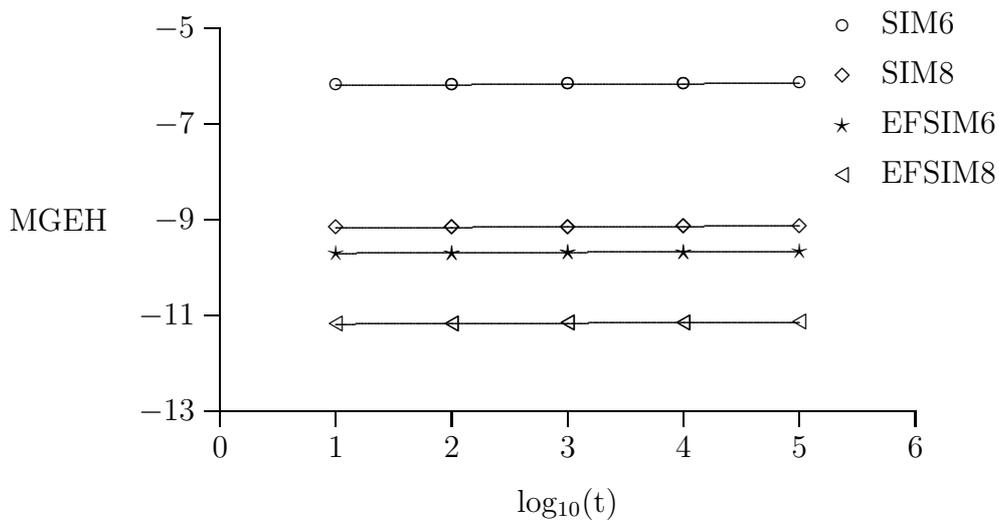


Figura 2: Error en el Hamiltoniano como una función del tiempo ($h = 0.8$).

De los resultados numéricos obtenidos (Figuras 1 y 2) se observa que los métodos de composición simétricos EF (EFSIM6 y EFSIM8) muestran un comportamiento más

eficiente que sus homólogos de coeficientes constantes (SIM6 y SIM8). Además, aunque los métodos simétricos y simplécticos no preservan el Hamiltoniano, la Figura 2 muestra que el error en la energía permanece prácticamente constante para el sistema Hamiltoniano oscilatorio considerado.

5.2 Comparaciones a paso variable

Los nuevos métodos paralelos EFRKN de la sección 4 se han comparado con el encajado clásico RKN8(6) obtenido en [39]. En la Figura 3 se muestran las curvas de eficiencia de los métodos (máximo del error global en la solución (MGE) versus el coste computacional medido por el número de f -evaluaciones secuenciales requeridas por cada método) para tolerancias del error local de la forma $Tol = 10^{-j}$, $j \geq 3$.

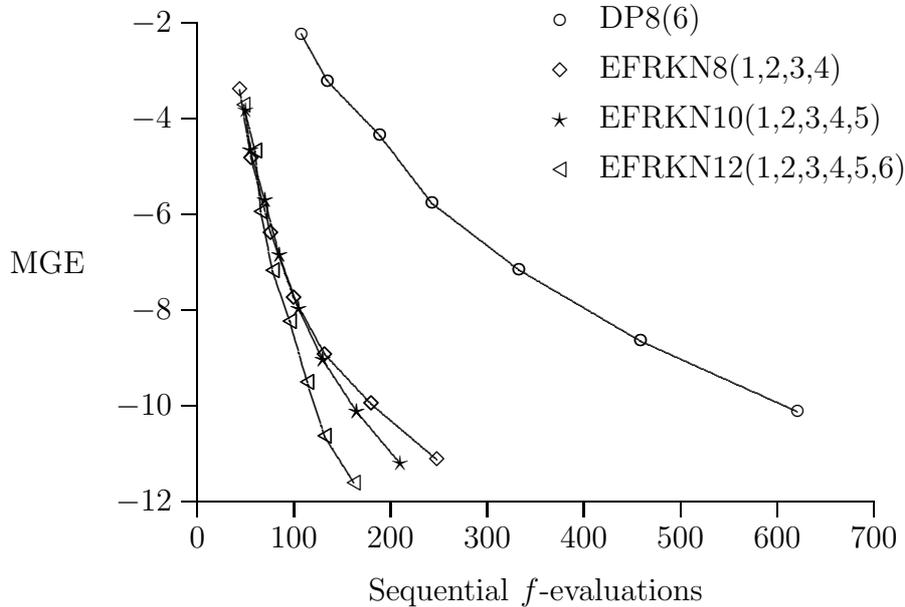


Figura 3: Curvas de eficiencia (a paso variable).

