

D.A. 18236

Fecha 20 - XII - 94; 151

METODOS SIMPLECTICOS DESARROLLABLES EN P-SERIES

Tesis C-289

EXAMEN DE
PRELIMINARIO

Memoria presentada para optar
al título de Doctor en Ciencias
Matemáticas por

Ander Murua Uria

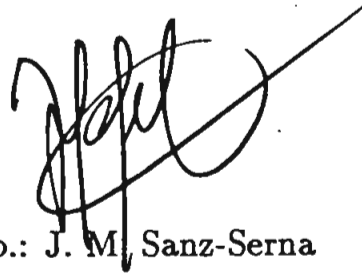


JESUS MARIA SANZ-SERNA, CATEDRATICO DE MATEMATICA APLICADA DE LA UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

CERTIFICA:

Que la presente memoria "Métodos simplécticos desarrollables en P-series" ha sido realizada por Ander Murua Uria bajo mi dirección en la Universidad de Valladolid. Para que conste, en cumplimiento de la legislación vigente, presento y apadrino ante la Comisión de Doctorado de dicha Universidad esta Tesis Doctoral.

Valladolid a 24 de Noviembre de 1994.



Fdo.: J. M. Sanz-Serna

Aitari
eta amari



Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento al profesor Sanz-Serna por su labor de dirección, que ha hecho posible la realización de este trabajo.

Gracias también a los compañeros de la Facultad de Informática de Donostia, que me han animado y apoyado durante la realización de este trabajo, y se han interesado por el desarrollo del mismo, especialmente a Yosu Yurramendi, Joseba Makazaga, Iñaki Alegria, Itziar Baragaña, Olatz Arregi, y un largo etcétera que sería demasiado largo de enumerar.

También quiero agradecer a mi Departamento, por la ayuda recibida, así como al Departamento de L.S.I. de la Facultad de Informática por haberme cedido durante un tiempo una estación de trabajo, con la cual he podido terminar de forma más cómoda la redacción de esta memoria.

Por último, no quiero dejar sin mencionar a todos aquellos que debido a mi dedicación (a veces exclusiva, e incluso obsesiva) a este trabajo han sufrido sus consecuencias sin retirarme el saludo, en especial, a mis amigos y amigas de Zarautz.

Presentación

La memoria que presentamos para optar al grado de doctor en Ciencias tiene como objeto de estudio los métodos de P-series para la integración numérica de sistemas Hamiltonianos de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Cada método de un paso para integrar un sistema diferencial $\dot{x} = f(x)$ viene expresado por un aplicación $\psi_{h,f}$ que hace avanzar la solución numérica h unidades de tiempo. Por ejemplo $\psi_{h,f}(x) = x + hf(x)$ corresponde al método de Euler. Es bien conocido que para métodos Runge-Kutta, métodos de Taylor, etc., el desarrollo de $\psi_{h,f}$ es lo que Hairer y Wanner [15] denominan una B-serie. Cada término de una B-serie es de la forma $ch^\rho \mathcal{F}$, donde ρ es un número entero no negativo, c es un número real, y \mathcal{F} es una función de x construida a partir de f . Hay un término $ch^\rho \mathcal{F}$ para cada árbol con raíz. En este sentido se dice que los métodos Runge-Kutta, los de Taylor, etc, son métodos de B-series.

Por otro lado, la literatura matemática y física reciente ha dado una gran relevancia a la integración de sistemas Hamiltonianos mediante métodos numéricos simplécticos, vease por ejemplo Sanz-Serna y Calvo [25] y Hairer-Nørset-Wanner [12]. Los sistemas Hamiltonianos son de la forma

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(p, q)}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H(p, q)}{\partial p_i}, \quad i = 1, \dots, d,$$

donde $H(p, q)$ es la función Hamiltoniana. Aparecen muy frecuentemente en las aplicaciones, pues pueden modelar cualquier situación donde la fricción o la disipación sea despreciable. La principal propiedad de los flujos Hamiltonianos es su carácter simpléctico y es recomendable integrar los sistemas Hamiltonianos mediante métodos simplécticos, es decir, métodos tales que, para sistemas Hamiltonianos, $\psi_{h,f}$ sea una transformación simpléctica (o en otras palabras, una transformación que conserva la forma diferencial $dp \wedge dq$).

En los sistemas Hamiltonianos las variables dependientes aparecen divididas de modo natural en dos grupos, p y q . Por ello es atractivo integrarlos con métodos particionados, esto es, con métodos que traten de modo diverso las distintas ecuaciones del sistema. Cuando se usan métodos particionados el concepto de B-serie no es adecuado y debe sustituirse por el de P-serie introducido por Hairer [17]. Una

P-serie tiene un término para cada árbol con raíz con P tipos distintos de vértices, donde P es el número de partes en que se descompone el sistema. Siguiendo la terminología standard, llamamos P-arboles a tales grafos, y P-series a las series formales correspondientes al desarrollo de Taylor de métodos particionados.

En este trabajo dedicamos nuestra atención a la familia de los métodos de un paso desarrollables en P-series. Dicha familia muy general de métodos incluye a los métodos Runge-Kutta, Runge-Kutta particionados, Runge-Kutta-Nyström, Runge-Kutta multiderivada, Runge-Kutta multiderivada particionados, etc. Estamos principalmente interesados en estudiar los métodos de la familia que sean simplécticos.

Esta memoria comprende dos capítulos, divididos en varias secciones. El Capítulo 1 está dedicado a aspectos generales de los métodos de integración desarrollables en P-series, mientras que el Capítulo 2 se centra en los métodos simplécticos.

Las Secciones 1.1-1.4 son de carácter preliminar; presentan el concepto de P-serie y algunos resultados básicos. El tema central de la Sección 1.5 es la composición de P-series; aunque el resultado principal de esta sección no es nuevo, la forma de demostrarlo es completamente original. También son nuevas las formulas recursivas que obtenemos en relación con la composición de P-series. En la Sección 1.6 llegamos a la formulación tradicional de la composición de P-series (Hairer-Nørset-Wanner [12]) a partir de la formulación alternativa obtenida en la sección anterior. En la Sección 1.7 estudiamos el análisis regresivo del error de métodos desarrollables en P-series, demostrando de forma novedosa resultados aparecidos en la literatura reciente [18]. En la Sección 1.8 introducimos una familia general de métodos desarrollables en P-series que incluyen a los métodos Runge-Kutta multiderivada particionados.

Tras dar una breve introducción a los sistemas Hamiltonianos y métodos simplécticos en la Sección 2.1, dedicamos la Sección 2.2 a una teoría general en torno a los métodos desarrollables en P-series que son simplécticos para sistemas Hamiltonianos generales. En la Subsección 2.2.1 obtenemos condiciones necesarias y suficientes para que una P-serie dada sea simpléctica, condiciones que generalizan un resultado análogo anteriormente obtenido por Calvo y Sanz-Serna [7] para el caso no particionado (B-series). En la Subsección 2.2.2 introducimos un nuevo tipo de grafos orientados, los H-árboles, los cuales juegan, para métodos particionados simplécticos,

un papel análogo al que juegan los P-árboles para los métodos particionados generales. Seguidamente, se obtienen fórmulas recursivas que permiten contar el número de condiciones independientes necesarias para asegurar un orden de consistencia dado para métodos particionados simplécticos. Este número es más bajo que para métodos particionados generales, pues como ocurre en otras situaciones, el carácter simpléctico actúa como una hipótesis simplificadora de las condiciones de orden. En la Subsección 2.2.4 se introducen los Hamiltonianos elementales de H-árboles y las H-series, que juegan un papel fundamental en las subsecciones restantes. El estudio regresivo del error de los métodos de P-serie simplécticos se acomete en la Subsección 2.2.5. El resultado principal es que, para tales métodos, la solución numérica coincide con la solución exacta de un problema Hamiltoniano vecino del que se está resolviendo. En la Subsección 2.2.6 desarrollamos una teoría de composición de H-series con P-series, la cual está íntimamente relacionada con la composición de P-series. Como es sabido, cada transformación simpléctica puede ser descrita por medio de una función escalar, llamada función generatriz. En la Subsección 2.2.7 estudiamos como sacar partido de las funciones generatrices de los métodos simplécticos a la hora de estudiar sus condiciones de orden. La Subsección 2.2.8 concluye la Sección 2.2 mediante la aplicación de la teoría general desarrollada al caso particular de que el método fuese no particionado, es decir tratase igual a las variables p y q . Las Sección 2.3 y 2.4 son análogas a la 2.2, pero referidas a dos casos en que el sistema Hamiltoniano que se integra es de un tipo particular, o bien separable $H(p, q) = T(p) + V(q)$ o bien de tipo 'Nyström' $H(p, q) = p^T p/2 + V(q)$. Finalmente, en la Sección 2.5 se estudian, tanto para el caso de sistemas Hamiltonianos generales como para sistemas Hamiltonianos separables, los métodos de P-serie multietapa introducidos en la Sección 1.8 que sean simplécticos. Como caso particular, se estudian las condiciones para que los métodos Runge-Kutta multiderivada particionados sean simplécticos, demostrándose la inexistencia en el caso de sistemas Hamiltonianos generales de tales métodos, generalizando el resultado análogo para el caso no particionado publicado recientemente junto con otros autores [11].

Indice

1	Métodos desarrollables en P-series	1
1.1	Introducción	1
1.2	Conceptos previos de teoría de grafos	2
1.2.1	Grafos	2
1.2.2	Arboles etiquetados libres y árboles etiquetados	4
1.2.3	Arboles libres y árboles	7
1.2.4	P-árboles etiquetados	9
1.2.5	P-árboles	11
1.2.6	Funciones especiales sobre P-árboles	14
1.3	Diferenciales elementales y P-series	17
1.4	Condiciones de orden	19
1.5	Composición de P-series	23
1.5.1	Diferenciales elementales generalizadas y P-series generalizadas	23
1.5.2	Resultados previos	24
1.5.3	Teorema de composición de P-series	27
1.5.4	Propiedades de los coeficientes $c^{(z)}(t)$	29
1.6	Enfoque alternativo de la composición de P-series	34
1.6.1	Pares etiquetados de P-árboles y pares de P-árboles	34
1.6.2	Formulación alternativa del teorema de composición de P-series	39
1.7	Análisis regresivo de métodos de integración desarrollables en P-series	42
1.8	Métodos de P-series multietapa	48
1.8.1	Condiciones de orden	48
1.8.2	Métodos Runge-Kutta multiderivada particionados	50

2	Métodos simplécticos desarrollables en P-series	53
2.1	Introducción	53
2.2	Métodos simplécticos particionados para sistemas Hamiltonianos generales	54
2.2.1	P-series canónicas	54
2.2.2	H-árboles	65
2.2.3	Número de condiciones de orden de métodos particionados canónicos	74
2.2.4	Hamiltonianos elementales de H-árboles y H-series	77
2.2.5	Análisis regresivo de métodos canónicos	82
2.2.6	Composición de H-series con P-series	84
2.2.7	Funciones generatrices	88
2.2.8	Métodos simplécticos no particionados	102
2.3	Métodos simplécticos particionados para sistemas Hamiltonianos separables	112
2.3.1	PS-series canónicas	112
2.3.2	Simplificación de las condiciones de orden	114
2.3.3	Hamiltonianos elementales de árboles bicolors	116
2.3.4	HS-series	117
2.3.5	Análisis regresivo	118
2.3.6	Composición de HS-series con PS-series	119
2.3.7	Teoría canónica del orden	121
2.4	Métodos simplécticos para sistemas Hamiltonianos de tipo Nyström	124
2.4.1	SN-series canónicas	124
2.4.2	Simplificación de las condiciones de orden	131
2.4.3	Hamiltonianos elementales de SN-árboles libres	132
2.4.4	HSN-series	133
2.4.5	Teoría canónica del orden	135
2.5	Métodos de P-serie multietapa canónicos	138
2.5.1	Condiciones de canonicidad suficientes para métodos de P-series multietapa	138



2.5.2	Inexistencia de métodos Runge-Kutta multiderivada particio- nados canónicos	143
2.5.3	Condiciones de canonicidad suficientes para métodos de P-series multietapa aplicados a sistemas Hamiltonianos separables . . .	150
2.5.4	Métodos Runge-Kutta multiderivada particionados simplécti- cos para sistemas Hamiltonianos separables	153

Capítulo 1

Métodos desarrollables en P-series

1.1 Introducción

Dado un sistema diferencial de dimensión D

$$y' = f(y), \quad (1)$$

vamos a estudiar métodos que lo integren de forma particionada, esto es, que traten de modo distinto las D ecuaciones escalares que lo forman. Tales métodos son de interés si, por ejemplo, en (1) coexisten ecuaciones stiff con otras que no lo son ([13] p. 171).

Dada una partición $\mathcal{J}_1, \dots, \mathcal{J}_P$, $P \geq 1$, de $\mathcal{J} = \{1, \dots, D\}$, reescribimos el sistema (1) en la forma

$${}^a y' = {}^a f(y), \quad a = 1, \dots, P, \quad (2)$$

donde, para cualquier vector $v = (v^I)_{I=1}^D$ de R^D , denotamos ${}^a v = (v^I)_{I \in \mathcal{J}_a}$. Si $P = 1$ estamos en el caso no particionado. Por sencillez supondremos que f está definida y es indefinidamente derivable con continuidad en todo R^D .

Estudiaremos métodos para resolver el sistema particionado (2) que se puedan desarrollar formalmente como P-series. La teoría de P-series fue introducida por Hairer en [17], y es una generalización de la teoría de B-series, introducida a su vez por Hairer y Wanner en [15].

1.2 Conceptos previos de teoría de grafos

En esta sección introduciremos una serie de conceptos generales de la teoría de grafos, prestando especial atención a los aspectos de los cuales haremos uso más adelante. En particular, revisaremos los conceptos de árbol y P-árbol.

El uso del concepto de árboles como herramienta de estudio de las condiciones de orden de métodos de integración de sistemas de ecuaciones diferenciales es debido a Butcher [3].

El concepto de P-árboles fue introducido por Hairer en [17], en el contexto del estudio de las condiciones de orden de métodos de integración de sistemas diferenciales particionados.

1.2.1 Grafos

Un *grafo etiquetado* es un conjunto finito V junto con un subconjunto E del conjunto de pares (no ordenados) de elementos distintos de V . Los elementos de V son los *vértices* del grafo etiquetado, y los pares de E son las *aristas*. Una *arista adyacente* a un vértice i del grafo etiquetado es toda arista de la forma $\{i, j\}$. Se dice que un grafo etiquetado es de *orden* n si tiene n vértices.

Por ejemplo, (V, E) , donde $V = \{1, 2, 3, 4\}$ y $E = \{\{1, 2\}, \{2, 4\}, \{3, 2\}, \{4, 1\}\}$, es un grafo etiquetado de orden 4.

Los grafos etiquetados son representados gráficamente por medio de un diagrama en el que a cada vértice se le asocia, por medio de una etiqueta, un punto, al cual llamaremos *nodo*, y donde cada arista $\{i, j\}$ es representada por una línea que une el nodo correspondiente al vértice i con el correspondiente al vértice j . En la Figura 1 puede verse la representación grafica del grafo etiquetado del ejemplo anterior.

Se dice que dos grafo etiquetados (V_1, E_1) y (V_2, E_2) son *equivalentes*, si son del mismo orden y existe una biyección $s : V_1 \rightarrow V_2$, tal que se verifica que $\{i, j\} \in E_1$ si y solo si $\{s(i), s(j)\} \in E_2$. Un *grafo* es una clase de equivalencia de grafos etiquetados. Gráficamente, dos grafos etiquetados son equivalentes si puede obtenerse del diagrama correspondiente a uno de ellos el correspondiente al otro cambiando las etiquetas. De este modo, un grafo es representado gráficamente de forma natural por medio del

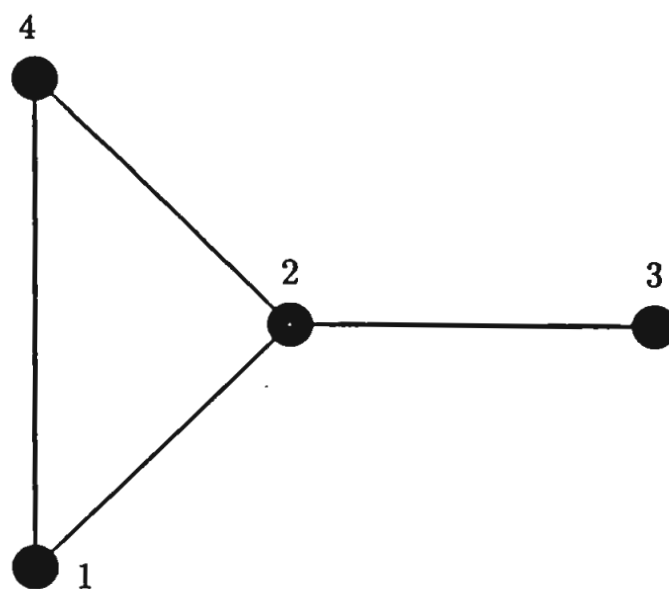


Figura 1: Representación gráfica de un grafo etiquetado

diagrama que se obtiene al suprimir las etiquetas en la representación gráfica de cualquier grafo etiquetado que lo represente.

Se dice que el grafo etiquetado (V', E') es un *subgrafo etiquetado* del grafo etiquetado (V, E) , si $V' \subset V$ y $E' \subset E$. En particular, si $E' = \{\{i, j\} \in E / i, j \in V'\}$, se dice que (V', E') es el *subgrafo etiquetado de (V, E) inducido por V'* .

Dos vértices i, j de un grafo etiquetado (V, E) son *contiguos* si $\{i, j\} \in E$. Un *circuito* del grafo etiquetado es una secuencia de aristas $\{i_1, i_2\}, \dots, \{i_{n-1}, i_n\} \in E$ que son distintas dos a dos; y se dice que dicho circuito *conecta* a los vértices i_1 y i_n . En ese caso, se dice que los vértices i_1 y i_n del grafo etiquetado están conectados entre sí. Un *ciclo* es un circuito que conecta un vértice consigo mismo. En el ejemplo de la Figura 1, las aristas $\{1,2\}, \{2,4\}, \{4,1\}$ forman un ciclo.

Se dice que un grafo etiquetado es *conexo*, si para cada par de vértices distintos, existe al menos un circuito que los conecta. Es claro que el grafo etiquetado de la Figura 1 es conexo.

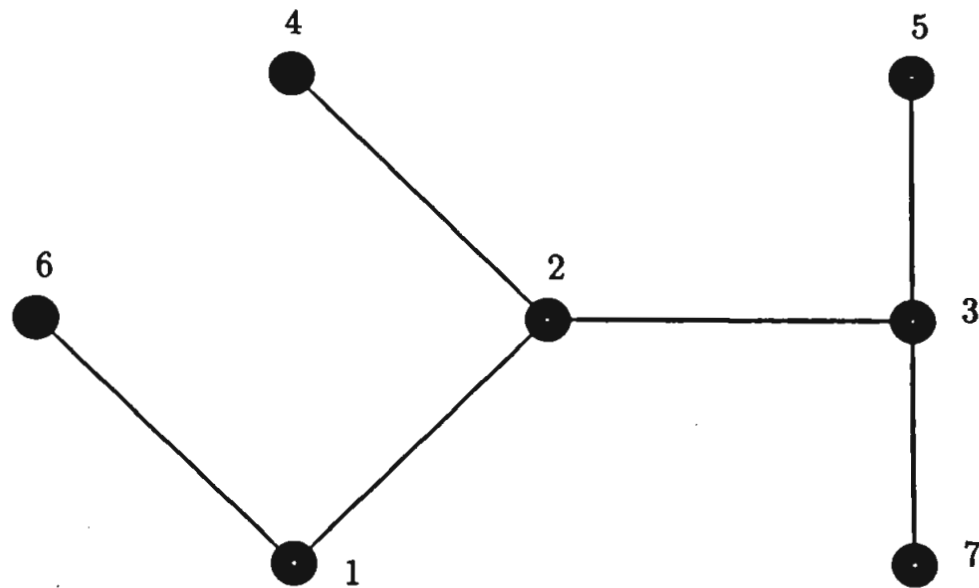


Figura 2: Ejemplo de árbol etiquetado libre

1.2.2 Árboles etiquetados libres y árboles etiquetados

Un *árbol etiquetado libre* es un grafo etiquetado conexo que no tiene ciclos, es decir, tal que para cada par de vértices distintos existe un único circuito que los conecta.

Por ejemplo, el grafo etiquetado de la Figura 1 no es un árbol etiquetado libre, y, sin embargo, el de la Figura 2 sí lo es. En particular, el grafo etiquetado de orden 0 es un árbol etiquetado libre.

Un *árbol etiquetado* es un árbol etiquetado libre en el que se destaca un vértice, llamado *raíz*. Es decir, (V, E, i) es un árbol etiquetado, si (V, E) es un árbol etiquetado libre e $i \in V$. En ese caso, se dice que (V, E) es el árbol etiquetado libre *inducido* por (V, E, i) . Así, los conceptos definidos para grafos etiquetados en la subsección anterior serán aplicables para árboles etiquetados a través de los árboles etiquetados libres inducidos correspondientes. Incluimos dentro del conjunto de árboles etiquetados un árbol etiquetado de orden 0, al que llamamos árbol etiquetado vacío, y cuyo árbol etiquetado libre inducido es el árbol etiquetado libre de orden 0.

Sea lt un árbol etiquetado cuya raíz es el vértice i , y $j \neq i$ un vértice de lt . Por definición de árbol etiquetado libre, existe un único circuito que conecta i con j . Se dice que el vértice k es *padre* de j si $\{j, k\}$ es una arista del circuito que conecta

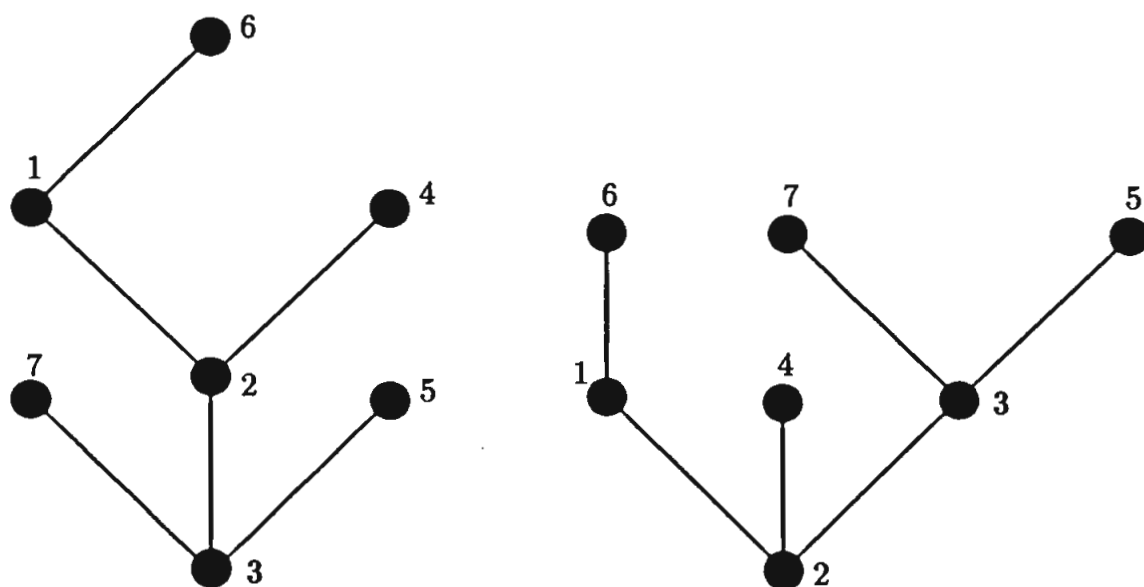


Figura 3: Representación gráfica de árboles etiquetados

a i y j . En ese caso se dice que el vértice j es *hijo* del vértice k . La raíz es por tanto el único vértice que no tiene padre. Por otro lado, llamaremos *vértices finales* a los vértices que no tienen hijos. Decimos que un vértice j de un árbol etiquetado es *descendiente de primera generación* del vértice k si es hijo de k , y para $r \geq 2$, decimos que es *descendiente de r -ésima generación* de k si es hijo de un descendiente de $(r - 1)$ -ésima generación de k . En general decimos que un vértice es *descendiente* de otro si es descendiente de r -ésima generación para algún $r \geq 1$.

En cuanto a la representación gráfica de los árboles etiquetados, el procedimiento más usual consiste en representar el árbol etiquetado libre inducido de tal forma que, si el vértice i es padre del vértice j , el nodo del diagrama correspondiente a i se encuentra más abajo que el correspondiente a j . De este modo, la raíz queda identificada como el vértice inferior del diagrama. En la Figura 3 pueden verse los diagramas correspondientes a los dos árboles etiquetados que se obtienen a partir del árbol etiquetado libre de la Figura 2, fijando, por un lado, el vértice 2 como raíz y, por otro, el vértice 3 como raíz.

Dados un árbol etiquetado $lt = (V, E, i)$ y un vértice j de lt , sea V_j el conjunto

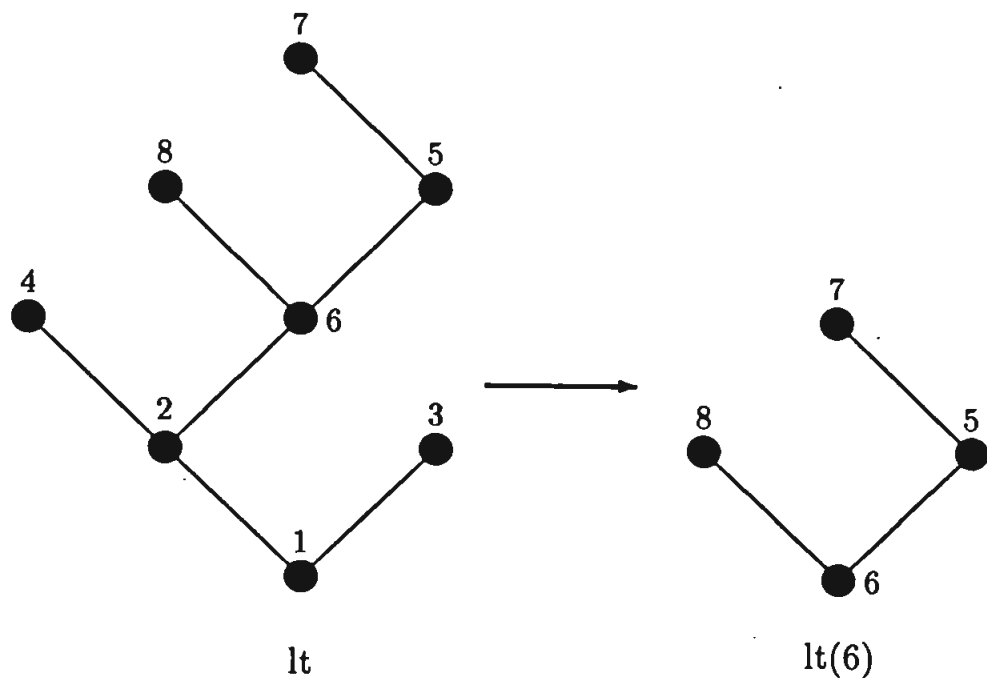


Figura 4: Construcción de $lt(6)$ a partir de lt

formado por el vértice j y todos sus descendientes. Se deduce que el subgrafo etiquetado de (V, E) inducido por V_j es un árbol etiquetado libre. Denotaremos por $lt(j)$ al árbol etiquetado que resulta de identificar al vértice j como raíz en el árbol etiquetado libre inducido por V_j , y diremos que es el *subárbol etiquetado de lt correspondiente al vértice j* . En particular, si j es la raíz de lt , se tiene que $lt(j) = lt$.

En la Figura 4 se ilustra con un ejemplo la construcción de $lt(j)$ a partir de un árbol etiquetado lt .

Todo árbol etiquetado lt puede ser representado de forma recursiva a partir de árboles etiquetados de orden menor como sigue: Denotaremos por ${}^i\tau$ al árbol etiquetado cuyo único vértice i es la raíz. Sea lt un árbol etiquetado de orden ≥ 2 , y sean i su raíz y j_1, \dots, j_m los hijos de i . El árbol etiquetado lt queda determinado de forma única a partir del vértice i y de la familia de árboles $\{lt(j_1), \dots, lt(j_m)\}$. Recíprocamente, toda familia de árboles $\{lt_1, \dots, lt_m\}$ con conjuntos de vértices V_1, \dots, V_m disjuntos entre sí, determinan, junto con $i \notin V_1, \dots, V_m$, un único árbol etiquetado, que denotaremos por ${}^i[lt_1, \dots, lt_m]$.

Por ejemplo, el árbol etiquetado lt de la Figura 4 puede ser representado como

$$lt = {}^1[{}^2[{}^4\tau, {}^6[{}^8\tau, {}^5[{}^7\tau]]], {}^3\tau] \quad (3)$$

1.2.3 Árboles libres y árboles

Se deduce fácilmente que todo grafo etiquetado equivalente a un árbol etiquetado libre es asimismo un árbol etiquetado libre. Se dice que un *árbol libre* es una clase de equivalencia de árboles etiquetados libres respecto de la relación de equivalencia definida arriba. Para cada árbol libre ω se define su *orden* $n(\omega)$ como el orden de los árboles etiquetados libres que lo representan, es decir, atendiendo a su representación gráfica, el número de nodos que tiene. Denotamos por FT al conjunto de árboles libres, y por \overline{FT} al conjunto de árboles libres de orden ≥ 1 .

En la Figura 5 pueden verse representados los árboles libres de orden ≤ 5 .

Dos árboles etiquetados (V_1, E_1, i_1) y (V_2, E_2, i_2) son *equivalentes* si existe una biyección $s : V_1 \rightarrow V_2$, tal que $s(i_1) = i_2$ y $\{j, k\} \in E_1$ si y solo si $\{s(j), s(k)\}$, es decir, que transforma la raíz de uno en la raíz del otro y establece una biyección entre las aristas de uno y las aristas del otro. Decimos que el árbol etiquetado vacío es equivalente sólo a sí mismo.

Un *árbol* es una clase de equivalencia de árboles etiquetados.

Cada árbol puede ser representado de forma natural por medio del diagrama que resulta al suprimir las etiquetas en el diagrama correspondiente a cualquiera de los árboles etiquetados que lo representan.

Para cada árbol t , definimos su *orden* $n(t)$ como el orden de cualquiera de los árboles etiquetados que lo representan, es decir, el número de nodos que aparecen en su representación gráfica. Denotamos por \emptyset al árbol de orden 0. Denotamos por T al conjunto de árboles, y por \overline{T} a $T - \{\emptyset\}$.

En la Figura 6 se muestran los árboles de \overline{T} de orden ≤ 4 .

Se puede demostrar la siguiente caracterización de equivalencia de árboles etiquetados: Dos árboles etiquetados $t = {}^i[lt_1, \dots, lt_m]$ y $z = {}^j[lz_1, \dots, lz_n]$ son equivalentes si y solo si $m = n$ y existe una permutación p de $\{1, \dots, m\}$ tal que para $l = 1, \dots, m$ el árbol etiquetado lt_l es equivalente a $lz_{p(l)}$.

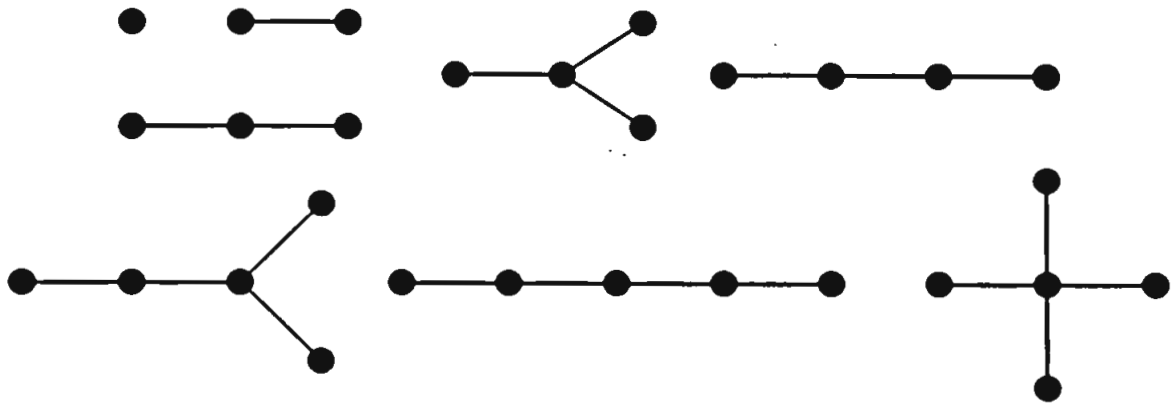


Figura 5: Árboles de orden ≤ 5

Como consecuencia de dicha caracterización, se tiene que todo árbol t de orden ≥ 2 puede ser representado de forma recursiva en términos de árboles de orden menor. En efecto, dada una familia de árboles $\{t_1, \dots, t_m\}$, sean lt_1, \dots, lt_m árboles etiquetados con conjuntos de vértices disjuntos V_1, \dots, V_m que representan respectivamente a t_1, \dots, t_m , y sea $i \notin V_1 \cup \dots \cup V_m$. El árbol etiquetado $[lt_1, \dots, lt_m]$ representa al mismo árbol independientemente de la elección de tales lt_1, \dots, lt_m y de i ; se denota a dicho árbol por $[t_1, \dots, t_m]$. Además, para cada árbol t de orden ≥ 2 , existe una única familia de árboles $\{t_1, \dots, t_m\}$ tal que $t = [t_1, \dots, t_m]$. Atendiendo a la representación gráfica de los árboles, los t_1, \dots, t_m consisten en los árboles que resultan de suprimir la raíz de $t = [t_1, \dots, t_m]$ y sus arcos adyacentes. Por ejemplo,

$$\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array} = \left[\bullet, \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array} \right].$$

Denotaremos por τ al único árbol de orden 1. De esta forma, tenemos por ejemplo, que el árbol t correspondiente al árbol etiquetado lt de (3) es $[[\tau, [\tau, [\tau]]], \tau]$. Nótese que la representación de t resulta de suprimir los superíndices correspondientes a los vértices en la representación de lt .

Para abreviar, se denota por $[t_1^{r_1}, \dots, t_m^{r_m}]$ al árbol

$$\overbrace{[t_1, \dots, t_1]}^{r_1}, \overbrace{[t_2, \dots, t_2]}^{r_2}, \dots, \overbrace{[t_m, \dots, t_m]}^{r_m}.$$

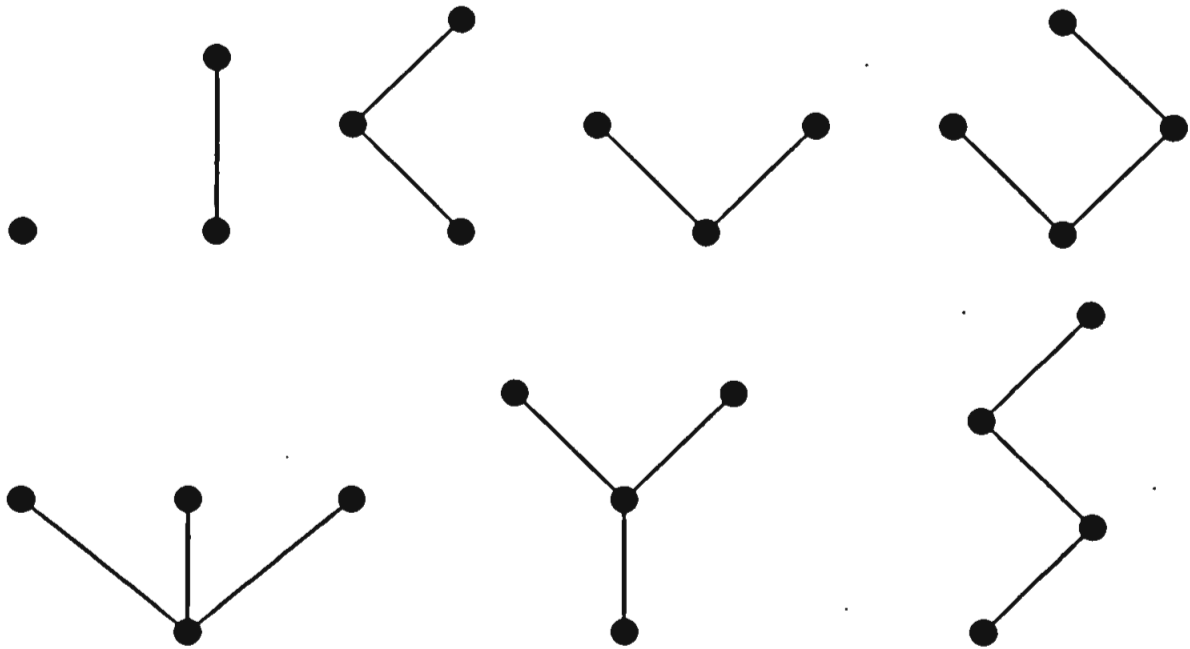


Figura 6: Árboles de orden ≤ 4

De este modo, los árboles de la Figura 6 pueden ser representados (siguiendo el orden de lectura) respectivamente como τ , $[\tau]$, $[[\tau]]$, $[\tau^2]$, $[\tau, [\tau]]$, $[\tau^3]$, $[[\tau^2]]$, $[[[\tau]]]$.

La siguiente operación, definida por Butcher, ver por ejemplo [4], permite representar de forma muy cómoda, aunque no única, cualquier árbol de orden ≥ 2 en términos de dos árboles de orden ≥ 1 adecuados: Dados $t, z \in T$ se define $t \cdot z$ como el árbol que resulta de conectar las raíces de t y z tomando como raíz la de t ; es decir, $\tau \cdot t := [t]$, y $[t_1, \dots, t_m] \cdot z := [t_1, \dots, t_m, z]$.

1.2.4 P-árboles etiquetados

Fijado un entero $P \geq 1$, se dice que un P -árbol etiquetado es un par (lt', lt'') , donde lt' es un árbol etiquetado y lt'' es una aplicación $lt'' : V \rightarrow \{1, \dots, P\}$, donde V es el conjunto de vértices de lt' . Diremos que lt' es el árbol etiquetado *inducido* por el P -árbol etiquetado $lt = (lt', lt'')$.

Aplicaremos a los P -árboles etiquetados los conceptos tales como vértices, aristas, orden, raíz, vértice padre, vértice hijo, vértices finales y descendientes, heredándolos

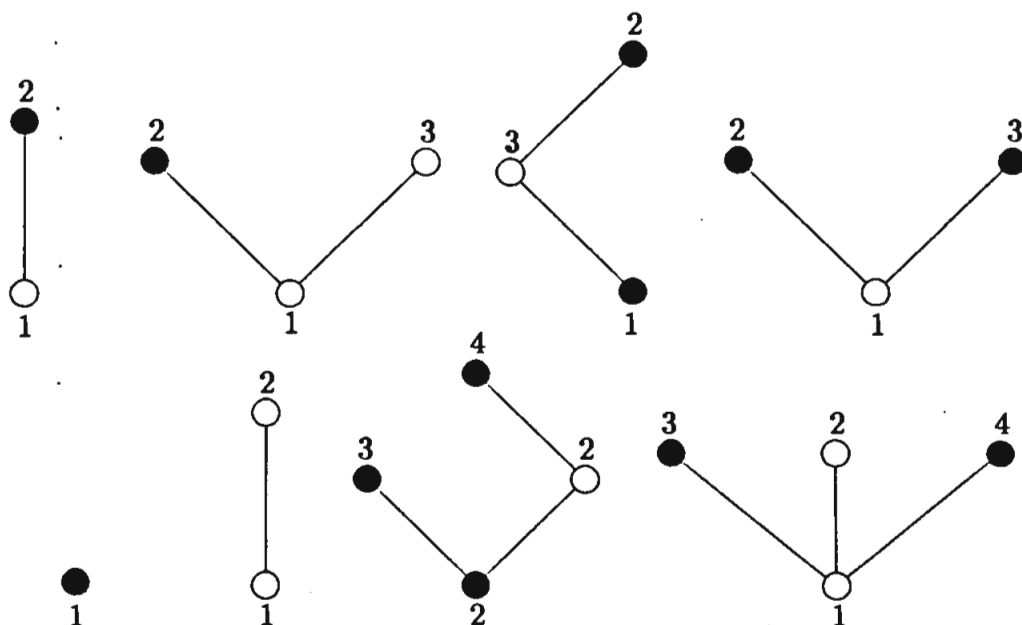


Figura 7: Representación gráfica de varios P-árboles etiquetados

de los árboles inducidos correspondientes. Por otro lado, dado un vértice j de un P-árbol etiquetado $lt = (lt', lt'')$, decimos que $lt''(j)$ es el *tipo* del vértice j , o equivalentemente, que el vértice j es de tipo $lt''(j)$.

Nótese que el concepto de P-árbol etiquetado generaliza al de árbol etiquetado, de tal manera que los árboles etiquetados pueden ser considerados como P-árboles etiquetados para el caso particular en que $P = 1$.

Los P-árboles etiquetados son representados gráficamente haciendo uso del diagrama del árbol etiquetado inducido correspondiente, en donde los vértices de distinto tipo $(1, \dots, P)$ son representados por nodos de distinto color ($color_1, \dots, color_P$). En lo que sigue, representaremos los vértices de tipo 1 con nodos negros, y los vértices de tipo 2 con nodos blancos.

En la Figura 7 se muestran los diagramas correspondientes a varios P-árboles etiquetados.

Dado un P-árbol etiquetado $lt = (lt', lt'')$, y dado un vértice j del mismo, de forma análoga que para árboles etiquetados, denotamos por $lt(j)$ al P-árbol etiquetado $(lt(j)', lt(j)'')$, donde $lt(j)' = lt'(j)$, y la aplicación $lt(j)''$ es la restricción de lt'' al

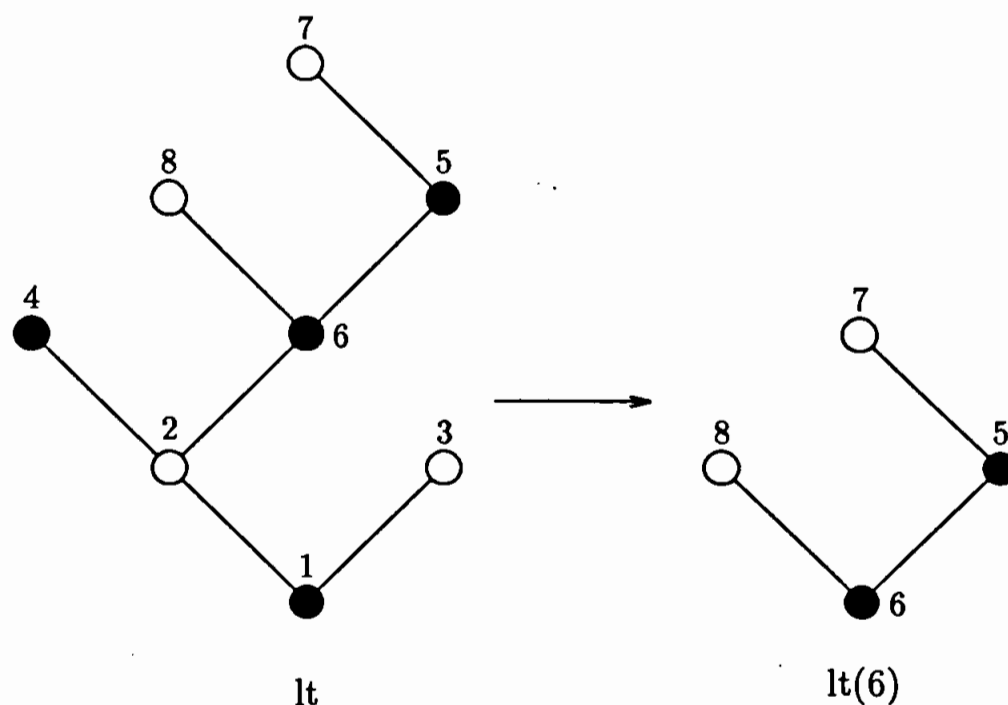


Figura 8: Construcción de $lt(6)$ a partir de lt

conjunto formado por el vértice j y todos sus descendientes en lt . En la Figura 8 se ilustra con un ejemplo la construcción del P-árbol etiquetado $lt(j)$ a partir de lt .