En el caso de códigos a paso variable, la Figura 3 muestra claramente que los esquemas paralelos de orden alto ajustados exponencialmente son más eficientes que el código clásico RKN8(6).

6 Conclusiones

En este trabajo se presentan dos procedimientos para construir métodos RKN explícitos ajustados exponencialmente de orden alto. El primer procedimiento se basa en la composición simétrica de métodos simétricos partiendo de un método básico de referencia que es ajustado exponencialmente, además de simétrico y simpléctico. El segundo procedimiento se basa en una combinación convexa de k métodos EFRKN explícitos de s_i etapas los cuales se construyen conectando s_i pasos de un método de referencia EFRKN

explícito y simétrico con longitud $\Delta t = h/s_i$. Considerando como métodos de referencia una versión ajustada exponencialmente de los métodos de Störmer-Verlet, se construye una familia de esquemas paralelos EFRKN explícitos en el formato de pares encajados con órdenes $2k(2k - 2)$. Ambos procedimientos se muestran como alternativas de confianza frente a los códigos RKN clásicos para integrar sistemas diferenciales oscilatorios de segundo orden. Los experimentos numéricos realizados con un sistema Hamiltoniano oscilatorio muestran que los nuevos métodos EFRKN mejoran la eficiencia computacional obtenida con otros integradores RKN clásicos de la literatura científica.

Agradecimientos

El presente trabajo de investigación se ha financiado en parte mediante el Proyecto MTM2007-67530-C02-01 de la Dirección General de Investigación (Ministerio de Educación, Cultura y Deporte).

Referencias

- [1] V.I. Arnold: *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag, New York, 1989.
- [2] T.E. Simos and J. Vigo-Aguiar: Exponentially fitted symplectic integrator, *Phys. Rev. E*, **67** (2003) 1–7.
- [3] H. Van de Vyver: A fourth order symplectic exponentially fitted integrator, *Comput. Phys. Comm.*, **176** (2006) 255–262.
- [4] J. Vigo-Aguiar, T.E. Simos and A. Tocino: An adapted symplectic integrator for Hamiltonian systems, *Int. J. Modern. Phys. C*, **12** (2001) 225–234.
- [5] M. Calvo, J.M. Franco, J.I. Montijano and L. Rández: Structure preservation of Exponentially Fitted Runge-Kutta methods, *J. Comput. Appl. Math.*, **218** (2008) 421–434.
- [6] M. Calvo, J.M. Franco, J.I. Montijano and L. Rández: Sixth-order symmetric and symplectic exponentially fitted Runge-Kutta methods of Gauss type, *J. Comput. Appl. Math.*, **223** (2009) 387–398.
- [7] M. Calvo, J.M. Franco, J.I. Montijano and L. Rández: Sixth-order symmetric and symplectic exponentially fitted modified Runge-Kutta methods of Gauss type, *Comput. Phys. Comm.*, **178** (2008) 732–744.
- [8] D.G. Bettis: Runge-Kutta Algorithms for Oscillatory Problems, *J. Appl. Math. Phys. (ZAMP)*, **30** (1979) 699–704.

- [9] J.P. Coleman and S.C. Duxbury: Mixed collocation methods for $y'' = f(x, y)$, *J. Comput. Appl. Math.*, **126** (2000) 47–75.
- [10] J.M. Franco: An embedded pair of exponentially fitted explicit Runge–Kutta methods, *J. Comput. Appl. Math.*, **149** (2002) 407–414.
- [11] J.M. Franco: Runge–Kutta methods adapted to the numerical integration of oscillatory problems, *Appl. Numer. Math.*, **50** (2004) 427–443.
- [12] J.M. Franco: Exponentially fitted explicit Runge–Kutta–Nyström methods, *J. Comput. Appl. Math.*, **167** (2004) 1–19.
- [13] J.M. Franco: Exponentially fitted symplectic integrators of RKN type for solving oscillatory problems, *Comput. Phys. Comm.*, **177** (2007) 479–492.
- [14] W. Gautschi: Numerical integration of ordinary differential equations based on trigonometric polynomials, *Numer. Math.* **3** (1961) 381–397. (2004) 427–443.
- [15] N.S. Huang, R.B. Sidge and N.H. Cong: On functionally fitted Runge–Kutta methods, *BIT*, **46** (2006) 861–874.
- [16] L. Gr. Ixaru and G. Vanden. Berghe: *Exponential Fitting*, Kluwer Academic Publishers, 2004.
- [17] K. Ozawa: A functional fitting Runge–Kutta method with variable coefficients, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **18** (2001) 107–130.
- [18] K. Ozawa: A functionally fitted three-stage explicit singly diagonally implicit Runge–Kutta method, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **22** (2005) 403–427.
- [19] B. Paternoster: Runge–Kutta(–Nyström) methods for ODEs with periodic solutions based on trigonometric polynomials, *Appl. Numer. Math.*, **28** (1998) 401–412.
- [20] T.E. Simos: An exponentially–fitted Runge–Kutta method for the numerical integration of initial–value problems with periodic or oscillating solutions, *Comput. Phys. Commun.*, **115** (1998) 1–8.
- [21] G. Vanden Berghe, H. De Meyer, M. Van Daele and T. Van Hecke: Exponentially–fitted explicit Runge–Kutta methods, *Comput. Phys. Commun.*, **123** (1999) 7–15.
- [22] G. Vanden Berghe, H. De Meyer, M. Van Daele and T. Van Hecke: Exponentially fitted Runge–Kutta methods, *J. Comput. Appl. Math.*, **125** (2000) 107–115.
- [23] G. Vanden Berghe, L. Gr. Ixaru, H. De Meyer: Frequency determination and step-length control for exponentially fitted Runge–Kutta methods, *J. Comput. Appl. Math.*, **132** (2001), pp. 95–105.