Análogamente que en el caso particular de árboles etiquetados, se tiene que todo P-árbol etiquetado lt con raíz i de tipo a ($1 \leq a \leq P$), queda determinado de forma única por la familia de P-árboles etiquetados $\{lt(j_1), \dots, lt(j_m)\}$, donde j_1, \dots, j_m son los vértices hijos de i en lt . Denotaremos dicho P-árbol etiquetado por $lt = {}^i_a[lt(j_1), \dots, lt(j_m)]$.

1.2.5 P-árboles

Sean dos P-árboles etiquetados $lt = (lt', lt'')$ y $lz = (lz', lz'')$, donde $lt' = (V_1, E_1, i_1)$ y (V_2, E_2, i_2) , se dice que lt y lz son *equivalentes* si existe una biyección $s : V_1 \rightarrow V_2$ que verifica las siguientes condiciones:

- $s(i_1) = i_2$.
- $\{j, k\} \in E_1$ si y solo si $\{s(j), s(k)\} \in E_2$.

- Para todo vértice j , $lt''(j) = lz''(s(j))$.

En el caso particular del P-árbol etiquetado de orden 0, decimos que sólo es equivalente a sí mismo.

Un *P-árbol* es una clase de equivalencia de P-árboles etiquetados. Para cada P-árbol t , se define su *orden* $n(t)$ como el orden de los P-árboles etiquetados que lo representan. Denotaremos por \emptyset al P-árbol de orden 0. Denotamos por TP al conjunto de P-árboles, y por \overline{TP} a $TP - \{\emptyset\}$. Dado $t \in \overline{TP}$, denotamos por $w(t)$ al tipo de la raíz de los P-árboles etiquetados que lo representan. Definimos mismo TP^a ($1 \leq a \leq P$), como el conjunto de P-árboles de \overline{TP} tales que $w(t) = a$.

Dado un P-árbol t , decimos que el P-árbol z es un *P-subárbol* de t , si dado un P-árbol etiquetado lt representante de t , existe un vértice i de lt tal que el P-árbol etiquetado $lt(i)$ es un representante del P-árbol z .

Dado un P-árbol t , definimos el árbol t' *inducido* por t , como el árbol al que representa el árbol etiquetado inducido de cualquiera de los P-árboles etiquetados que representan a t . Es claro que dicha definición es consistente, ya que, si dos P-árboles son equivalentes, entonces los árboles etiquetados inducidos, también lo son.

En cuanto a la representación gráfica de los P-árboles de orden ≥ 1 , se observa que dos P-árboles etiquetados son equivalentes si puede obtenerse el diagrama correspondiente a uno de ellos cambiando las etiquetas de los nodos en el diagrama del otro. Por tanto, los P-árboles etiquetados pueden ser representados de forma natural por el diagrama que se obtiene de suprimir las etiquetas del diagrama correspondiente a cualquiera de los P-árboles etiquetados que lo representan.

De forma análoga que en el caso particular de árboles etiquetados, se tiene que dos P-árboles etiquetados $t = {}_a^i[lt_1, \dots, lt_m]$ y $z = {}_b^j[lz_1, \dots, lz_n]$, son equivalentes si y solo si $m = n$, $a = b$, y existe una permutación p de $\{1, \dots, m\}$ tal que para $l = 1, \dots, m$ el P-árbol etiquetado lt_l es equivalente a $lz_{p(l)}$. De ello, también de forma análoga que para árboles, se deduce que cada P-árbol t de orden ≥ 2 puede ser determinado de forma única por el tipo $a = w(t)$ de su raíz y una familia de P-árboles $\{t_1, \dots, t_m\}$, tales que, si t es representado por un P-árbol etiquetado $t = {}_a^i[lt_1, \dots, lt_m]$, para $l = 1, \dots, m$, lt_l representa a t_l . Se denota por ${}_a[t_1, \dots, t_m]$ a dicho P-árbol t , que gráficamente consiste en el P-árbol que se obtiene de conectar con sendas aristas,

un nodo de tipo a , la raíz de t , con la raíz de cada uno de los P-árboles t_1, \dots, t_m . Denotamos por τ_a ($1 \leq a \leq P$) al P-árbol de orden 1 de tipo a . De este modo, todo P-árbol puede ser representado de forma recursiva, sin necesidad de recurrir a los P-árboles etiquetados.

Generalizando la notación presentada previamente para árboles, podremos escribir de forma abreviada el P-árbol

$${}_a[\overbrace{t_1, \dots, t_1}^{r_1}, \overbrace{t_2, \dots, t_2}^{r_2}, \dots, \overbrace{t_m, \dots, t_m}^{r_m}]$$

como ${}_a[t_1^{r_1}, \dots, t_m^{r_m}]$.

Por otra parte, generalizando la notación de Butcher, dados $t, z \in \overline{TP}$, definimos el P-árbol $t \cdot z$, tal que $\tau_a \cdot z = {}_a[z]$, y si $t = {}_a[t_1, \dots, t_m]$, entonces $t \cdot z = [t_1, \dots, t_m, z]$. De este modo, se tiene que $t = {}_a[t_1, \dots, t_m] = \tau_a \cdot t_1 \cdots t_m$ donde en ausencia de paréntesis se entiende que el producto se ejecuta de izquierda a derecha. Es claro que para todo P-árbol t de orden ≥ 2 , existen $u, v \in \overline{TP}$ tales que $t = u \cdot v$, pero en general tales u y v no son únicos. Por conveniencia, extendemos dicha operación a $\overline{TP} \times TP$, definiendo para cada $t \in \overline{TP}$, $t \cdot \emptyset := t$.

Decimos que el P-árbol t incluye a z , o equivalentemente que z es parte de t , y escribimos $t \supset z$ ó $z \subset t$, si se verifica que, $t = z$, o $z = \emptyset$, o se puede obtener z de t suprimiendo algunos nodos de t distintos de la raíz y todos sus descendientes, junto con las aristas adyacentes a ellos. Si z no es parte de t , pondremos $z \not\subset t$. Aunque dicho concepto puede ser definido de forma rigurosa haciendo uso de P-árboles etiquetados, evitaremos los detalles técnicos necesarios para ello. Alternativamente, dicho concepto puede ser definido, también de forma rigurosa, por medio de la representación recursiva de P-árboles como sigue:

Definición 1.2.1 Dados $z, t \in TP$, $z \subset t$ si se verifica alguna de las siguientes condiciones:

- $z = \emptyset$.
- $z = \tau_a$ y $w(t) = a$ ($1 \leq a \leq P$).
- $z = {}_a[z_1, \dots, z_r]$, $t = {}_a[t_1, \dots, t_m]$ con $m \geq r$, y $z_l \subset t_l$ para $l = 1, \dots, r$.

1.2.6 Funciones especiales sobre P-árboles

Supongamos fijado $P \leq 1$. Definimos \overline{LTP} por el conjunto de P-árboles etiquetados con conjunto de vértices de la forma $\{1, \dots, n\}$, para algún $n \geq 1$. Denotamos asimismo por LTP al conjunto que resulta de incluir en \overline{LTP} al P-árbol etiquetado de orden 0. En el caso particular en que $P = 1$, LTP es un conjunto de árboles etiquetados, que denotaremos por LT .

Decimos que un P-árbol etiquetado de LTP es un P-árbol *monótomamente etiquetado* si verifica que, si el vértice i es padre del vértice j , entonces $i < j$. Denotamos por $MLTP$ al conjunto de P-árboles monótomamente etiquetados, y por $MLTP_n$ al conjunto de P-árboles monótomamente etiquetados de orden n .

Se define, para cada $t \in TP$, el entero positivo $\beta(t)$ (respectivamente $\alpha(t)$) como el número de P-árboles etiquetados (monótomamente etiquetados) de LTP que representan al P-árbol t .

Dados dos P-árboles $t = {}_a[t_1, \dots, t_m]$ y z , definimos $k(t, z)$ como el número de P-árboles idénticos a z que hay en la familia de P-árboles $\{t_1, \dots, t_m\}$. Por convenio, para todo $t \in \overline{TP}$, $k(t, \emptyset) = 1$ y $k(\tau_a, t) = 0$.

El siguiente lema nos permite calcular los $\alpha(t)$ y $\beta(t)$ de forma recursiva:

Lema 1.2.1 Para todo $t, z \in \overline{TP}$ se tiene que

$$\beta(t \cdot z) = \frac{1}{k(t \cdot z, z)} \binom{n(t \cdot z)}{n(z)} \beta(t) \beta(z), \quad (4)$$

$$\alpha(t \cdot z) = \frac{1}{k(t \cdot z, z)} \binom{n(t \cdot z) - 1}{n(z)} \alpha(t) \alpha(z). \quad (5)$$

Demostración: Es claro que por cada P-árbol etiquetado (respectivamente, monótomamente etiquetado) de LTP representante de t , cada P-árbol etiquetado (monótomamente etiquetado) de LTP representante de z , y cada parte de $n(z)$ elementos de $\{1, \dots, n(t)\}$ (respectivamente $\{2, \dots, n(t)\}$), se puede generar de forma natural un P-árbol etiquetado (respectivamente monótomamente etiquetado) de LTP que represente a $t \cdot z$. En cambio cada árbol etiquetado (monótomamente etiquetado) de LTP

representante de $t \cdot z$, puede ser generado de ese modo de $k(t \cdot z, z)$ formas distintas.
 \square

Por otra parte se define para cada $t \in TP$ la *densidad* $\gamma(t)$ de t , de forma que $\gamma(\emptyset) = \gamma(\tau_a) = 1$, y si $t = {}_a[t_1, \dots, t_m]$, entonces $\gamma(t) = n(t)\gamma(t_1) \cdots \gamma(t_m)$. Se sigue que

$$\frac{\gamma(t \cdot z)}{n(t) + n(z)} = \frac{\gamma(t)\gamma(z)}{n(t)} \quad (6)$$

lo que implica que $\beta(t) = \gamma(t)\alpha(t)$.

Por último, se define para cada $t \in TP$ la *simetría* $\sigma(t)$ de t , como el orden de su grupo de simetrías ([4], Definición 140F), es decir, el número de permutaciones distintas de los vértices $1, \dots, n(t)$ que transforman un P-árbol etiquetado de LTP representante de t en sí mismo. Es fácil ver que ese número de permutaciones es independiente del P-árbol etiquetado representante de t elegido, de modo que se tiene que para cada $t \in TP$

$$n(t)! = \sigma(t)\beta(t) = \sigma(t)\alpha(t)\gamma(t), \quad (7)$$

De ahí, junto con (4) se tiene el siguiente resultado que nos permite calcular los $\sigma(t)$ de forma recursiva.

Lema 1.2.2 *Para cada $t, z \in \overline{TP}$*

$$\sigma(t \cdot z) = k(t \cdot z, z)\sigma(t)\sigma(z) \quad (8)$$

En la Tabla 1 se muestran los valores de $\gamma(t), \alpha(t), \beta(t), \sigma(t)$ de los P-árboles de orden ≤ 4 , para el caso en que $P = 1$, es decir, para árboles. En cuanto al caso en que $P = 2$, los valores correspondientes a P-árboles de TP^1 de orden ≤ 3 se encuentran en la Tabla 2.

Tabla 1




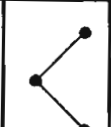
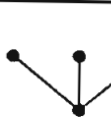





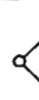




t								
$n(t)$	1	2	3	3	4	4	4	4
$\gamma(t)$	1	2	3	6	4	8	12	24
$\alpha(t)$	1	1	1	1	1	3	1	1
$\beta(t)$	1	2	3	6	4	24	12	24
$\sigma(t)$	1	1	2	1	6	1	2	1

Tabla 2

t										
$n(t)$	1	2	2	3	3	3	3	3	3	3
$\gamma(t)$	1	2	2	3	3	3	6	6	6	6
$\alpha(t)$	1	1	1	1	2	1	1	1	1	1
$\beta(t)$	1	2	2	3	6	3	6	6	6	6
$\sigma(t)$	1	1	1	2	1	2	1	1	1	1



1.3 Diferenciales elementales y P-series

Dado el sistema particionado (2) se define para cada P-árbol t la diferencial elemental $F(t)$ como una función de R^D en R^D . Para $a, b = 1, \dots, P$, e $I \in \mathcal{J}_a$,

$$\begin{aligned} F^I(\emptyset)(y) &= y^I, \\ F^I(\tau_b)(y) &= \delta_{ab} f^I(y), \\ F^I({}_b[t_1, \dots, t_m])(y) &= \delta_{ab} f_{J_1, \dots, J_m}^I(y) \prod_{i=1}^m F^{J_i}(t_i)(y), \end{aligned}$$

donde los subíndices J_i de $f_{J_1, \dots, J_m}^I(y)$ representan derivación parcial respecto de y^{J_i} , y δ_{ab} es la delta de Kronecker. Aquí y en lo que sigue utilizamos el convenio de considerar sumatorios de 1 a D sobre los índices repetidos. Es de notar que la presente definición de diferencial elemental, aunque esencialmente la misma, es formalmente distinta a la definición de [17]. En concreto, si $t \in TP^a$ ($a = 1, \dots, P$) la diferencial elemental definida en [17] coincide con ${}^a F(t)(y)$.

Las diferenciales elementales tienen un papel fundamental en el desarrollo de Taylor de las soluciones del sistema (2), tal como se ve en el siguiente resultado debido a Hairer (Teorema 10 en [17]):

Lema 1.3.1 *Sea $y(x)$ solución de sistema (2), entonces se tiene para cada $n \geq 0$*

$$y^{(n)}(x) = \sum_{\substack{t \in MLTP \\ n(t)=n}} F(t)(y(x)) = \sum_{\substack{t \in TP \\ n(t)=n}} \alpha(t) F(t)(y(x)).$$

Por tanto, el desarrollo (formal) en potencias de h de una solución exacta de (2) es

$$y(x+h) = \sum_{t \in TP} \alpha(t) \frac{h^{n(t)}}{n(t)!} F(t)(y(x)) = \sum_{t \in TP} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} \frac{1}{\gamma(t)} F(t)(y(x)). \quad (9)$$

Motivados por esta expresión, (y como veremos más adelante, con vistas a obtener el desarrollo formal en serie de Taylor de las soluciones aproximadas de distintos métodos de integración del sistema (2)), se introduce la siguiente definición:

Definición 1.3.1 Dada una aplicación $c : TP \rightarrow R$, se define la P-serie asociada al sistema (2) como la serie formal

$$P(c, y) = \sum_{t \in TP} \frac{h^{n(t)}}{n(t)!} \alpha(t) \gamma(t) c(t) F(t)(y) = \sum_{t \in TP} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} c(t) F(t)(y), \quad (10)$$

o equivalentemente como

$$P(c, y) = \sum_{t \in LTP} \frac{h^{n(t)}}{n(t)!} c(t) F(t)(y) = \sum_{t \in LTP} \frac{h^{n(t)}}{n(t)!} \beta(t) c(t) F(t)(y).$$

A los $c(t)$ se les denomina coeficientes de la P-serie.

Es claro por el lema anterior que la solución del sistema (2) con condición inicial $y(x_0) = y_0$, puede ser representada como la P-serie $P(c, y_0)$ con $c(t) = 1/\gamma(t)$ para cada $t \in TP$ (en el sentido de que los coeficientes de Taylor coinciden).

Por otra parte, es de notar que el concepto de P-serie generaliza el concepto de B-serie introducido en [15], de tal forma que las B-series son P-series asociadas al sistema (2) sin particionar, es decir, con $P = 1$. Se denota por $B(c, y)$ a la P-serie $P(c, y)$ para el caso particular en que $P = 1$; es decir, dado $c : T \rightarrow R$,

$$B(c, y) = \sum_{t \in T} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} c(t) F(t)(y) = \sum_{lt \in LT} \frac{h^{n(lt)}}{n(lt)!} c(lt) F(lt)(y).$$

Además, toda P-serie cuyos coeficientes son iguales para todo P-árbol que corresponde al mismo árbol es equivalente a una B-serie. Para probar esto último, basta con observar lo siguiente: Dado un árbol etiquetado lt de LT , se tiene que para cada $y \in R^D$

$$F(lt)(y) = \sum_{\substack{lz \in LTP \\ lz' = lt}} F(lz)(y),$$

donde para cada $lz \in LTP$, lz' es el árbol etiquetado con raíz inducido de lz .

Comparada con las definiciones de B-series y P-series de [15, 17], la definición que aquí hemos introducido incluye $\gamma(t)$ como factor de normalización, de modo que si los coeficientes de una P-serie de [17] son $c(t)$ los coeficientes de la serie formal definida en (10) equivalente a la primera son $c(t)/\gamma(t)$.

1.4 Condiciones de orden

Supongamos que un paso de longitud h , $y_n \rightarrow y_{n+1}$ de un método de un paso para resolver (2) venga dado por $y_{n+1} = P(c, y_n)$ para una aplicación $c : TP \rightarrow R$ dependiente sólo del método. Veremos más adelante que esto es cierto para los métodos Runge-Kutta Particionados (PRK) y los PRK multiderivada, entre otros. Dicho método es de orden de consistencia $\geq n$ si y sólo si para cada $t \in TP$ con $n(t) \leq n$

$$\forall t \in TP / n(t) \leq n \quad c(t) = \frac{1}{\gamma(t)}. \quad (11)$$

La suficiencia de la condición es obvia de (10). La necesidad se deduce de la independencia de las diferenciales elementales (para el caso no particionado, véase el Teorema 306B de [4], o el ejercicio 4 de II.2 de [12]), la cual queda formulada en el lema siguiente:

Lema 1.4.1 *Dado un P-árbol t de orden $D \geq 1$ y número de partes $P \geq 1$, existe una función (polinómica) $f : R^D \rightarrow R^D$ y una partición $\mathcal{J}_1, \dots, \mathcal{J}_P$ de $\mathcal{J} = \{1, \dots, D\}$ tal que para el correspondiente sistema (2) se tiene que $F^1(t)(0) \neq 0$ y $F^1(z)(0) = 0$ para todo P-árbol $z \neq t$.*

Demostración:

Sea lt un P-árbol monótonamente etiquetado de $MLTP$ representante de t . Para cada $i = 1, \dots, D$, denotamos por $M(i)$ el conjunto de vértices hijos del vértice i , por a_i al tipo del vértice i , y por t_i al P-árbol representado por el P-árbol etiquetado $lt(i)$.

Definimos f por

$$f^i(y) = \prod_{j \in M(i)} y^j,$$

y definimos la partición $\{\mathcal{J}_1, \dots, \mathcal{J}_P\}$ de \mathcal{J} tal que para todo $b = 1, \dots, P$, $\mathcal{J}_b = \{i \in \mathcal{J} / a_i = b\}$. Es claro que para todo $i \in \mathcal{J}$ y todo $z \in TP$, $F^i(z)(0) \geq 0$. Por tanto, basta con demostrar que para $i \in \mathcal{J}$, $z \in TP$,

$$F^i(z)(0) > 0 \iff z = t_i. \quad (12)$$

Por definición de las diferenciales elementales si $i \notin \mathcal{J}_a$ y $w(t) = a$, entonces $F^i(t)(y) \equiv 0$. Por tanto, basta con demostrar que (12) se verifica para todo $i \in \mathcal{J}$ y $z \in TP^{a_i}$.

Es claro que (12) se verifica si i es un vértice final.

Supongamos que $i \in \mathcal{J}_a$ no es un vértice final, y que (12) se verifica para todo vértice $j > i$. Es claro que $F^i(z)(0) = 0$ para todo P-árbol z de orden ≤ 1 . Sea $z = a_i[z_1, \dots, z_m]$ un P-árbol cualquiera de orden ≥ 2 . Se tiene que

$$F^i(z)(0) = f_{J_1, \dots, J_l}^i(0) F^{J_1}(z_1)(0) \cdots F^{J_l}(z_l)(0),$$

y puesto que $f_{J_1, \dots, J_m}^i(0) > 0$ si y sólo si $M(i) = \{J_1, \dots, J_m\}$ (donde $|M(i)| = m$), ya que en ese caso $f_{J_1, \dots, J_m}^i(0) = 1$, se tiene que todo sumando no nulo de dicha expresión es de la forma $F^{\phi(1)}(z_1)(0) \cdots F^{\phi(l)}(z_l)(0)$ donde $\phi: \{1, \dots, l\} \rightarrow M(i)$ es una biyección. Puesto que lt es un P-árbol monótonamente etiquetado, $i < \phi(l)$ para $l = 1, \dots, m$, y por tanto, por hipótesis de inducción $F^{\phi(l)}(z_l) > 0 \iff z_l = t_{\phi(l)}$, de donde se tiene que (12) también se verifica para i . \square

Si consideramos métodos específicos para sistemas especiales para los que no todas las diferenciales elementales son independientes, el número de condiciones de orden se puede reducir de forma considerable:

1. En el caso de sistemas particionados con $P \geq 2$ que cumplen que para cada $a = 1, \dots, P$ la función ${}^a f$ no depende de ${}^a y$, las diferenciales elementales de todo P-árbol que tenga dos nodos del mismo tipo contiguos son idénticamente nulas. Para el resto de P-árboles, que llamaremos *PS-árboles*, las diferenciales elementales son independientes, puesto que la función f que obtenemos al aplicar el lema anterior a un PS-árbol cualquiera es tal que ${}^a f$ no depende de ${}^a y$ ($a = 1, \dots, P$).

Denotamos por TPS al conjunto de PS-árboles, y por TPS^a al conjunto de PS-árboles que tienen raíz de tipo a .

De este modo, un método desarrollable como una P-serie de coeficientes $c(t)$ es de orden de consistencia $\geq n$ para todo sistema especial de la forma descrita si

y sólo si

$$\forall t \in TPS / n(t) \leq n, \quad c(t) = \frac{1}{\gamma(t)}.$$

2. Para sistemas de segundo orden, que son equivalentes a un sistema particionado (con $P = 2$ y $|\mathcal{J}_1| = |\mathcal{J}_2|$) de la forma

$$\begin{aligned} {}^1y' &= {}^1f({}^1y, {}^2y), \\ {}^2y' &= {}^1y, \end{aligned} \tag{13}$$

las diferenciales elementales de todos los P-árboles excepto cierto tipo de P-árboles que llamaremos como en [16] *N-árboles*, son nulas. Los N-árboles son los P-árboles que cumplen que todo nodo de tipo 2 tiene como mucho un solo nodo hijo y que dicho nodo es de tipo 1. Por otra parte, las diferenciales elementales de los N-árboles son independientes (Proposición 12 de [16]), de modo que un método con desarrollo en P-serie de coeficientes $c(t)$ es de orden de consistencia $\geq n$ para todo sistema de la forma (13) si y sólo si

$$\forall t \in NT / n(t) \leq n, \quad c(t) = \frac{1}{\gamma(t)},$$

donde NT es el conjunto de N-árboles.

3. Si consideramos sistemas de la forma (13) en los que 1f no depende de 1y , correspondientes a sistemas $x'' = g(x)$, las diferenciales elementales de todo P-árbol excepto los de $SNT = TPS \cap NT$ se anulan. Llamamos *SN-árboles* a los P-árboles ($P = 2$) de SNT, y denotamos por SNT^1 y SNT^2 respectivamente a los conjuntos de P-árboles de tipo 1 y de tipo 2.

Puesto que también se verifica que las diferenciales elementales de los SN-árboles son independientes (Lema 1.1 en [6]) se tiene que todo método con desarrollo en P-serie de coeficientes $c(t)$ es de orden de consistencia $\geq n$ para todo sistema de la forma

$$\begin{aligned} {}^1y' &= {}^1f({}^2y), \\ {}^2y' &= {}^1y, \end{aligned}$$

si y sólo si

$$\forall t \in SNT / n(t) \leq n, \quad c(t) = \frac{1}{\gamma(t)}.$$

1.5 Composición de P-series

En esta sección estudiaremos la composición de P-series con un enfoque distinto al de Hairer y Wanner [15]. Generalizaremos los resultados sobre composición de B-series de [15], obteniendo nuevas fórmulas recursivas para la obtención de los coeficientes de las P-series construidas como composición de dos P-series dadas.

Para ello, como primer paso, generalizaremos los conceptos de diferenciales elementales y P-series.

1.5.1 Diferenciales elementales generalizadas y P-series generalizadas

Definición 1.5.1 Definimos para cada P-árbol t de orden ≥ 1 la diferencial elemental generalizada con familia de índices $\{K_1, \dots, K_l\} \subset \mathcal{J}$ como la función vectorial $F_{(K_1, \dots, K_l)}^I(t)$ siguiente: para $a, b = 1, \dots, P$, $I \in \mathcal{J}_a$,

$$F_{(K_1, \dots, K_l)}^I(\tau_b)(y) = \delta_{ab} f_{K_1, \dots, K_l}^I(y),$$

$$F_{(K_1, \dots, K_l)}^I(b[t_1, \dots, t_m])(y) = \delta_{ab} f_{K_1, \dots, K_l, J_1, \dots, J_m}^I(y) \prod_{i=1}^m F^{J_i}(t_i)(y).$$

Por convenio, diremos que $F(t)$ es la diferencial elemental generalizada de t con familia de índices vacía.

Es inmediato que dado una familia, quizá vacía, de índices $\{K_1, \dots, K_l\} \subset \mathcal{J}$, para todo par de P-árboles t, z de orden ≥ 1 ,

$$F_{(K_1, \dots, K_l)}^I(t \cdot z)(y) = F_{(K_1, \dots, K_l, J)}^I(t)(y) F^J(z)(y). \quad (14)$$

Las P-series generalizadas las definimos como sigue:

Definición 1.5.2 Dada una aplicación $c : TP \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 0$, y una familia de índices $\{K_1, \dots, K_l\} \subset \mathcal{J}$, se define la *P-serie generalizada* con familia de índices $\{K_1, \dots, K_l\}$ como la serie formal

$$P_{(K_1, \dots, K_l)}(c, y) = \sum_{t \in TP} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} c(t) F_{(K_1, \dots, K_l)}(t)(y). \quad (15)$$



1.5.2 Resultados previos

Como primer paso para llegar al resultado principal de esta sección veremos el siguiente lema, que generaliza el Teorema 13 de [17]:

Lema 1.5.1 *Si $c(\emptyset) = 1$, entonces para todo $I \in \mathcal{J}$ y toda familia de índices $\{J_1, \dots, J_l\} \subset \mathcal{J}$ (incluida la vacía) se tiene que*

$$hf_{J_1, \dots, J_l}^I(P(\mathbf{c}, y)) = P_{(J_1, \dots, J_l)}^I(\mathbf{c}', y)$$

donde, para cada $a = 1, \dots, P$,

$$\begin{aligned} \mathbf{c}'(\emptyset) &= 0, \\ \mathbf{c}'(\tau_a) &= 1, \\ \mathbf{c}'(a[t_1, \dots, t_m]) &= \mathbf{c}(t_1) \cdots \mathbf{c}(t_m). \end{aligned}$$

Demostración: Por la definición de los coeficientes $\mathbf{c}'(t)$ se tiene que para cada $t, z \in \overline{TP}$ se verifica

$$\mathbf{c}'(t \cdot z) = \mathbf{c}'(t)\mathbf{c}(z). \quad (16)$$

Probaremos por inducción sobre N que para todo $N \geq 1$

$$f_{J_1, \dots, J_l}^I(P(\mathbf{c}, y)) = \sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)-1}}{\sigma(t)} \mathbf{c}'(t) F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(t)(y) + O(h^N).$$

Para $N = 1$ se verifica de forma trivial. Sea $M > 1$, y supongamos que dicha igualdad se verifica para todo $N < M$. Para probarlo para $N = M$, basta con probar que

$$\frac{d}{dh} f_{J_1, \dots, J_l}^I(P(\mathbf{c}, y)) = \sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ 2 \leq n(t) \leq M}} \frac{h^{n(t)-2}}{\sigma(t)} (n(t) - 1) \mathbf{c}'(t) F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(t)(y) + O(h^{M-1}).$$

Ahora bien,

$$\frac{d}{dh} f_{J_1, \dots, J_l}^I(P(\mathbf{c}, y)) = f_{J_1, \dots, J_l, K}^I(P(\mathbf{c}, y)) \frac{d}{dh} P^K(\mathbf{c}, y),$$

y por hipótesis de inducción

$$\begin{aligned} \frac{d}{dh} f_{J_1, \dots, J_l}^I(P(\mathbf{c}, y)) &= \left(\sum_{\substack{t_1 \in \overline{TP} \\ n(t_1) \leq M-1}} \frac{h^{n(t_1)-1}}{\sigma(t_1)} \mathbf{c}'(t_1) F_{(J_1, \dots, J_l, K)}^I(t_1)(y) + O(h^{M-1}) \right) \\ &\times \sum_{t_2 \in \overline{TP}} \frac{h^{n(t_2)-1}}{\sigma(t_2)} n(t_2) \mathbf{c}(t_2) F^K(t_2)(y). \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta (14), (16) y el Lema 1.2.2, se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dh} f_{J_1, \dots, J_l}^I(P(\mathbf{c}, y)) &= \sum_{\substack{t_1 \in \overline{TP} \\ n(t_1) \leq M-1}} \sum_{t_2 \in \overline{TP}} \frac{h^{n(t_1 \cdot t_2)-1}}{\sigma(t_1 \cdot t_2)} k(t_1 \cdot t_2, t_2) \mathbf{c}'(t_1 \cdot t_2) F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(t_1 \cdot t_2)(y) + O(h^{M-1}) \\ &= \sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ 2 \leq n(t) \leq M}} \frac{h^{n(t)-2}}{\sigma(t)} \left(\sum_{t_1 \cdot t_2 = t} k(t, t_2) n(t_2) \right) \mathbf{c}'(t) F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(t)(y) + O(h^{M-1}), \end{aligned}$$

y puesto que la expresión entre paréntesis es igual a $n(t)-1$, el lema queda demostrado.

□

Por aplicación de este lema se comprueba que una P-serie $y = P(\mathbf{c}, y_0)$ con $\mathbf{c}(\emptyset) = 1$ satisfice el sistema diferencial (2) si y sólo si para cada $t \in TP$ con $t = {}_a[t_1, \dots, t_m]$

$$n(t) \mathbf{c}(t) = \mathbf{c}(t_1) \cdots \mathbf{c}(t_m);$$

el primer y segundo miembros son los coeficientes de $h^{n(t)-1} F(t)(y) / \sigma(t)$ en la serie formal correspondientes a y' y $f(y)$ respectivamente. De aquí $\mathbf{c}(t) = 1/\gamma(t)$ para cada $t \in TP$ y se obtiene el Lema 1.3.1.

Por otra parte, el Lema 1.5.1 permite obtener el desarrollo en P-serie de las aproximaciones dadas por métodos Runge-Kutta, Runge-Kutta particionados, y Runge-Kutta-Nyström. Ver, por ejemplo, [17] páginas 282-284.

El siguiente resultado será de utilidad para demostrar el Lema 1.5.3 de esta subsección y el teorema de composición de P-series.

Lema 1.5.2 Sean $\mathbf{a}, \mathbf{b} : TP \rightarrow R$. Si $\mathbf{a}(\emptyset) = \mathbf{b}(\emptyset) = 0$, entonces para todo $I \in \mathcal{J}$ y toda familia de índices $\{J_1, \dots, J_l\} \subset \mathcal{J}$ (incluido el vacío) se tiene que

$$P_{(J_1, \dots, J_l, K)}^I(\mathbf{a}, \mathbf{y}) P^K(\mathbf{b}, \mathbf{y}) = P_{(J_1, \dots, J_l)}^I(\mathbf{a} * \mathbf{b}, \mathbf{y}),$$

donde $(\mathbf{a} * \mathbf{b})(\emptyset) = 0$, y para cada $t \in \overline{TP}$

$$(\mathbf{a} * \mathbf{b})(t) = \sum_{\substack{u, v \in \overline{TP} \\ u \cdot v = t}} k(t, v) \mathbf{a}(u) \mathbf{b}(v).$$

Demostración: En virtud de la definición de P-serie generalizada, y teniendo en cuenta las igualdades (8) y (14), se tiene

$$P_{(J_1, \dots, J_l, K)}^I(\mathbf{a}, \mathbf{y}) P^K(\mathbf{b}, \mathbf{y}) = \sum_{u, v \in \overline{TP}} \frac{h^{n(u \cdot v)}}{\sigma(u \cdot v)} k(u \cdot v, v) \mathbf{a}(u) \mathbf{b}(v) F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(u \cdot v)(\mathbf{y}).$$

□

El lema que sigue, permite obtener junto con el Lema 1.5.1 el desarrollo en P-serie de métodos que hacen uso tanto de f como de f' , como son los métodos de Rosenbrock, los métodos resultantes de usar un número fijo de iteraciones de Newton en esquemas tipo Runge-Kutta y, los métodos simplécticos tipo Miesbach [10], desarrollados en el contexto de sistemas Hamiltonianos.

Lema 1.5.3 Sean $\mathbf{a}, \mathbf{c} : TP \rightarrow R$. Si $\mathbf{a}(\emptyset) = 0$, $\mathbf{c}(\emptyset) = 1$, entonces para cada $I \in \mathcal{J}$ y cada familia de índices $\{J_1, \dots, J_l\} \subset \mathcal{J}$ (incluido el vacío), se tiene que

$$f_{J_1, \dots, J_l, K}^I(P(\mathbf{c}, \mathbf{y})) P^K(\mathbf{a}, \mathbf{y}) = P_{(J_1, \dots, J_l)}^I(\mathbf{c}' * \mathbf{a}, \mathbf{y}),$$

donde para $e = 1, \dots, P$, se tiene que $(\mathbf{c}' * \mathbf{a})(\emptyset) = (\mathbf{c}' * \mathbf{a})(\tau_e) = 0$, y dado $t = e[t_1, \dots, t_m]$ con los $t_i \in \overline{TP}$

$$(\mathbf{c}' * \mathbf{a})(t) = \sum_{i=1}^m \mathbf{a}(t_i) \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^m \mathbf{c}(t_l). \quad (17)$$

Por otra parte, si $t, z \in \overline{TP}$, se tiene que

$$(\mathbf{c}' * \mathbf{a})(t \cdot z) = \mathbf{c}'(t) \mathbf{a}(z) + (\mathbf{c}' * \mathbf{a})(t) \mathbf{c}(z).$$

Demostración: Haciendo uso del Lema 1.5.2, basta con demostrar primeramente la igualdad (17), de donde se tiene fácilmente la que le sigue.

Si para $i = 1, \dots, m$ denotamos por t_i^* al P-árbol $e[t_1, \dots, t_{i-1}, t_{i+1}, \dots, t_m]$, del Lema 1.5.2 se deduce que

$$(c' * a)(e[t_1, \dots, t_m]) = \sum_{i=1}^m c'(t_i^*)a(t_i),$$

de donde se tiene (17) por definición de c' . \square

1.5.3 Teorema de composición de P-series

El objetivo de esta subsección consiste en obtener una generalización del teorema de composición de B-series de Hairer, que formularemos en términos de P-series generalizadas.

Teorema 1.5.4 Dado $c : TP \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, para cada $z \in \overline{TP}$ y cada familia de índices $\{J_1, \dots, J_l\}$ (incluida la familia vacía)

$$\frac{h^{n(z)}}{\sigma(z)} F_{(J_1, \dots, J_l)}(z)(P(c, y)) = P_{(J_1, \dots, J_l)}(c^{(z)}, y), \quad (18)$$

donde dados $z \in \overline{TP}$, $t \in TP$

$$c^{(z)}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } w(t) \neq w(z), \\ c'(t) & \text{si } z = \tau_w(t), \\ \frac{(c^{(u)} * c^{(v)})(t)}{k(z, v)} & \text{si } w(t) = w(z) \text{ y } z = u \cdot v \text{ con } u, v \in \overline{TP}, \end{cases} \quad (19)$$

donde $*$ denota a la operación introducida en el Lema 1.5.2.

Demostración: Dado $z \in \overline{TP}$, por definición de diferencial elemental generalizada la igualdad (18) se verifica de forma trivial para las componentes $I \notin \mathcal{J}_{w(z)}$.

En cuanto a las componentes $I \in \mathcal{J}_{w(z)}$, se demuestra por inducción sobre $n(z)$ como sigue: Si $n(z) = 1$ la validez de la igualdad (18) se deduce directamente del Lema 1.5.1. Sea $z \in \overline{TP}$ de orden ≥ 2 , y supongamos que (18) se verifica para todo

P-árbol de orden menor. Sean $u, v \in \overline{TP}$ tales que $z = u \cdot v$; entonces, de (14) y 1.2.2 se tiene que para cada $I \in \mathcal{J}_{w(z)}$

$$\frac{h^{n(z)}}{\sigma(z)} F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(z)(P(\mathbf{c}, y)) = \frac{1}{k(z, v)} \frac{h^{n(u)}}{\sigma(u)} F_{(J_1, \dots, J_l, K)}^I(u)(P(\mathbf{c}, y)) \frac{h^{n(v)}}{\sigma(v)} F^K(v)(P(\mathbf{c}, y)),$$

de donde aplicando la hipótesis de inducción y el Lema 1.5.2 se tiene que

$$\frac{h^{n(z)}}{\sigma(z)} F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(z)(P(\mathbf{c}, y)) = \frac{1}{k(z, v)} P_{(J_1, \dots, J_l)}(\mathbf{c}^{(u)} * \mathbf{c}^{(v)}, y).$$

□

Nota: Aunque el resultado de este teorema está formulada en términos de P-series formales, que en general no tienen por qué converger, puede ser interpretado en términos de desarrollos truncados. De hecho, se puede demostrar del mismo modo que si f es suficientemente diferenciable, para cada $z \in TP$

$$\begin{aligned} & F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(z) \left(\sum_{\substack{t \in TP \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} \mathbf{c}(t) F(t)(y) + O(h^{N+1}) \right) \\ &= \sum_{\substack{t \in TP \\ n(t) \leq N+n(z)}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} \mathbf{c}^{(z)}(t) F_{(J_1, \dots, J_l)}^I(t)(y) + O(h^{N+n(z)+1}). \end{aligned} \quad (20)$$

En lo que sigue, dado $\mathbf{c} : TP \rightarrow R$ y $z \in \overline{TP}$ denotaremos por $\mathbf{c}^{(z)}$ a la aplicación de TP en R que verifica (18), la cual puede ser obtenida de forma recursiva haciendo uso de las igualdades (19). Por convenio, tomamos $\mathbf{c}^{(\emptyset)} := \mathbf{c}$, de tal modo que la igualdad (18) también se verifica en el caso de la familia de índices vacía para $z = \emptyset$.

Del Teorema 1.5.4 se deduce directamente el teorema de composición de P-series:

Teorema 1.5.5 *Dados $\mathbf{c}, \mathbf{b} : TP \rightarrow R$ con $\mathbf{c}^{(\emptyset)} = 1$, entonces para toda familia de índices $\{J_1, \dots, J_l\} \subset \mathcal{J}$*

$$P_{(J_1, \dots, J_l)}(\mathbf{b}, P(\mathbf{c}, y)) = P_{(J_1, \dots, J_l)}(\mathbf{cb}, y), \quad (21)$$

donde para cada $t \in TP$

$$\mathbf{cb}(t) = \sum_{z \in TP} \mathbf{b}(z) \mathbf{c}^{(z)}(t). \quad (22)$$

Observación: Para familias de índices $\{J_1, \dots, J_l\}$ no vacías, dicha fórmula sólo tiene sentido en caso de que $b(\emptyset) = 0$, ya que $F_{(J_1, \dots, J_l)}(\emptyset)(y)$ no está definido para $\{J_1, \dots, J_l\} \neq \emptyset$.

1.5.4 Propiedades de los coeficientes $c^{(z)}(t)$

Seguidamente, estudiaremos los coeficientes $c^{(z)}(t)$ definidos en la subsección anterior, deduciendo qué propiedades verifican, y obteniendo fórmulas recursivas alternativas a (19).

Lema 1.5.6 *Dados $z, t \in \overline{TP}$ y $c : TP \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, se verifican las siguientes propiedades:*

1. Si $z \not\subset t$, entonces $c^{(z)}(t) = 0$. En particular, $c^{(z)}(t) = 0$ si $w(t) \neq w(z)$ o $n(t) < n(z)$.
2. Si $w(t) = w(z)$, $c^{(z)}(t)$ no varía si sustituimos el tipo de la raíz de ambos P-árboles por otro tipo de nodo.
3. Si $z = t$, entonces $c^{(z)}(t) = 1$.

Demostración: Las dos primeras propiedades se demuestran fácilmente por inducción sobre $n(z)$ a partir de (19) y teniendo en cuenta respectivamente los siguientes puntos:

1. De la Definición 1.2.1 se deduce que $z_1 \cdot z_2 \subset t$ si y sólo si existen $t_1, t_2 \in \overline{TP}$ tales que $t = t_1 \cdot t_2$, $z_1 \subset t_1$ y $z_2 \subset t_2$.
2. Dados $t_1, t_2 \in \overline{TP}$, se tiene que $w(t_1 \cdot t_2) = w(t_1)$.

En cuanto a la tercera propiedad, se deduce directamente de (18). \square

La Propiedad 1 de este lema, implica, por una parte que en la fórmula 22 del teorema de composición de P-series basta con considerar en el sumatorio los $z \in TP$ tales que $z \subset t$. Por otro lado, tenemos que si $z, t \in \overline{TP}$ con $n(z) \geq 2$

$$c^{(z)}(t) = \sum_{\substack{t_1 \cdot t_2 = t \\ t_1 \supset z_1, t_2 \supset z_2}} \frac{k(t, t_2)}{k(z, z_2)} c^{(z_1)}(t_1) c^{(z_2)}(t_2).$$

Por ejemplo, para $z = \mathfrak{I}$ y $t = \mathfrak{V}$ podemos calcular $c^{(z)}(t)$ del siguiente modo: $z = z_1 \cdot z_2$ con $z_1 = \circ$ y $z_2 = \bullet$, y además $k(z, z_2) = 1$. Por otro lado, los únicos $t_1, t_2 \in \overline{TP}$ tales que $t = t_1 \cdot t_2$, $z_1 \subset t_1$ y $z_2 \subset t_2$, son $t_1 = \mathfrak{I}$ y $t_2 = \circ$, con $k(t, t_2) = 2$. Por tanto,

$$c^{(\mathfrak{I})}(\mathfrak{V}) = 2c^{(\circ)}(\mathfrak{I}) 2c^{(\bullet)}(\circ) = 2c'(\mathfrak{I}) = 2c(\circ). \quad (23)$$

El siguiente resultado ofrece una forma alternativa de calcular los coeficientes $c^{(z)}(t)$, y a su vez un paso previo para deducir una tercera formula, que presentaremos en el Lema 1.5.8.