- [24] G. Vanden Berghe, M. Van Daele and H. Van de Vyver: Exponentially-Fitted Runge-Kutta methods of collocation type: fixed or variable knot points?, *J. Comput. Appl. Math.*, **159** (2003) 217–239.
- [25] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner: *Geometric Numerical Integration: Structure Preserving algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [26] J.M. Sanz-Serna: Symplectic integrators for Hamiltonian problems: an overview, *Acta Numerica*, **1** (1992) 243–286.
- [27] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo: *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman and Hall, London, 1994.
- [28] P. Bogacki: A family of parallel Runge-Kutta pairs, *Comput. Math. Appl.*, **31** (1996) 23–31.
- [29] K. Burrage: *Parallel and Sequential Methods for Ordinary Differential Equations*, Oxford Sciences Publications, Oxford, 1995.
- [30] N.H. Cong: Note on the performance of direct and indirect Runge-Kutta-Nyström methods, *J. Comput. Appl. Math.*, **45** (1993) 295–308.
- [31] N.H. Cong: Explicit symmetric Runge-Kutta-Nyström methods for parallel computers, *Comput. Math. Appl.*, **31** (1996) 111–122.
- [32] N.H. Cong: RKN-type parallel block PC methods with Lagrange-type predictors, *Comput. Math. Appl.*, **35** (1998) 45–57.
- [33] N.H. Cong, K. Strehmel and R. Weiner: Runge-Kutta-Nyström-type parallel block predictor-corrector methods, *Adv. Comput. Math.*, **10** (1999) 115–133.
- [34] N.H. Cong and N. Van Minh: Continuous parallel-iterated RKN-type PC methods for nonstiff IVPs, *Appl. Numer. Math.*, **57** (2007) 1097–1107.
- [35] A. Iserles and S.P. Nørsett: On the theory of parallel Runge-Kutta methods, *IMA J. Numer. Anal.*, **10** (1990) 463–488.
- [36] K.R. Jackson and S.P. Nørsett: The potential for parallelism in Runge-Kutta methods; Part I: RK formulas in standard form, *SIAM J. Numer. Anal.*, **32** (1995) 49–82.
- [37] B. Paternoster: Order bound for a family of parallel Runge-Kutta-Nyström methods through computer algebra, *Comput. Math. Appl.*, **35** (1998) 107–119.
- [38] B.P. Sommeijer: Explicit, high-order Runge-Kutta-Nyström methods for parallel computers, *Appl. Numer. Math.*, **13** (1993) 221–240.
- [39] J.R. Dormand, M.E.A. El-Mikkawy and P.J. Prince: High-order embedded Runge-Kutta-Nyström Formulae. *IMA J. Numer. Anal.*, **7** (1987) 423–430

- [40] M. El-Mikkawy and R. El-Desouky: A new optimized non FSAL embedded Runge-Kutta-Nyström algorithm of orders 6 and 4 in six stages, *Appl. Math. Comput.*, **145** (2003) 33–43.
- [41] E. Hairer, S.P. Nørsett and G. Wanner: *Solving Ordinary Differential Equations I, Nonstiff Problems*, Springer–Verlag, Berlin, 1993.
- [42] I. Gómez, J.M. Franco: Métodos Runge-Kutta-Nyström paralelos de tipo explícito para PVI de segundo orden, *Actas electrónicas del XXI-CEDYA/XI-CMA*, Ciudad Real (Spain), 21-25 de Septiembre de 2009.