Lema 1.5.7 *Dados $c : TP \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, y $z, t \in \overline{TP}$ tales que $n(t), n(z) \geq 2$ y $z \subset t$. Sea $a = w(t) = w(z)$, y sean $t = {}_a[t_1, \dots, t_m]$ y $z = {}_a[z_1^{r_1}, \dots, z_l^{r_l}]$ (con $z_i \neq \emptyset$, distintos dos a dos). Pongamos $z_{l+1} = \emptyset$ y $r_{l+1} = m - (r_1 + \dots + r_l)$ ($r_{l+1} \geq 0$ pues $z \subset t$), y denotemos por $\mathcal{A}(t, z)$ al conjunto de aplicaciones ϕ de $\{1, \dots, m\}$ en $\{1, \dots, l\}$ en que para cada $j = 1, \dots, l+1$ la imagen inversa $\phi^{-1}(j)$ tiene r_j elementos. Entonces*

$$c^{(z)}(t) = \sum_{\phi \in \mathcal{A}(t, z)} \prod_{i=1}^m c^{(z_{\phi(i)})}(t_i). \quad (24)$$

Demostración: Demostraremos la igualdad (24) por inducción sobre $n(t)$. Si $n(t) = 2$, dicha igualdad se verifica de forma trivial, ya que en ese caso las condiciones del lema implican $z = t$. Sean $t, z \in \overline{TP}$ de orden ≥ 3 .

Si denotamos, para $i = 1, \dots, m$, $t_i^* = {}_a[t_1, \dots, t_{i-1}, t_{i+1}, \dots, t_m]$, y para $j = 1, \dots, l$, $z_j^* = {}_a[z_1^{r_1}, \dots, z_{j-1}^{r_{j-1}}, z_j^{r_j-1}, z_{j+1}^{r_{j+1}}, \dots, z_l^{r_l}]$, teniendo en cuenta que para cada $j = 1, \dots, l$ $z = z_j^* \cdot z_j$, de (19) tenemos que

$$c^{(z)}(t) = \frac{1}{r_j} \sum_{i=1}^m c^{(z_j^*)}(t_i^*) c^{(z_j)}(t_i).$$

Puesto que, para cada i , $n(t_i^*), n(z_j^*) \geq 2$ y $n(t_i^*) < n(t)$, aplicando la hipótesis de inducción se tiene que

$$c^{(z)}(t) = \frac{1}{r_j} \sum_{i=1}^m \sum_{\theta \in \mathcal{A}(t_i^*, z_j^*)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^m c^{(z_{\theta(k)})}(t_k) c^{(z_j)}(t_i).$$

Fijado $j \in \{1, \dots, l+1\}$, para cada $\phi \in \mathcal{A}(t, z)$ existen r_j formas distintas de elegir un $i \in \{1, \dots, m\}$ y un $\theta \in \mathcal{A}(t_i^*, z_j^*)$ de tal modo que ϕ es una extensión de θ tal que $\theta(i) = j$, y por tanto la anterior igualdad implica (24). \square

Como ejemplo de aplicación de (24), desarrollaremos $c^{(z)}(t)$ para $z = \circ_3$, $t = \circ_3$ haciendo uso de dicha fórmula: Tenemos que $t = {}_1[\circ, \circ, \circ]$ y $z = {}_1[\circ, \circ]$. En este caso se tiene que $m = l + 1 = 3$ y $r_1 = r_2 = r_3 = 1$, de modo que $\mathcal{A}(t, z)$ es el conjunto de permutaciones de $\{1, 2, 3\}$. Por tanto, eliminando las permutaciones ϕ tales que para algún i $z_{\phi(i)} \notin t_i$,

$$c^{(\circ_3)}(\circ_3) = c^{(\circ)}(\circ) c^{(\theta)}(\circ) c^{(\circ)}(\circ) + c^{(\theta)}(\circ) c^{(\circ)}(\circ) c^{(\circ)}(\circ) = 2(c(\circ))^2. \quad (25)$$

La fórmula recursiva que proporciona el siguiente lema será muy útil más adelante.

Lema 1.5.8 Dado $c : TP \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, si $t = t_1 \cdot t_2$ con $t_1, t_2 \in \overline{TP}$, entonces para todo $z \in \overline{TP}$

$$c^{(z)}(t) = c^{(z)}(t_1)c(t_2) + \sum_{\substack{z_1, z_2 \in \overline{TP} \\ z_1 \cdot z_2 = z}} c^{(z_1)}(t_1)c^{(z_2)}(t_2) = \sum_{\substack{z_1 \in \overline{TP}, z_2 \in TP \\ z_1 \cdot z_2 = z}} c^{(z_1)}(t_1)c^{(z_2)}(t_2). \quad (26)$$

Demostración: Si $w(t) \neq w(z)$ ambos miembros de la igualdad (26) son nulos, ya que $w(t) = w(t_1)$ y $w(z) = w(z_1)$.

Supongamos que $z, t \in \overline{TP}$ con $w(t) = w(z)$. Para $n(z) = 1$, es decir si $z = \tau_a$ para algún $a \in \{1, \dots, P\}$, (19) se deduce de (18) y (16). Si $t, z \in \overline{TP}$ son de orden ≥ 2 , podemos aplicar el Lema 1.5.7. Sean $t = {}_a[t_1, \dots, t_m]$ y $z = {}_a[z_1^{r_1}, \dots, z_l^{r_l}]$ (con $z_j \neq \emptyset$, distintos dos a dos). Siguiendo la notación del Lema 1.5.7, tenemos que para $i = 1, \dots, m$, $t = t_i^* \cdot t_i$, y el conjunto $\{(u, v) \in \overline{TP} \times \overline{TP} / u \cdot v = z\}$ es precisamente $\{(z_j^*, z_j) / 1 \leq j \leq l\}$, y por tanto, queda por demostrar que, para cada $i = 1, \dots, m$,

$$c^{(z)}(t) = \sum_{j=1}^{l+1} c^{(z_j^*)}(t_i^*)c^{(z_j)}(t_i).$$

Del Lema 1.5.7 se tiene que

$$\sum_{j=1}^{l+1} c^{(z_j^*)}(t_i^*)c^{(z_j)}(t_i) = \sum_{j=1}^{l+1} \sum_{\theta \in \mathcal{A}(t_i^*, z_j^*)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^m c^{(z_{\theta(k)})}(t_k)c^{(z_j)}(t_i),$$

y fijado $i \in \{1, \dots, m\}$, para cada aplicación $\phi \in \mathcal{A}(t, z)$ existe un único $j \in \{1, \dots, l+1\}$ y un único $\theta \in \mathcal{A}(t_i^*, z_j^*)$ tales que ϕ es la extensión de θ que verifica $\phi(i) = j$, de modo que el segundo miembro de la anterior igualdad coincide con

$$\sum_{\phi \in \mathcal{A}(t, z)} \prod_{i=1}^m c^{(z_{\phi(i)})}(t_i) = c^{(z)}(t).$$

□

Como ejemplo ilustrativo de (26), consideremos de nuevo $c^{(z)}(t)$ con $z = \heartsuit$, $t = \heartsuit$: $t = t_1 \cdot t_2$ con $t_1 = \heartsuit$, $t_2 = \spadesuit$. Ahora bien, por un lado, $z \not\subset t_1$, y por tanto el primer sumando del segundo miembro de la igualdad (26) es (en este caso) nulo. Por otro lado, los únicos $z_1, z_2 \in \overline{TP}$ tales que $z = z_1 \cdot z_2$, $z_1 \subset t_1$ y $z_2 \subset t_2$, son $z_1 = \spadesuit$ y $z_2 = \clubsuit$, y por tanto,

$$c^{(\heartsuit)}(\heartsuit) = c^{(\spadesuit)}(\heartsuit) c^{(\clubsuit)}(\spadesuit),$$

y teniendo en cuenta (23) obtenemos el mismo resultado que en (25).

Las fórmulas recursivas y las propiedades que hemos obtenido para los $c^{(z)}(t)$, permiten calcular de forma cómoda los coeficientes $cb(t)$ del Teorema 1.5.5 de composición de P-series. En la Tabla 3 pueden verse desarrollados los coeficientes $cb(t)$ de los P-árboles (para $P = 2$) con raíz de tipo 1 de orden ≤ 3 . Los coeficientes correspondientes a los P-árboles de TP^2 pueden obtenerse por simetría a partir de los de TP^1 , intercambiando los nodos de tipo 1 con los de tipo 2.

Tabla 3: Desarrollo de los coeficientes $cb(t)$

$cb(\bullet) = b(\emptyset)c(\bullet) + b(\bullet)$
$cb(\uparrow) = b(\emptyset)c(\uparrow) + b(\bullet)c(\bullet) + b(\uparrow)$
$cb(\downarrow) = b(\emptyset)c(\downarrow) + b(\bullet)c(\bullet) + b(\downarrow)$
$cb(\updownarrow) = b(\emptyset)c(\updownarrow) + b(\bullet)c(\bullet)^2 + 2b(\uparrow)c(\bullet) + b(\updownarrow)$
$cb(\updownarrow) = b(\emptyset)c(\updownarrow) + b(\bullet)c(\bullet)c(\bullet) + b(\uparrow)c(\bullet) + b(\downarrow)c(\bullet) + b(\updownarrow)$
$cb(\updownarrow) = b(\emptyset)c(\updownarrow) + b(\bullet)c(\bullet)^2 + 2b(\uparrow)c(\bullet) + b(\updownarrow)$
$cb(\updownarrow) = b(\emptyset)c(\updownarrow) + b(\bullet)c(\uparrow) + b(\uparrow)c(\bullet) + b(\updownarrow)$
$cb(\updownarrow) = b(\emptyset)c(\updownarrow) + b(\bullet)c(\downarrow) + b(\downarrow)c(\bullet) + b(\updownarrow)$
$cb(\updownarrow) = b(\emptyset)c(\updownarrow) + b(\bullet)c(\uparrow) + b(\uparrow)c(\bullet) + b(\updownarrow)$
$cb(\updownarrow) = b(\emptyset)c(\updownarrow) + b(\bullet)c(\downarrow) + b(\downarrow)c(\bullet) + b(\updownarrow)$



1.6 Enfoque alternativo de la composición de P-series

En los ejemplos presentados en la Subsección 1.5.4 se observa que los coeficientes $c^{(z)}(t)$ pueden ser desarrollados en función de coeficientes $c(u)$ para P-árboles u de orden $\leq n(t)$. Ello resulta patente en el teorema de composición de B-series de Hairer y Wanner [15], que está formulado haciendo uso del concepto de pares de árboles. En esta sección deduciremos una formulación alternativa del Teorema 1.5.5 de composición de P-series, que es generalización inmediata del teorema de composición de B-series de Hairer y Wanner. Para ello, generalizaremos el concepto de pares de árboles para el caso particionado.

1.6.1 Pares etiquetados de P-árboles y pares de P-árboles

Se define un *par etiquetado de P-árboles* como un par ordenado de P-árboles etiquetados $lp = (lt, lz)$ donde $lt = (lt', lt'')$, y $lz = (lz', lz'')$ es tal que sus vértices y sus aristas son asimismo vértices y aristas de lt , la raíz de lt y la de lz coinciden, y lz'' es la restricción de lt'' al conjunto de vértices de lz . Decimos que lt es el *P-árbol etiquetado principal* de $lp = (lt, lz)$, y que lz es el *P-árbol etiquetado subordinado* de lp .

Identificamos los pares etiquetados de P-árboles con P-árbol etiquetado subordinado vacío con su P-árbol etiquetado principal.

Un par etiquetado de P-árboles $lp = (lt, lz)$ queda unívocamente determinado por lt y el conjunto U de vértices de lz , y lo denotaremos de forma alternativa como $lp = (lt, U)$. Es de señalar, que dado un P-árbol etiquetado lt y un subconjunto de sus vértices U , en general (lt, U) no es un par etiquetado de P-árboles. Para ello, es necesario y suficiente que se verifique que si un vértice i de lt pertenece a U , entonces el padre de i en lt también pertenezca a U .

Los pares etiquetados de P-árboles serán representado gráficamente por medio del diagrama correspondiente al P-árbol etiquetado principal en donde los nodos que representan a vértices del P-árbol etiquetado subordinado son señalados con una doble

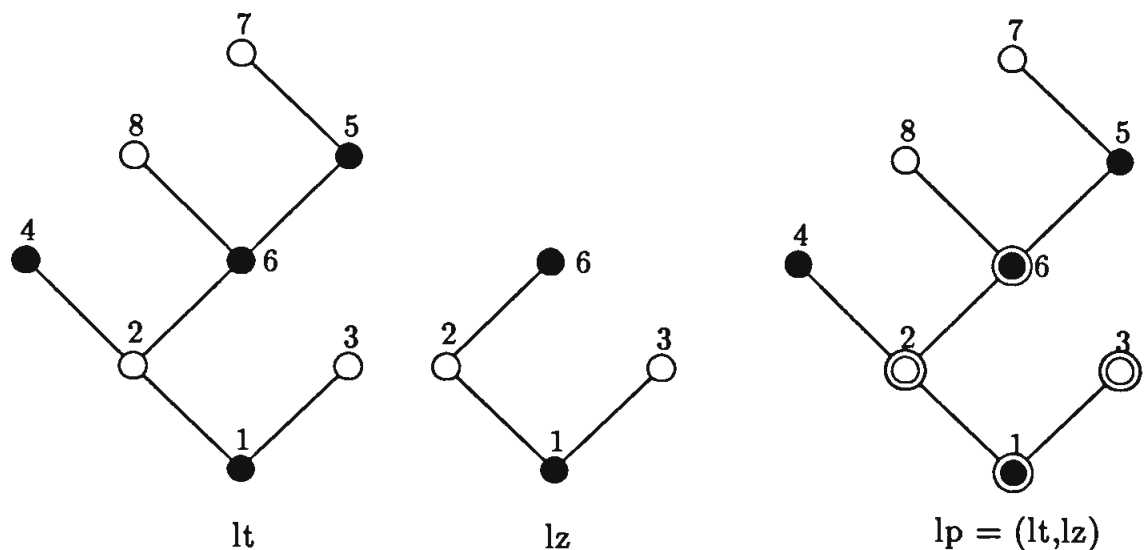


Figura 9: Ejemplo de un par etiquetado de P-árboles $lp = (lt, lz)$

circunferencia. Véase la Figura 9.

Dado un par etiquetado de P-árboles $lp = (lt, U)$ con $lt = r_a[lt_1, \dots, lt_m]$ y $U \neq \emptyset$, lp queda determinado por la raíz r , el tipo a de la raíz, la familia de P-árboles etiquetados $\{lt_1, \dots, lt_m\}$, y el subconjunto U de vértices de lt . Para cada $k = 1, \dots, m$, sea U_k la intersección de U con el conjunto de vértices de lt_k , entonces $U = \{r\} \cup U_1 \cup \dots \cup U_m$, y $lp_k = (lt_k, U_k)$ es un par etiquetado de P-árboles. Por tanto, lp está determinado de forma unívoca por r , a , y la familia de pares etiquetados de P-árboles $\{lp_1, \dots, lp_m\}$, y representaremos a lp como $r_a[[lp_1, \dots, lp_m]]$.

Se dice que dos pares etiquetados de P-árboles $lp_1 = (lt_1, lz_1)$ y $lp_2 = (lt_2, lz_2)$ son *equivalentes*, si existe una biyección s del conjunto de vértices de lt_1 al de los vértices de lt_2 que establece la equivalencia de lt_1 y lt_2 , y transforma el conjunto de vértices de lz_1 en el conjunto de vértices de lz_2 (puede verse que en ese caso la restricción de s al conjunto de vértices de lz_1 establece asimismo la equivalencia de lz_1 y lz_2).

Se dice que un *par de P-árboles* es una clase de equivalencia de pares etiquetados de P-árboles. Denotaremos por PTP al conjunto de pares de P-árboles.

Es claro que, de acuerdo a la identificación de los P-árboles etiquetados lt con (lt, \emptyset) , la relación de equivalencia de pares etiquetados de P-árboles generaliza a la equivalencia de P-árboles etiquetados. Por tanto, podemos identificar al P-árbol

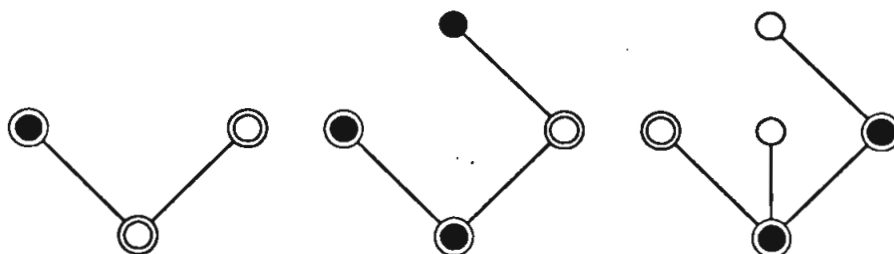


Figura 10: Representación gráfica de varios pares de P-árboles

representado por el P-árbol etiquetado lt con el par de P-árboles representado por (lt, \emptyset) , de tal manera que $TP \subset PTP$.

Puede verse que dos pares etiquetados de P-árboles son equivalentes si puede obtenerse la representación gráfica de uno de ellos cambiando las etiquetas en el diagrama correspondiente al otro. Por tanto, podemos representar gráficamente los pares de P-árboles eliminando las etiquetas en el diagrama de cualquier par etiquetado de P-árboles que lo represente. En la Figura 10 pueden verse representados varios pares de P-árboles.

La representación recursiva de los pares etiquetados de P-árboles permite, de forma análoga a la del caso de P-árboles, representar los pares de P-árboles de forma recursiva. Para los pares de P-árboles $p \in TP$, tenemos ya definida dicha representación, y en cuanto a los pares de P-árboles $p \notin TP$ procedemos como sigue: Por un lado, denotamos por $p = \tau_a$ al par de P-árboles p representado por (lt, lt) donde lt es un P-árbol etiquetado con un sólo vértice de tipo a . Por otro lado, denotaremos por $p = {}_a[p_1, \dots, p_m]$ al par de P-árboles p representado por ${}_a[lp_1, \dots, lp_m]$, donde los pares de P-árboles p_1, \dots, p_m son respectivamente los representados por lp_1, \dots, lp_m .

Así, por ejemplo, los pares de P-árboles de la Figura 10 son, de izquierda a derecha, ${}_2[\tau_1, \tau_2]$, ${}_1[\tau_1, {}_2[\tau_1]]$, y ${}_1[\tau_2, \tau_2, {}_1[\tau_2]]$.

Dado un par de P-árboles p , decimos que el P-árbol t es el *P-árbol principal* (respectivamente, z es el *P-árbol subordinado*) de p , si dado un par etiquetado de P-árboles $lp = (lt, lz)$ que representa a p , lt representa a t (respectivamente, lz representa a z).

Dado $t \in TP$, denotamos por PTP_t (respectivamente, PTP^t) al conjunto de

pares de P-árboles cuyo P-árbol principal (respectivamente, P-árbol subordinado) es t . En particular, $PTP^\emptyset = TP$. Además, dados $t, z \in TP$, denotamos por PTP_t^z a $PTP_t \cap PTP^z$.

De la Definición 1.2.1 y la representación recursiva de los pares de P-árboles, se deduce que dados dos $t, z \in TP$, $z \subset t$ si y sólo si $PTP_t^z \neq \emptyset$.

Extenderemos la operación \cdot previamente definida para P-árboles a pares de P-árboles, definiendo $p \cdot q$ para cada $p \in PTP - TP$ y cada $q \in PTP$ como sigue: $\tau_a \cdot q = {}_a[q]$, y si $p = {}_a[p_1, \dots, p_m]$, $p \cdot q = {}_a[p_1, \dots, p_m, q]$.

Dados $p \in PTP - TP$, $q \in PTP$ definimos $k(p, q)$ del siguiente modo: $k(p, \emptyset) = 1$, $k(\tau_a, q) = 0$, y si $p = {}_a[p_1, \dots, p_m]$, $k(p, q)$ es el número de pares de P-árboles idénticos a q que hay en la familia de pares de P-árboles $\{p_1, \dots, p_m\}$.

Puede verse que, dados $t, z \in TP$ y $p \in PTP_t$, se verifica

$$k(t \cdot z, z) = \sum_{\substack{p_1 \in PTP_t, p_2 \in PTP_z \\ p_1 \cdot p_2 = p}} k(p, p_2). \quad (27)$$

Para cada $p \in PTP$, definimos la familia de P-árboles $d(p)$ de forma recursiva como sigue:

$$\begin{aligned} d(p) &= \emptyset, & \text{si } p &= \tau_a, \\ d(p) &= d(p_1) \cup d(p_2), & \text{si } p &\in PTP - TP, \text{ y } p = p_1 \cdot p_2, \\ d(p) &= \{p\}, & \text{si } p &\in TP. \end{aligned} \quad (28)$$

Atendiendo a la representación gráfica de p , $d(p)$ consiste en la familia de P-árboles que resulta de eliminar en el diagrama de p los nodos correspondientes al P-árbol subordinado (los señalados con una doble circunferencia) junto con sus aristas adyacentes. Por ejemplo, si consideramos el par de P-árboles p representado por el par etiquetado de P-árboles lp de la Figura 9, $d(p) = \{\tau_1, \tau_2, {}_1[\tau_2]\}$.

Dado un P-árbol monótonamente etiquetado lt de $MLTP$, $(lt, \{1, \dots, i\})$ es un par etiquetado de P-árboles. Por otro lado, todo par de P-árboles con P-árbol subordinado de orden i puede ser representado por al menos un par etiquetado de P-árboles de la forma $(lt, \{1, \dots, i\})$ con $lt \in MLTP$. Para cada $p \in PTP$ con P-árbol subordinado de orden $i \geq 0$, definimos $\alpha(p)$ como el número de P-árboles monótonamente

etiquetados lt de $MLTP$ distintos para los cuales $(lt, \{1, \dots, i\})$ es un par etiquetado de P-árboles que representa a p . Es claro que para el caso particular en que $p \in TP$, la definición de $\alpha(p)$ coincide con la de la Subsección 1.2.6.

Los $\alpha(p)$ pueden ser obtenidos de forma recursiva haciendo uso, por un lado, del Lema 1.2.1 para los $p \in TP$, y por otro lado, para los $p \in PTP - TP$, del siguiente resultado, análogo a dicho lema.

Lema 1.6.1 *Dados $p_1 \in PTP_{i_1}^{z_1}$, $p_2 \in PTP_{i_2}^{z_2}$ con $t_1, t_2, z_1, z_2 \in \overline{TP}$, sean $p = p_1 \cdot p_2$, $t = t_1 \cdot t_2$, y $z = z_1 \cdot z_2$. Se verifica que*

$$\alpha(p) = \frac{1}{k(p, p_2)} \binom{n(z) - 1}{n(z_2)} \binom{n(t) - n(z)}{n(t_2) - n(z_2)} \alpha(p_1) \alpha(p_2). \quad (29)$$

Demostración: Sean $n = n(t)$, $n_2 = n(t_2)$, $i = n(z)$, $i_1 = n(z_1)$, e $i_2 = n(z_2)$. Por cada dos $lt_1, lt_2 \in MLTP$ tales que $(lt_1, \{1, \dots, i_1\})$ representa a p_1 y $(lt_2, \{1, \dots, i_2\})$ representa a p_2 , por cada parte de i_2 elementos de $\{2, \dots, i\}$, y por cada parte de $n_2 - i_2$ elementos de $\{i + 1, \dots, n\}$, se puede generar de forma natural un único $lt \in MLTP$ tal que $(lt, \{1, \dots, i\})$ representa al par de P-árboles p .

En cambio, cada $lt \in MLTP$ tal que $(lt, \{1, \dots, i\})$ representa a p puede ser generado de este modo de $k(p, p_2)$ formas distintas. \square

Asimismo, extenderemos el concepto de simetría de P-árboles a pares de P-árboles definiendolo para pares de P-árboles de $PTP - TP$ como sigue: dado $p \in PTP$, sea (lt, U) un par etiquetado de P-árboles que lo representa, se define la *simetría* $\sigma(p)$ del P-árbol p como el número de permutaciones distintas de los vértices de lt que transforman a (lt, U) en sí mismo. Dicho número es independiente del representante (lt, U) de p elegido. El siguiente resultado, que generaliza al Lema 1.2.2, permite, teniendo en cuenta que $\sigma(\tau_a) = 1$ para $a = 1, \dots, P$, calcular los $\sigma(p)$ de forma recursiva.

Lema 1.6.2 *Para cada $p, q \in PTP$*

$$\sigma(p \cdot q) = k(p \cdot q, q) \sigma(p) \sigma(q). \quad (30)$$

Extenderemos el concepto de densidad, definiendo para cada $z \in TP$, y cada $p \in PTP^z$,

$$\gamma(p) = \gamma(z) \prod_{u \in d(p)} \gamma(u).$$

De dicha definición, de (28), y (6), se deduce fácilmente que, dados $p \in PTP^t$, $q \in PTP^z$, con $t, z \in TP$, se verifica $(n(t) + n(z))\gamma(p \cdot q) = n(t)\gamma(q)\gamma(p)$. Dicha igualdad, junto con (29) y (30), implica que para cada $p \in PTP_t^z$ con $z \in \overline{TP}$, $t \in TP$,

$$\alpha(p)\gamma(p)\sigma(p) = n(z)!(n(t) - n(z))!. \quad (31)$$

Se observa además, que tomando como convenio $0! = 1$, dicha igualdad también se verifica para el caso en que $z = \emptyset$, es decir, $p \in TP$.

1.6.2 Formulación alternativa del teorema de composición de P-series

Teorema 1.6.3 *En las condiciones del Teorema 1.5.5, para cada $t \in TP$*

$$cb(t) = \sum_{z \in TP} b(z) \sum_{p \in PTP_t^z} \frac{\sigma(t)}{\sigma(p)} c(p), \quad (32)$$

donde para cada $p \in PTP$, denotamos

$$c(p) = \prod_{u \in d(p)} c(u).$$

Demostración: En virtud del Teorema 1.5.5 y de la Propiedad 1 del Lema 1.5.6, basta con demostrar que para $t \in TP$ y $z \in \overline{TP}$ tales que $z \subset t$ se verifica

$$\frac{c^{(z)}(t)}{\sigma(t)} = \sum_{p \in PTP_t^z} \frac{c(p)}{\sigma(p)}, \quad (33)$$

igualdad que demostraremos por inducción sobre $n(t)$. Para $n(t) \leq 1$, es decir en los casos en que $t = z = \emptyset$, o $t = z = \tau_a$, o $t = \tau_a$ y $z = \emptyset$, dicha igualdad se verifica de forma trivial.

Dado $t \in \overline{TP}$ con $n(t) \geq 2$, existen $t_1, t_2 \in \overline{TP}$ tales que $t = t_1 \cdot t_2$. Supongamos, por hipótesis de inducción, que (33) se verifica para t_1 y t_2 . Entonces, haciendo uso de (26), (8) y (30), y teniendo en cuenta que para $p_1, p_2 \in PTP$ se tiene $c(p_1 \cdot p_2) = c(p_1)c(p_2)$,

$$\begin{aligned}
c^{(z)}(t) &= \sum_{\substack{z_1 \in \overline{TP}, z_2 \in TP \\ z_1 \cdot z_2 = z}} c^{(z_1)}(t_1) c^{(z_2)}(t_2) \\
&= \sum_{\substack{z_1 \in \overline{TP}, z_2 \in TP \\ z_1 \cdot z_2 = z}} \sum_{PTP_{t_1}^{z_1}} \sum_{PTP_{t_2}^{z_2}} \frac{\sigma(t_1)\sigma(t_2)}{\sigma(p_1)\sigma(p_2)} c(p_1)c(p_2) \\
&= \sum_{\substack{z_1 \in \overline{TP}, z_2 \in TP \\ z_1 \cdot z_2 = z}} \sum_{PTP_{t_1}^{z_1}} \sum_{PTP_{t_2}^{z_2}} \frac{k(p_1 \cdot p_2, p_2)\sigma(p_1 \cdot p_2)}{k(t_1 \cdot t_2, t_2)\sigma(t_1 \cdot t_2)} c(p_1 \cdot p_2) \\
&= \sum_{p \in PTP_t^z} \left(\sum_{\substack{p_1 \in PTP_{t_1}^{z_1}, p_2 \in PTP_{t_2}^{z_2} \\ p_1 \cdot p_2 = p}} \frac{k(p, p_2)}{k(t, t_2)} \right) \frac{\sigma(t)}{\sigma(p)} c(p),
\end{aligned}$$

y de esta última igualdad, teniendo en cuenta (27), se llega a (33). \square

Ilustraremos la aplicación de la fórmula (33) con un ejemplo, obteniendo $c^{(z)}(t)$ nuevamente para $z = \heartsuit$, $t = \heartsuit$: El único par de P-árboles de PTP_t^z es el par de P-árboles p de la derecha en la Figura 10, para el cual, $d(p) = \{\circ, \circ\}$, y por tanto $c(p) = (c(\circ))^2$. Por otro lado, $\sigma(p) = 1$ y $\sigma(t) = 2$, de modo que se tiene

$$c^{(z)}(t) = \sum_{p \in PTP_t^z} \frac{\sigma(t)}{\sigma(p)} c(p) = 2(c(\circ))^2.$$

A partir de las igualdades (7) y (31) podemos reescribir la fórmula (32) como

$$\gamma(t)cb(t) = \sum_{z \in TP} \sum_{p \in PTP_t^z} \binom{n(t)}{n(z)} \gamma(z)b(z) \frac{\alpha(p)}{\alpha(t)} \prod_{u \in d(p)} \gamma(u)c(u) \quad (34)$$

que corresponde a la fórmula del teorema de composición de B-series de [15]. Alternativamente, aplicando la definición de $\alpha(p)$, podemos reescribir dicha fórmula (como en [12]) en términos de P-árboles monótonamente etiquetados como

$$\gamma(t)cb(t) = \sum_{i=0}^{n(t)} \binom{n(t)}{n(z)} \frac{1}{\alpha(t)} \sum_{l \in \mathcal{MLTP}} \gamma(s_i(l))b(s_i(l)) \prod_{u \in d_i(l)} \gamma(u)c(u), \quad (35)$$



donde los $lt \in lt \cap MLTP$ son los $lt \in MLTP$ que representan al P-árbol t , y si $p = (lt, \{1, \dots, i\})$, $s_i(lt)$ es el P-árbol subordinado de p , y $d_i(lt) = d(p)$; es decir, $s_i(lt)$ es el P-árbol que resulta de considerar en lt los primeros i vértices, y $d_i(lt)$ es la familia de los P-árboles que resultan de eliminar en lt los primeros i vértices y sus aristas adyacentes.

1.7 Análisis regresivo de métodos de integración desarrollables en P-series

Hairer demuestra en [18] que, dado un método de integración desarrollable como una P-serie de coeficientes $c(t)$, si la función f del sistema (1) es de clase N , el resultado y_1 de aplicar un paso de longitud h a partir de y_0 verifica

$$y_1 = \tilde{y}(x_0 + h) + O(h^{N+1}), \quad (36)$$

donde $\tilde{y}(x)$ es la solución exacta de un sistema perturbado

$$\tilde{y}' = \sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} \mathbf{b}(t) F(t)(\tilde{y}), \quad (37)$$

con condición inicial $\tilde{y}(x_0) = y_0$, y da una fórmula que permite calcular los coeficientes $\mathbf{b}(t)$ para todo $t \in \overline{TP}$ de forma recursiva haciendo uso del concepto de particiones de P-árboles que introduce para tal fin.

En esta sección haremos uso del Teorema 1.5.5 de composición de P-series para dar una demostración alternativa de dicho resultado, obteniendo nuevas fórmulas para calcular de forma recursiva los coeficientes $\mathbf{b}(t)$ de (37).

Teorema 1.7.1 *Sea f de clase N , las solución exacta $\tilde{y}(x)$ del sistema perturbado con $\tilde{y}(x_0) = y_0$ verifica para todo r*

$$\tilde{y}(x_0 + rh) = \sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} \mathbf{c}_r(t) F(t)(y_0) + O(h^{N+1}), \quad (38)$$

donde para cada r , $\mathbf{c}_r : TP \rightarrow R$ es tal que $\mathbf{c}_r(\emptyset) = 1$, $\mathbf{c}_0(t) = 0$, y para cada $t \in \overline{TP}$

$$\frac{d}{dr} \mathbf{c}_r(t) = \mathbf{c}_r \mathbf{b}(t) = \sum_{z \in \overline{TP}} \mathbf{b}(z) \mathbf{c}_r^{(z)}(t). \quad (39)$$

Puesto que los $\mathbf{c}_r \mathbf{b}(t)$ pueden ser calculados en función de los $\mathbf{b}(u)$, $\mathbf{c}_r(u)$, con $n(u) < n(t)$, dicha fórmula, junto con las correspondientes a la composición de P-series, nos permite obtener los $\mathbf{c}_r(t)$ de forma recursiva. En la Tabla 4 pueden verse

Tabla 4: Desarrollo de varios coeficientes $c_r(t)$

$c_r(\circ) = rb(\circ)$
$c_r(\circ) = rb(\circ)$
$c_r(\uparrow) = \frac{r^2}{2}b(\circ)^2 + rb(\uparrow)$
$c_r(\uparrow) = \frac{r^2}{2}b(\circ)b(\circ) + rb(\uparrow)$
$c_r(\uparrow) = \frac{r^2}{2}b(\circ)^2 + rb(\uparrow)$
$c_r(\uparrow) = \frac{r^2}{2}b(\circ)b(\circ) + rb(\uparrow)$
$c_r(\heartsuit) = \frac{r^3}{3}b(\circ)^3 + r^2b(\uparrow)b(\circ) + rb(\heartsuit)$
$c_r(\heartsuit) = \frac{r^3}{3}b(\circ)^2b(\circ) + \frac{r^2}{2}b(\uparrow)b(\circ) + \frac{r^2}{2}b(\uparrow)b(\circ) + rb(\heartsuit)$
$c_r(\heartsuit) = \frac{r^3}{3}b(\circ)b(\circ)^2 + r^2b(\uparrow)b(\circ) + rb(\heartsuit)$
$c_r(\spadesuit) = \frac{r^3}{6}b(\circ)^3 + r^2b(\circ)b(\uparrow) + rb(\spadesuit)$
$c_r(\spadesuit) = \frac{r^3}{6}b(\circ)^2c(\circ) + \frac{r^2}{2}b(\circ)b(\uparrow) + \frac{r^2}{2}b(\uparrow)b(\circ) + rb(\spadesuit)$
$c_r(\spadesuit) = \frac{r^3}{6}b(\circ)^2b(\circ) + \frac{r^2}{2}b(\circ)b(\uparrow) + \frac{r^2}{2}b(\uparrow)b(\circ) + rb(\spadesuit)$
$c_r(\spadesuit) = \frac{r^3}{6}b(\circ)b(\circ)^2 + \frac{r^2}{2}b(\circ)b(\uparrow) + \frac{r^2}{2}b(\uparrow)b(\circ) + rb(\spadesuit)$

dichos coeficientes para varios P-árboles t , los cuales pueden ser obtenidos facilmente de forma sucesiva, sustituyendo en el desarrollo de los coeficientes $c_r b(t)$ las expresiones correspondientes a los $c_r(z)$ (los cuales ya se han obtenido previamente en función de los coeficientes de b), e integrando respecto de r .

Demostración: Si denotamos

$$\bar{y}(x_0 + rh) = y_0 + \sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} c_r(t) F(t)(y_0),$$

teniendo en cuenta el teorema de composición de P-series 1.5.5 y la igualdad (39), se tiene que

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)-1}}{\sigma(t)} b(t) F(t)(\bar{y}(x_0 + rh)) &= \sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)-1}}{\sigma(t)} \frac{d}{dr} c_r(t) F(t)(y_0) \\ &= \bar{y}'(x_0 + rh) + O(h^N). \end{aligned}$$

de donde se deduce (38). \square

Teorema 1.7.2 *Sea f de clase N , y sea y_1 el resultado de aplicar al sistema (2) un paso de longitud h desde y_0 de un método con desarrollo en P -serie de coeficientes $c(t)$. Entonces existe $b : \overline{TP} \rightarrow R$, y para cada $r \in R$ existe $c_r : TP \rightarrow R$ tal que para cada $t \in TP$, $c_1(t) = c(t)$ y se verifica (39), de tal forma que*

$$y_1 = \tilde{y}(x_0 + h) + O(h^{N+1}), \quad (40)$$

donde $\tilde{y}(x)$ es la solución exacta del sistema perturbado (37) con condición inicial $\tilde{y}(x_0) = y_0$.

Demostración: Basta con demostrar que existen tales $b(t)$ y $c_r(t)$. De (39) se tiene que

$$\begin{aligned} b(t) &= c(t) - \sum_{\substack{z \in \overline{TP} \\ z \neq t}} b(z) \int_0^1 c_s^{(z)}(t) ds, \\ c_r(t) &= r b(t) + \sum_{\substack{z \in \overline{TP} \\ z \neq t}} b(z) \int_0^r c_s^{(z)}(t) ds, \end{aligned} \quad (41)$$

y puesto que los $c_r^{(z)}(t)$ pueden ser calculados en función de $c_r(u)$ con $n(u) < n(t)$ queda finalizada la demostración. \square

En la Tabla 5 se indica como pueden obtenerse los coeficientes $b(t)$ de los P -árboles (para $P = 2$) con raíz de tipo 1 de orden ≤ 3 .

Observaciones:

1. El hecho de que el sistema perturbado (37) sea autónomo implica que para cada $r, s \in R$, $P(c_r, P(c_s, y)) = P(c_{r+s}, y)$. Una consecuencia inmediata de ello es que, fijado un número natural r , si y_r es la aproximación a $y(x_0 + rh)$ que resulta de aplicar r pasos de longitud h del método con desarrollo en P -serie $P(c, y_0)$, entonces $P(c_r, y_0)$ es el desarrollo en P -serie de y_r .
2. De las fórmulas (41) se demuestra por inducción sobre $n(t)$ que si el método de integración es de orden de consistencia $\geq N$, es decir, si para cada $t \in TP$ tal que $n(t) \leq N$ se verifica $c(t) = 1/\gamma(t)$, entonces

Tabla 5: Obtención de los coeficientes $\mathbf{b}(t)$

$\mathbf{b}(\circ) = \mathbf{c}(\circ)$
$\mathbf{b}(\uparrow) = \mathbf{c}(\uparrow) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\circ)^2$
$\mathbf{b}(\hat{\uparrow}) = \mathbf{c}(\hat{\uparrow}) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\circ)\mathbf{b}(\circ)$
$\mathbf{b}(\heartsuit) = \mathbf{c}(\heartsuit) - \frac{1}{3}\mathbf{b}(\circ)^3 - \mathbf{b}(\uparrow)\mathbf{b}(\circ)$
$\mathbf{b}(\heartsuit) = \mathbf{c}(\heartsuit) - \frac{1}{3}\mathbf{b}(\circ)^2\mathbf{b}(\circ) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\uparrow)\mathbf{b}(\circ) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\hat{\uparrow})\mathbf{b}(\circ)$
$\mathbf{b}(\heartsuit) = \mathbf{c}(\heartsuit) - \frac{1}{3}\mathbf{b}(\circ)\mathbf{b}(\circ)^2 - \mathbf{b}(\hat{\uparrow})\mathbf{b}(\circ)$
$\mathbf{b}(\spadesuit) = \mathbf{c}(\spadesuit) - \frac{1}{6}\mathbf{b}(\circ)^3 - \mathbf{b}(\circ)\mathbf{b}(\uparrow)$
$\mathbf{b}(\spadesuit) = \mathbf{c}(\spadesuit) - \frac{1}{6}\mathbf{b}(\circ)^2\mathbf{c}(\circ) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\circ)\mathbf{b}(\uparrow) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\hat{\uparrow})\mathbf{b}(\circ)$
$\mathbf{b}(\spadesuit) = \mathbf{c}(\spadesuit) - \frac{1}{6}\mathbf{b}(\circ)^2\mathbf{b}(\circ) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\circ)\mathbf{b}(\uparrow) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\hat{\uparrow})\mathbf{b}(\circ)$
$\mathbf{b}(\spadesuit) = \mathbf{c}(\spadesuit) - \frac{1}{6}\mathbf{b}(\circ)\mathbf{b}(\circ)^2 - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\circ)\mathbf{b}(\uparrow) - \frac{1}{2}\mathbf{b}(\hat{\uparrow})\mathbf{b}(\circ)$

- $\mathbf{b}(\tau_e) = 1$ ($1 \leq e \leq P$),
- $\mathbf{b}(t) = 0$, si $2 \leq n(t) \leq N$,
- $\mathbf{c}_r(t) = r^{n(t)}/\gamma(t)$, si $n(t) = N$.

De modo que, por una parte, la perturbación (37) es de orden N , y por otra parte, para cada $r \in R$ fijo, se tiene que $y(x_0 + rh) - \tilde{y}(x_0 + rh) = O(h^{N+1})$, lo cual ya era de esperar.

Además, de (41) se deduce que si $n(t) = N + 1$, entonces

$$\mathbf{b}(t) = \mathbf{c}(t) - \frac{1}{\gamma(t)},$$

de forma que el término principal de $h\tilde{f}(y) - hf(y)$ coincide con el del error local del método de integración. Por tanto, el orden de la perturbación (37) refleja el orden de consistencia del método.

3. Se demuestra por inducción que para cada $t \in \overline{TP}$, $\mathbf{c}_r(t)$ es un polinomio en r de grado $n(t)$. Además, si el método es consistente, es decir, si $\mathbf{c}(\tau_a) = 1$ ($1 \leq$

$a \leq P$), para cada $t \in TP$, $c_r(t)$ es un polinomio en r , y se demuestra por inducción sobre $n(t)$ que el coeficiente director de dicho polinomio es $1/\gamma(t)$. En efecto, sea $t = [t_1, \dots, t_m]_a$ ($1 \leq a \leq P$), y supongamos que el coeficiente en r de grado $n(z)$ de $c_r(z)$ es $1/\gamma(z)$ para todo P-árbol de orden $\leq n(t)$. El coeficiente del término de grado $n(t) - 1$ de $(d/dr)c_r(t)$ es el de

$$\sum_{a=1}^P b(\tau_a) c^{(\tau_a)}(t) = c'_r(t) = c(t_1) \cdots c(t_l),$$

que por hipótesis de inducción es

$$\frac{1}{\gamma(t_1) \cdots \gamma(t_m)} = \frac{n(t)}{\gamma(t)}.$$

4. Se puede demostrar por inducción sobre $n(t)$ que, si el método es de orden de consistencia N , entonces

$$d_r(t) = c_r(t) - \frac{r^{n(t)}}{\gamma(t)}$$

es un polinomio en r de grado $\leq n(t) - N$.

5. Es claro que el sistema perturbado correspondiente a la P-serie inversa de $P(c, y)$ es $\tilde{y}' = -\tilde{f}(y)$. Además, puesto que el desarrollo en P-serie del método adjunto (vease por ejemplo [12], Sección II.8) del método correspondiente a $P(c, y)$, se puede obtener sustituyendo h por $-h$ en la P-serie inversa, los coeficientes $b^*(t)$ del sistema perturbado del método adjunto verifican para cada $t \in TP$

$$b^*(t) = (-1)^{n(t)+1} b(t).$$

Ello implica que para los métodos simétricos (es decir, aquellos que coinciden con su adjunto), $\tilde{f}(y)$ sólo contiene potencias pares de h . Por tanto, teniendo en cuenta la observación 2, se tiene el conocido resultado según el cual el orden de consistencia de los métodos simétricos es siempre par.

6. Procediendo de forma análoga a la observación anterior, se tiene que los coeficientes $c_r^*(t)$ correspondientes al método adjunto de $P(c, y)$ verifican para cada $t \in TP$ y cada $r \in R$

$$c_r^*(t) = (-1)^{n(t)} c_{-r}(t).$$

Ello implica que en el caso de métodos simétricos, para cada $t \in TP$, $c_r(t)$ es un polinomio en r par (respectivamente impar) si $n(t)$ es par (respectivamente impar). De ahí, junto con la observación 4, se puede deducir de nuevo que el orden de consistencia de todo método simétrico es par.

1.8 Métodos de P-series multietapa

En esta sección introduciremos una familia general de métodos de integración del sistema particionado (2), que llamaremos métodos de P-series multietapa, que incluye como casos particulares los métodos de RK, RK particionados, y sus versiones multiderivada.

Definición 1.8.1 Sean $\mathbf{a}_{ij}, \mathbf{b}_i$ ($1 \leq i \leq s$) aplicaciones de TP en R tales que $\mathbf{a}_{ij}(t), \mathbf{b}_i(t)$ son nulos excepto para un número finito de P-árboles y $\mathbf{a}_{ij}(\emptyset) = \mathbf{b}_i(\emptyset) = 0$. El método

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + \sum_{i=1}^s P(\mathbf{b}_i, Y_i), \\ Y_i &= y_0 + \sum_{j=1}^s P(\mathbf{a}_{ij}, Y_j), \quad 1 \leq i \leq s, \end{aligned} \quad (42)$$

es un *método de P-series de s etapas* o simplemente *método de P-series multietapa*.

Podemos expresar dicho método de forma alternativa como

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + \sum_{i=1}^s \sum_{z \in \overline{TP}} \mathbf{b}_i(z) Y_i^{(z)}, \\ Y_i^{(z)} &= \frac{h^{n(z)}}{\sigma(z)} F(z)(Y_i), \\ Y_i &= y_0 + \sum_{j=1}^s \sum_{z \in \overline{TP}} \mathbf{a}_{ij}(z) Y_j^{(z)}. \end{aligned} \quad (43)$$

1.8.1 Condiciones de orden

Se puede demostrar que tanto los Y_i como y_1 admiten un desarrollo formal en P-series. Sean $P(\mathbf{Y}_i, y_0)$ y $P(y_1, y_0)$ dichas P-series; aplicando el teorema de composición de P-series 1.5.5 tenemos que, para $1 \leq i \leq s$,

$$y_1(\emptyset) = \mathbf{Y}_i(\emptyset) = 1,$$

y, para $t \in \overline{TP}$ y $1 \leq i \leq s$,

$$y_1(t) = \sum_{j=1}^s \sum_{z \in \overline{TP}} \mathbf{b}_i(z) \mathbf{Y}_i^{(z)}(t),$$

$$Y_i(t) = \sum_{j=1}^s \sum_{z \in \overline{TP}} a_{ij}(z) Y_j^{(z)}(t),$$

de forma que junto con las fórmulas de la Sección 1.5 podemos calcular recursivamente los coeficientes de dichas series, y por tanto obtener las condiciones de orden de consistencia del método.

Como ejemplo sencillo de un método de P-serie multietapa que no pertenece a las familias clásicas de métodos mencionadas al principio de la sección, consideremos la siguiente familia de métodos, no particionados ($P = 1$) y de una sola etapa:

$$\begin{aligned} Y_1 &= y_0 + h a_{11}(\cdot) F(\cdot)(Y_1) + h^2 a_{11}(\ddagger) F(\ddagger)(Y_1) + \frac{h^3}{2} a_{11}(\heartsuit) F(\heartsuit)(Y_1) \\ &\quad + h^3 a_{11}(\clubsuit) F(\clubsuit)(Y_1), \\ y_1 &= y_0 + h b_1(\cdot) F(\cdot)(Y_1) + h^2 b_1(\ddagger) F(\ddagger)(Y_1) + \frac{h^3}{2} b_1(\heartsuit) F(\heartsuit)(Y_1) \\ &\quad + h^3 b_1(\clubsuit) F(\clubsuit)(Y_1). \end{aligned}$$

Las condiciones para que un método de dicha forma sea de orden ≥ 3 se tendrán, por tanto, obteniendo los primeros coeficientes del desarrollo en B-serie $B(y_1, y_0)$ de y_1 . Aplicando las fórmulas de composición de P-series, por un lado obtenemos

$$\begin{aligned} y_1(\cdot) &= b_1(\cdot), \\ y_1(\ddagger) &= b_1(\cdot) Y_1(\cdot) + b_1(\ddagger), \\ y_1(\heartsuit) &= b_1(\cdot) Y_1(\cdot)^2 + 2b_1(\ddagger) Y_1(\cdot) + b_1(\heartsuit), \\ y_1(\clubsuit) &= b_1(\cdot) Y_1(\ddagger) + b_1(\ddagger) Y_1(\cdot) + b_1(\clubsuit), \end{aligned}$$

y por otro,

$$\begin{aligned} Y_1(\cdot) &= a_{11}(\cdot), \\ Y_1(\ddagger) &= a_{11}(\cdot) Y_1(\cdot) + a_{11}(\ddagger), \end{aligned}$$

de modo que las condiciones para que dicho método sea de orden ≥ 3 son

$$\begin{aligned} b_1(\cdot) &= 1, \\ b_1(\cdot) a_{11}(\cdot) + b_1(\ddagger) &= \frac{1}{2}, \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} b_1(\bullet) a_{11}(\bullet)^2 + 2b_1(\uparrow) a_{11}(\bullet) + b_1(\heartsuit) &= \frac{1}{3}, \\ b_1(\bullet) (a_{11}(\bullet)^2 + a_{11}(\uparrow)) + b_1(\uparrow) a_{11}(\bullet) + b_1(\heartsuit) &= \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

Por ejemplo, si tomamos $a_{11}(t) = 0$ para todo $t \in \overline{TP}$, tenemos que para que el método sea de orden ≥ 3 , los coeficientes $b_1(t)$ han de ser

$$b_1(\bullet) = 1, \quad b_1(\uparrow) = \frac{1}{2}, \quad b_1(\heartsuit) = \frac{1}{3}, \quad b_1(\heartsuit) = \frac{1}{6},$$

que corresponden al método de Taylor de orden 3.

Por otro lado, sabemos que el orden de consistencia de los métodos simétricos es siempre par, de modo si elegimos los $b_1(t)$ y los $a_{11}(t)$ de forma que verifiquen las condiciones de orden de arriba y el método sea simétrico, dicho método será al menos de orden 4. Puede verse que para que sea simétrico, basta que para cada $t \in \overline{TP}$ de orden impar se verifique que $b_1(t) = 2a_{11}(t)$, y que para los $t \in \overline{TP}$ de orden par $b_1(t) = a_{11}(t) = 0$. Con dichas condiciones los coeficientes del método quedan determinados de forma única, y resultan ser

$$\begin{aligned} b_1(\bullet) = 1, \quad b_1(\uparrow) = 0, \quad b_1(\heartsuit) = \frac{1}{12}, \quad b_1(\heartsuit) = -\frac{1}{12}, \\ a_{11}(\bullet) = \frac{1}{2}, \quad a_{11}(\uparrow) = 0, \quad a_{11}(\heartsuit) = \frac{1}{24}, \quad a_{11}(\heartsuit) = -\frac{1}{24}. \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que en ese caso $Y_1 = (y_1 + y_0)/2$, dicho método implícito de orden 4 puede ser expresada como

$$y_1^I = y_0^I + hf^I + \frac{h^3}{24} f_{JK}^I f^J f^K - \frac{h^3}{12} f_J^I f_k^J f^K, \quad (44)$$

donde las componentes de f y sus derivadas parciales están evaluadas en el punto $Y_1 = (y_1 + y_0)/2$.

1.8.2 Métodos Runge-Kutta multiderivada particionados

Sea el operador diferencial $D := f^I(y)(\partial/\partial y^I)$ asociado a la función f . Es claro que si $y(x)$ es solución del sistema (2) se tiene

$$\frac{d^i y}{dx^i} = (D^i y)(y(x)).$$

Definición 1.8.2 Sean ${}^e a_{ij}^{(r)}, {}^e b_i^{(r)} \in R$ ($1 \leq i, j \leq s$, $1 \leq e \leq P$, $r \geq 1$). El método

$$\begin{aligned} {}^e y_1 &= {}^e y_0 + \sum_{r \geq 1} \sum_{i=1}^s {}^e b_i^{(r)} {}^e Y_i^{(r)}, \\ Y_i^{(r)} &= \frac{h^r}{r!} (D^r y)(Y_i), \\ {}^e Y_i &= {}^e y_0 + \sum_{r \geq 1} \sum_{j=1}^s {}^e a_{ij}^{(r)} {}^e Y_j^{(r)}, \end{aligned} \quad (45)$$

donde para cada r mayor que un cierto m todos los coeficientes son nulos, es un método *RK particionado m -derivada de s etapas*, o simplemente método *PRK multiderivada*.

Si el número de partes P en que se ha particionado el sistema (2) es 1, se trata de un método Runge-Kutta multiderivada; en cambio, si $m = 1$ se trata de un método Runge-Kutta particionado, y si $P = 1$ y $m = 1$ al mismo tiempo, es un método de Runge-Kutta.

Por otra parte, estos métodos son un caso particular de métodos de P-series multietapa donde, si $1 \leq i, j \leq s$, $r \geq 1$, $1 \leq e \leq P$, $z \in \overline{TP}_r^e$,

$$a_{ij}(z) = \frac{{}^e a_{ij}^{(r)}}{\gamma(z)}. \quad (46)$$

En efecto, del Lema 1.3.1 y la fórmula (7) se tiene que

$$Y_i^{(r)} = \frac{h^r}{r!} (D^r y)(Y_i) = \sum_{t \in \overline{TP}_r} \frac{h^r}{\sigma(z)\gamma(z)} F(z)(Y_i) = \sum_{t \in \overline{TP}_r} \frac{Y_i^{(z)}}{\gamma(z)}.$$

Por tanto, para cada $r \geq 1$ y $t \in TP$,

$$Y_i^{(r)}(t) = \sum_{z \in \overline{TP}_r} \frac{Y_i^{(z)}(t)}{\gamma(z)} \quad (47)$$

son los coeficientes del desarrollo en P-serie de $Y_i^{(r)}$.

En cuanto a los coeficientes del desarrollo en P-serie de Y_i y y_1 se deduce de (45) que para, $1 \leq i \leq s$, $y_1(\emptyset) = Y_i(\emptyset) = 1$, y para $t \in \overline{TP}$

$$\begin{aligned} y_1(t) &= \sum_{j=1}^s \sum_{r \geq 1} b_j^{(r)} Y_j^{(r)}(t), \\ Y_i(t) &= \sum_{j=1}^s \sum_{r \geq 1} a_{ij}^{(r)}(z) Y_j^{(r)}(t). \end{aligned} \quad (48)$$

En cuanto a los coeficientes $Y_i^{(r)}(t)$, se tiene el siguiente resultado:

Lema 1.8.1 Si $c : TP \rightarrow R$ tal que $c(\emptyset) = 1$, se tiene que para cada $r \geq 1$ y para cada $t, z \in \overline{TP}$

$$c^{(r)}(t \cdot z) = \sum_{l=1}^r \frac{l}{r} c^{(l)}(t) c^{(r-l)}(z), \quad (49)$$

Demostración: Teniendo en cuenta que

$$c^{(r)}(t) = \sum_{z \in TP_r} \frac{c^{(z)}(t)}{\gamma(z)},$$

y aplicando las fórmulas (26) y (6)

$$\begin{aligned} c^{(r)}(t \cdot z) &= \sum_{w \in TP_r} \frac{c^{(w)}(t \cdot z)}{\gamma(w)} = \sum_{w \in TP_r} \frac{c^{(u)}(t) c^{(v)}(z)}{\gamma(u \cdot v)} \\ &= \sum_{l=1}^r \frac{l}{r} \sum_{u \in TP_l} \sum_{v \in TP_{r-l}} \frac{c^{(u)}(t) c^{(v)}(z)}{\gamma(u) \gamma(v)} \\ &= \sum_{l=1}^r \frac{l}{r} c^{(l)}(t) c^{(r-l)}(z). \end{aligned}$$

□

Finalmente, se demuestra por inducción la siguiente generalización a métodos RK multiderivada particionados del Teorema de Kastlunger [19, 14]:

Teorema 1.8.2 Si $c : TP \rightarrow R$ tal que $c(\emptyset) = 1$, se tiene que

$$\frac{h^r}{r!} (D^r y)(P(c, y)) = P(c^{(r)}, y),$$

donde $c^{(r)}(t) = 0$ si $n(z) < r$, y si $t = [t_1, \dots, t_m]_e$ ($1 \leq e \leq P$)

$$c^{(r)}(t) = \frac{1}{r} \sum_{\substack{j_1, \dots, j_m=0 \\ j_1 + \dots + j_m = r-1}}^{r-1} \prod_{i=1}^m c^{(j_i)}(t_i). \quad (50)$$

Este teorema, junto con las igualdades 48, permite obtener de forma recursiva los coeficientes del desarrollo en P-serie $P(y_1, y_0)$ de y_1 , y por tanto las condiciones de orden del método.

Capítulo 2

Métodos simplécticos desarrollables en P-series

2.1 Introducción

Consideremos un sistema Hamiltoniano

$$\dot{p} = -\frac{\partial H(p, q)}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H(p, q)}{\partial p},$$

donde $p = (p^1, \dots, p^d)^T$, $q = (q^1, \dots, q^d)^T$, y donde $H(p, q)$ es una función escalar ($H(p, q)$ es el *Hamiltoniano* del sistema y d es el *número de grados de libertad*). Por sencillez supondremos H definida para todo R^{2d} e indefinidamente derivable. Dicho sistema puede ser expresado de forma alternativa como

$$\dot{y} = f(y) = J^{-1} \frac{\partial H(y)}{\partial y}, \quad (51)$$

donde

$$y = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix}.$$

El flujo $\phi_{t,H}(y)$ de los sistemas Hamiltonianos está caracterizado por el hecho de que para cada $t \in R$, la transformación $\phi_{t,H} : R^{2d} \rightarrow R^{2d}$ es simpléctica. Una transformación $y^* = \psi(y)$ es *simpléctica* si conserva la 2-forma diferencial

$$dp \wedge dq = \sum_{l=1}^d dp^l \wedge dq^l,$$

o, equivalentemente [25, 24],

$$(\psi'(y))^T J \psi'(y) \equiv J,$$

donde $\psi'(y)$ representa el jacobiano de $\psi(y)$ respecto de y .

Un método de integración de un paso para aproximar las soluciones del sistema (51) puede ser representado por una transformación dependiente de la longitud de paso h y del Hamiltoniano H del sistema,

$$y^* = \psi_{h,H}(y), \quad (52)$$

transformación que trata de aproximar en cada paso a $\phi_{h,H}(y)$. Por tanto, parece deseable que la transformación (52) sea también simpléctica, especialmente si estamos interesados en estudiar el comportamiento cualitativo de las soluciones. Se dice que un método de integración (52) es *simpléctico* o *canónico* si para cada h y cada Hamiltoniano H la transformación (52) correspondiente es simpléctica. Sobre métodos simplécticos puede verse [25].

A partir de aquí centraremos nuestra atención en en los métodos simplécticos desarrollables en P-series.

2.2 Métodos simplécticos particionados para sistemas Hamiltonianos generales

En esta sección consideraremos métodos desarrollables en forma de P-series que tratan el sistema (51) de forma particionada con $P = 2$, $\mathcal{J} = \{1, \dots, 2d\}$, $\mathcal{J}_1 = \{1, \dots, d\}$, $\mathcal{J}_2 = \{d + 1, \dots, 2d\}$, de modo que ${}^1y = p$ y ${}^2y = q$.

2.2.1 P-series canónicas

Condiciones de canonicidad necesarias y suficientes

Sea la transformación (52) que admite para h suficientemente pequeño un desarrollo en P-serie de la forma (10). En esta sección demostraremos el siguiente teorema que

da condiciones necesarias y suficientes para que dicha P-serie sea canónica, es decir, para que la transformación $\psi_{h,H}$ sea simpléctica para todo Hamiltoniano H y todo h suficientemente pequeño, condiciones que como veremos seguidamente, generalizan el resultado sobre B-series canónicas de [7].

Para cada P-árbol t definimos su complementario \bar{t} como el P-árbol que resulta de cambiar en t el tipo de nodo de la raíz.

Teorema 2.2.1 *La P-serie $P(\mathbf{c}, y)$ con $\mathbf{c}(\emptyset) = 1$ es canónica si y sólo si se cumplen las dos condiciones siguientes:*

$$\begin{aligned} (a) \quad & \forall t \in \overline{TP}, \quad \mathbf{c}(t) = \mathbf{c}(\bar{t}) \\ (b) \quad & \forall t \in \overline{TP^1}, \forall z \in \overline{TP^2}, \quad \mathbf{c}(t \cdot z) + \mathbf{c}(z \cdot t) = \mathbf{c}(t)\mathbf{c}(z). \end{aligned} \quad (53)$$

En el caso de P-series correspondientes a métodos Runge-Kutta particionados, dichas condiciones ya son presentadas en [18].

Consideremos ahora el caso particular en que la transformación $\psi_{h,H}$ sea desarrollable como una B-serie [15, 12] (es decir, una P-serie con número de partes $P = 1$).

Como ya se ha visto, toda B-serie es equivalente a una P-serie cuyos coeficientes son independientes del tipo de los nodos, de forma que para cada $t \in TP$, el coeficiente $\mathbf{c}(t)$ de dicha P-serie coincide con el coeficiente de la B-series correspondiente al árbol inducido por t . Por tanto, como caso particular del Teorema 2.2.1 se tiene el siguiente resultado, debido a Calvo y Sanz-Serna [7]:

Teorema 2.2.2 *La B-serie de coeficientes $\mathbf{c} : T \rightarrow R$, con $\mathbf{c}(\emptyset) = 1$ es canónica si y sólo si*

$$\forall t, z \in \bar{T}, \quad \mathbf{c}(t \cdot z) + \mathbf{c}(z \cdot t) = \mathbf{c}(t)\mathbf{c}(z). \quad (54)$$

Resultados Previos

De (51) se deduce que $Jf'(y)$ es una matriz simétrica. Por tanto, si definimos

$$F^*(t)(y) = \left(F_{(K)}^I(t)(y) \right)_{I,K=1}^{2d},$$

se tiene de la Definición 1.5.1 de diferenciales elementales generalizadas que $J(F^*(t)(y) + F^*(\bar{t})(y))$ es también simétrica para todo P-árbol t , lo que teniendo en cuenta que $J^T = -J$ se traduce en lo siguiente (a partir de aquí omitiremos el argumento y de las diferenciales elementales):

$$JF^*(t) + F^*(t)^T J = - (JF^*(\bar{t}) + F^*(\bar{t})^T J). \quad (55)$$

Por otra parte, se comprueba sin dificultad que para todo $t \in \overline{TP}$

$$F'(t) = F^*(t) + \sum_{\substack{u,v \in \overline{TP} \\ u \cdot v = t}} k(t,v) F^*(u) F'(v) = \sum_{\substack{u \in \overline{TP}, v \in TP \\ u \cdot v = t}} k(t,v) F^*(u) F'(v), \quad (56)$$

donde $F'(t)(y)$ es el Jacobiano de $F(t)(y)$ respecto de y .

El siguiente lema permitirá demostrar la suficiencia de las condiciones (53) de canonicidad de P-series.

Lema 2.2.3 *Sea el sistema Hamiltoniano (51). Para cada $t^* \in \overline{TP}$, se verifica*

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{t \in \overline{TP}, z \in TP \\ t \cdot z = t^*}} k(t^*, z) (F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t)) \\ &= - \sum_{\substack{t \in \overline{TP}, z \in TP \\ t \cdot z = t^*}} k(t^*, z) (F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t)). \end{aligned}$$

Demostración: Teniendo en cuenta (56),

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{t \in \overline{TP}, z \in TP \\ t \cdot z = t^*}} k(t^*, z) (F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t)) \\ &= \sum_{\substack{t \in \overline{TP}, z \in TP \\ t \cdot z = t^*}} \sum_{\substack{u \in \overline{TP}, v \in TP \\ u \cdot v = t}} k(t^*, z) k(t,v) (F'(v)^T F^*(u)^T J F'(z) + F'(z)^T J F^*(u) F'(v)) \\ &= \sum_{\substack{u \in \overline{TP}, z, v \in TP \\ (u \cdot v) \cdot z = t^*}} k(t^*, z) k(u \cdot v, v) (F'(v)^T F^*(u)^T J F'(z) + F'(z)^T J F^*(u) F'(v)). \end{aligned}$$

Debido a que en las expresiones $(u \cdot v) \cdot z$ y $k((u \cdot v) \cdot z, z) k(u \cdot v, v)$ los P-árboles v, z son intercambiables, se tiene que

$$\sum_{\substack{t \in \overline{TP}, z \in TP \\ t \cdot z = t^*}} k(t^*, z) (F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t))$$

$$= \sum_{\substack{u \in \overline{TP}, z, v \in TP \\ (u \cdot v) \cdot z = t^*}} k((u \cdot v) \cdot z, z) k(u \cdot v, v) F'(v)^T \left(F^*(u)^T J + J F^*(u) \right) F'(v).$$

Ahora bien, teniendo en cuenta (55), se tiene que esta última expresión es la opuesta de la expresión que se obtiene de sustituir en la misma t^* por \bar{t}^* (ya que $\overline{(u \cdot v) \cdot z} = (\bar{u} \cdot v) \cdot z$). \square

El resultado que sigue permitirá demostrar los Lemas 2.2.6 y 2.2.7, los cuales son a su vez la base de la demostración de la necesidad de las condiciones de canonicidad (53). Además, como caso particular de dicho resultado, se tendrá la independencia de las diferenciales elementales para sistemas Hamiltonianos.

En lo que sigue denotaremos por $F_K^I(t)$ a la derivada parcial de $F^I(t)(y)$ respecto de y^K .

Lema 2.2.4 *Dada una familia de P-árboles de orden ≥ 1 , $\mathcal{T} = \{t_1, \dots, t_l\}$, y $m \geq l$, sean $d = n(t_1) + \dots + n(t_l) - l + m$, $\mathcal{J}_1 = \{1, \dots, d\}$, $\mathcal{J}_2 = \{d+1, \dots, 2d\}$, e $\mathcal{J} = \mathcal{J}_1 \cup \mathcal{J}_2$. Denotemos para cada $i \in \mathcal{J}$ por \bar{i} a $i + d$ si $i \in \mathcal{J}_1$, y a $i - d$ si $i \in \mathcal{J}_2$. Dada una partición $\mathcal{P} = \{\mathcal{I}_0, \mathcal{I}_1, \dots, \mathcal{I}_l\}$ del conjunto $\{1, \dots, m, 1+d, \dots, m+d\}$, existe un Hamiltoniano polinómico $H : R^{2d} \rightarrow R$, tal que para el sistema Hamiltoniano (51) correspondiente se verifica:*

1. Para cada $i \in \mathcal{J}$, $f^i(y)$ es o bien idénticamente nula, o bien existe un subconjunto \mathcal{J}' de \mathcal{J} tal que

$$f^i(y) = \pm \prod_{j \in \mathcal{J}'} y^j.$$

2. Si $i \in \mathcal{I}_0$, entonces $H(y)$ no depende de y^i .

3. Para cada $r = 1, \dots, l$, si $z \in \overline{TP}$, $i \in \mathcal{I}_r$, y $j_1, \dots, j_\nu \in \mathcal{J}$, donde $\nu + 1$ es el número de elementos de \mathcal{I}_r , entonces $F_{(j_1, \dots, j_\nu)}^{\bar{i}}(z)(0) + F_{(j_1, \dots, j_\nu)}^{\bar{i}}(\bar{z})(0) \neq 0$ si y sólo si $\mathcal{I}_r = \{i, j_1, \dots, j_\nu\}$, y $z = t_r$ ó $z = \bar{t}_r$.

Demostración: Demostraremos los tres puntos del lema por inducción sobre $N = \text{Max}\{n(t_1), \dots, n(t_l)\}$.

Para $N = 1$, se tiene $m = d$, y tomamos

$$H(y^1, \dots, y^{2d}) = \sum_{k=1}^l \prod_{j \in \mathcal{I}_k} y^j.$$

En ese caso, $f_{j_1, \dots, j_\nu}^{\bar{i}}(y) \equiv \pm H_{i, j_1, \dots, j_\nu}(y)$ es nula en el origen salvo en el caso en que, para algún $r \in \{1, \dots, l\}$, $\mathcal{I}_r = \{i, j_1, \dots, j_\nu\}$, de modo que se verifican 1., 2., y 3.

Para $N \geq 2$, supongamos sin pérdida de generalidad que los P-árboles de \mathcal{T} de orden ≥ 2 son t_1, \dots, t_s . Para cada $r = 1, \dots, s$, existen $u_r, v_r \in \overline{TP}$ tales que $t_r = u_r \cdot v_r$, y tomamos $k_r = m + r$ si $w(v_r) = 1$, y $k_r = m + r + d$ si $w(v_r) = 2$. Construyamos para cada $r = 1, \dots, s$ los conjuntos $\mathcal{I}'_r = \mathcal{I}_r \cup \{k_r\}$, y $\mathcal{I}''_r = \{\bar{k}_r\}$. Sean $\mathcal{T}^* = \{u_1, \dots, u_s, v_1, \dots, v_s, t_{s+1}, \dots, t_l\}$, $m^* = m + s$, y $\mathcal{P}^* = \{\mathcal{I}_0, \mathcal{I}'_1, \dots, \mathcal{I}'_s, \mathcal{I}''_1, \dots, \mathcal{I}''_s, \mathcal{I}_{s+1}, \dots, \mathcal{I}_l\}$. Si consideramos ahora $\mathcal{T}^*, m^*, \mathcal{P}^*$ en lugar de $\mathcal{T}, m, \mathcal{P}$, el correspondiente valor de d no varía, y por hipótesis de inducción existe un Hamiltoniano polinómico $H(y^1, \dots, y^{2d})$ tal que se verifican los puntos 1., 2., y 3. del lema para $\mathcal{T}^*, m^*, \mathcal{P}^*$. Considerando el mismo Hamiltoniano para $\mathcal{T}, m, \mathcal{P}$, es obvio que los puntos 1. y 2. se siguen verificando.

En cuanto al punto 3., sean $z \in \overline{TP}$, $i \in \mathcal{I}_r$ con $1 \leq r \leq s$ (para $r = s+1, \dots, l$ los correspondientes t_r y \mathcal{I}_r ya pertenecen a las familias \mathcal{T}^* y \mathcal{P}^*), y $j_1, \dots, j_\nu \in \mathcal{J}$, donde $\nu + 1$ es el número de elementos de \mathcal{I}_r . Consideremos primero el caso en que $n(z) = 1$. Puesto que por hipótesis de inducción $F_{(j_1, \dots, j_\nu, k_r)}^{\bar{i}}(u_r)(0) + F_{(j_1, \dots, j_\nu, k_r)}^{\bar{i}}(\bar{u}_r)(0) \neq 0$, teniendo en cuenta la definición de diferencial elemental generalizada, y el punto 1., se deduce que $F_{(j_1, \dots, j_\nu)}^{\bar{i}}(z)(0) + F_{(j_1, \dots, j_\nu)}^{\bar{i}}(\bar{z})(0) = \pm f_{(j_1, \dots, j_\nu)}^{\bar{i}}(0)$ ha de ser nulo.

En caso de que $n(z) \geq 2$, sean $z_1, z_2 \in \overline{TP}$ tales que $z_1 \cdot z_2 = z$, entonces

$$\begin{aligned} & F_{(j_1, \dots, j_\nu)}^{\bar{i}}(z)(0) + F_{(j_1, \dots, j_\nu)}^{\bar{i}}(\bar{z})(0) \\ &= \sum_{K=1}^{2d} \left(F_{(j_1, \dots, j_\nu, K)}^{\bar{i}}(z_1)(0) + F_{(j_1, \dots, j_\nu, K)}^{\bar{i}}(\bar{z}_1)(0) \right) F^K(z_2)(0), \end{aligned}$$

y aplicando la hipótesis de inducción, primero para u_r, \mathcal{I}'_r , y seguidamente para v_r, \mathcal{I}''_r se deduce la doble implicación del punto 3. \square

Como caso particular de dicho lema, si para cada $t \in \overline{TP}$, tomamos $\mathcal{T} = \{t\}$, $m = 1$, $d = n(t)$, y $\mathcal{P} = \{\{1\}, \{1 + d\}\}$, se tiene el siguiente resultado:



Lema 2.2.5 Dado $t \in \overline{TP}$, existe un Hamiltoniano polinómico $H : R^{2d} \rightarrow R$ con $d = n(t)$, tal que si $u \in \overline{TP}$,

$$F^1(u)(0) \neq 0 \iff u = t.$$

Como consecuencia inmediata de dicho lema tenemos que si método desarrollable en P-serie ($P=2$) es de orden $\leq N$ para todo sistema Hamiltoniano (51), entonces también lo es para cualquier sistema de la forma (2).

Dada una matriz m , denotaremos por $(m)_{i,j}$ a la componente de m de la fila i y la columna j .

Lema 2.2.6 Dado un $t \in \overline{TP}$, existe un Hamiltoniano polinómico $H : R^{2d} \rightarrow R$ con $d = n(t) + 1$ tal que para el sistema (51) correspondiente se tiene que si $u, v \in TP$, $(F'(u)(0)^T J F'(v)(0))_{1,2+d} \neq 0$ si y sólo si $u = \emptyset$ y $v = t$, ó $u = \bar{t}$ y $v = \emptyset$. Además, se verifica que $(F'(\bar{t})(0)^T J)_{1,2+d} = -(J F'(t)(0))_{1,2+d}$.

Demostración: Siguiendo con la notación anterior, tenemos

$$(F'(u)(0)^T J F'(v)(0))_{1,2+d} = \sum_{K=1}^{2d} \pm F_1^K(u)(0) F_{2+d}^{\bar{K}}(v)(0). \quad (57)$$

Consideramos el Lema 2.2.4, con $\mathcal{T} = \{t\}$, $m = 2$, $d = n(t) + 1$, y $\mathcal{P} = \{\mathcal{I}_0, \mathcal{I}_1\}$ donde $\mathcal{I}_0 = \{1 + d, 2\}$ e $\mathcal{I}_1 = \{1, 2 + d\}$, de modo que existe un Hamiltoniano polinómico $H(y)$ tal que no depende de y^{1+d} ni de y^2 , y que verifica que si $u \in \overline{TP}$, $K \in \mathcal{J}$

$$\begin{aligned} F_{(1)}^K(u)(0) \neq 0 &\iff K \in \mathcal{J}_{w(u)} \text{ y } F_{(\bar{K})}^{1+d}(u)(0) + F_{(\bar{K})}^{1+d}(\bar{u})(0) \neq 0 \\ &\iff K = 2 \text{ y } u = t, \end{aligned} \quad (58)$$

$$\begin{aligned} F_{(2+d)}^K(u)(0) \neq 0 &\iff K \in \mathcal{J}_{w(u)} \text{ y } F_{(\bar{K})}^2(u)(0) + F_{(\bar{K})}^2(\bar{u})(0) \neq 0 \\ &\iff K = 1 + d \text{ y } u = \bar{t}. \end{aligned} \quad (59)$$

Por otro lado, tenemos que $F_{(1)}^2(t)(0) = -F_{(2+d)}^{1+d}(\bar{t})(0)$, de modo que basta con demostrar que para todo $K \in \mathcal{J}$ y todo $u \in \overline{TP}$

$$F_1^K(u)(0) = F_{(1)}^K(u)(0), \quad F_{2+d}^K(u)(0) = F_{(2+d)}^K(u)(0).$$

Demostremos la primera igualdad por inducción sobre $n(u)$, y la segunda de ellas se demuestra de forma totalmente análoga. Es claro que se verifica para $n(u) = 1$. Dado $u \in \overline{TP}$ con $n(u) \geq 2$, de (56) y aplicando la hipótesis de inducción se tiene que

$$F_1^K(u)(0) = F_{(1)}^K(u)(0) + \sum_{\substack{u_1, u_2 \in \overline{TP} \\ u_1 \cdot u_2 = u}} k(u, u_2) F_{(J)}^K(u_1)(0) F_{(1)}^J(u_2)(0).$$

Los sumandos del sumatorio de dicha expresión son todos nulos, ya que de no serlo, corresponderían por (58) a $J = 2$, y por la independencia de $H(y)$ respecto de y^2 , $F_{(2)}^K(u_1)(y) \equiv 0$. \square

Lema 2.2.7 *Dados $t \in TP^1, z \in TP^2$, existe un Hamiltoniano polinómico $H : R^{2d} \rightarrow R$ con $d = n(t) + n(z) + 1$, tal que para el sistema Hamiltoniano correspondiente, dados $u, v \in TP$, se verifica $(F'(u)(0)^T J F'(v)(0))_{1,2+d} \neq 0$ si y sólo si $u = t$ y $v = z$, ó $u = z \cdot t$ y $v = \emptyset$, ó $u = \emptyset$ y $v = t \cdot z$. Además, se tiene que*

$$\begin{aligned} (F'(t)(0)^T J F'(z)(0))_{1,2+d} &= \frac{1}{k(t \cdot z, z)} (F'(t \cdot z)(0)^T J)_{1,2+d} \\ &= \frac{1}{k(z \cdot t, t)} (J F'(z \cdot t)(0))_{1,2+d}. \end{aligned}$$

Demostración: Consideremos el Lema 2.2.4 para $\mathcal{T} = \{t, z\}$, $m = 3$, $d = n(t) + n(z) + 1$, y $\mathcal{P} = \{\mathcal{I}_0, \mathcal{I}_1, \mathcal{I}_2\}$ con $\mathcal{I}_0 = \{1 + d, 2\}$, $\mathcal{I}_1 = \{2 + d, 3 + d\}$, $\mathcal{I}_2 = \{1, 3\}$. Aplicando el Lema 2.2.4, de forma análoga que en la demostración del lema anterior se deduce que, existe un Hamiltoniano polinómico, y que si $u \in \overline{TP}$, $K \in \mathcal{J}$,

$$F_{(1)}^K(u)(0) \neq 0 \text{ si y sólo si } K = 3 + d, \quad u = z, \quad (60)$$

$$F_{(3)}^K(u)(0) \neq 0 \text{ si y sólo si } K = 1 + d, \quad u = z, \quad (61)$$

$$F_{(2+d)}^K(u)(0) \neq 0 \text{ si y sólo si } K = 3, \quad u = t, \quad (62)$$

$$F_{(3+d)}^K(u)(0) \neq 0 \text{ si y sólo si } K = 2, \quad u = t. \quad (63)$$

Además, dicho Hamiltoniano no depende de y^{1+d} ni de y^2 , y por tanto, para todo $K \in \mathcal{J}$ y todo $u \in \overline{TP}$, $F_{(2)}^K(u)(y) \equiv F_{(1+d)}^K(u)(y) \equiv 0$.

De todo ello, y teniendo en cuenta (57), la validez del lema queda probada demostrando las siguientes afirmaciones:

1. $F_1^K(u)(0) \neq 0 \implies K = 3 + d$ y $u = z$, ó $K = 2$ y $u = t \cdot z$,
2. $F_1^{3+d}(z)(0) = F_{(1)}^{3+d}(z)(0)$,
3. $F_{2+d}^K(u)(0) \neq 0 \implies K = 3$ y $u = t$, ó $K = 1 + d$ y $u = z \cdot t$,
4. $F_{2+d}^3(t)(0) = F_{(2+d)}^3(t)(0)$,
5. $F_1^2(t \cdot z)(0) = k(t \cdot z, z)F_1^{3+d}(z)(0)F_{2+d}^3(t)(0)$,
6. $F_{2+d}^{1+d}(z \cdot t)(0) = k(z \cdot t, t)F_1^{3+d}(z)(0)F_{2+d}^3(t)(0)$.

Demostremos 1. por inducción sobre $n(u)$. Si $n(u) = 1$, dicha implicación se verifica, ya que en ese caso $F_1^K(u)(y) \equiv F_{(1)}^K(u)(y)$. En cuanto a los P-árboles u de orden mayor que 1, tenemos que

$$F_1^K(u)(0) = F_{(1)}^K(u)(0) + \sum_{\substack{u_1, u_2 \in \overline{TP} \\ u_1 \cdot u_2 = u}} k(u, u_2)F_{(j)}^K(u_1)(0)F_1^J(u_2)(0). \quad (64)$$

Para que dicha expresión sea no nula, es necesario que, o bien $F_{(1)}^K(u)(0) \neq 0$, en cuyo caso se tendría que $K = 3 + d$ y $u = z$, o bien alguno de los sumandos del sumatorio de la derecha sea no nulo. En ese último caso, aplicando la hipótesis de inducción y que $F_{(2)}^K(u_1)(y) \equiv 0$, tales sumandos no nulos han de corresponder a $J = 3 + d$ y $u_2 = z$, y por (63), a $K = 2$ y $u_1 = t$, de modo que $u = u_1 \cdot u_2 = t \cdot z$. De todo ello se tiene además la igualdad del punto 2.

Las demostraciones de la implicación de 3. y la igualdad de 4., son totalmente análogas a las de los puntos 1. y 2. respectivamente.

En cuanto a las igualdades de los puntos 5. y 6., también son análogas, por lo cual expondremos solamente la demostración de la primera de ellas: Teniendo en cuenta la implicación de 1., y la igualdad (64), se obtiene que $F_1^2(t \cdot z)(0) = k(t \cdot z, z)F_{(3+d)}^2(t)(0)F_1^{3+d}(z)(0)$, de modo que basta con demostrar que $F_{(3+d)}^2(t)(0) = F_{2+d}^3(t)(0)$. Ahora bien, puesto que $F_{(3+d)}^2(t)(0) = F_{(2+d)}^3(t)(0)$, la anterior igualdad se sigue del punto 4. \square

Demostración del teorema de P-series canónicas

Derivando formalmente el desarrollo en P-serie (10) de la transformación $\psi_{h,H}$, se tiene

$$(\psi'_{h,H})^T J \psi'_{h,H} = \sum_{t,z \in TP} \frac{h^{n(t)} h^{n(z)}}{\sigma(t) \sigma(z)} \mathbf{c}(t) \mathbf{c}(z) F'(t)^T J F'(z).$$

La necesidad de las condiciones (53) se sigue de los Lemas 2.2.6 y 2.2.7, considerando las componentes (1, 2) en la expresión anterior.

En cuanto a la suficiencia, aplicando la segunda condición de (53), y teniendo en cuenta el Lema 1.2.2 y que $\mathbf{c}(\emptyset) = 1$

$$\begin{aligned} (\psi'_{h,H})^T J \psi'_{h,H} - J &= \sum_{t \in \overline{TP}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} \mathbf{c}(t) \left(F'(t)^T J + J F'(t) \right) \\ &+ \sum_{t,z \in \overline{TP}} \frac{h^{n(t)} h^{n(z)}}{\sigma(t) \sigma(z)} (\mathbf{c}(t \cdot z) + \mathbf{c}(z \cdot t)) F'(t)^T J F'(z) \\ &= \sum_{t \in \overline{TP}, z \in TP} \frac{h^{n(t \cdot z)}}{\sigma(t \cdot z)} \mathbf{c}(t \cdot z) k(t \cdot, z) \left(F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t) \right) \\ &= \sum_{t^* \in \overline{TP}} \frac{h^{n(t^*)}}{\sigma(t^*)} \mathbf{c}(t^*) \sum_{\substack{t \in \overline{TP}, z \in TP \\ t \cdot z = t^*}} k(t^*, z) \left(F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t) \right). \end{aligned}$$

Si sustituimos t^* por \bar{t}^* en esta última expresión, aplicando la primera condición de (53) y el Lema 2.2.3, se deduce que es igual a su opuesto. \square

Simplificaciones de las condiciones de orden

En [7] se muestra que en el caso no particionado de métodos desarrollables en B-series, las condiciones de canonicidad (54) simplifican las condiciones de orden de tales métodos, de tal forma que el número de ecuaciones de orden independientes que deben verificar se reduce de forma considerable. En concreto, se deduce que para que un método canónico desarrollable en B-serie sea de orden $\geq N$, basta con que verifique una ecuación por cada árbol libre no superfluo de orden $\leq N$. El concepto de árboles libres superfluos aparece por primera vez en [23]. Son superfluos los árboles

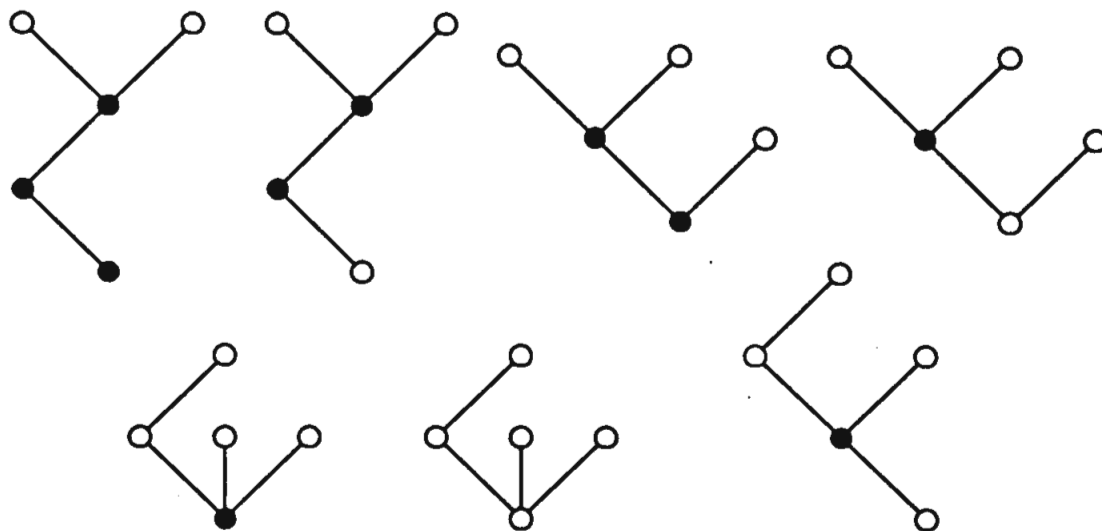


Figura 11: Una clase de equivalencia de P-árboles

libres que pueden ser formados uniendo con un arco las raíces de dos copias de un mismo árbol.

La situación es similar para métodos particionados canónicos desarrollables en P-series. Sea un método de integración del sistema particionado (2) que admite un desarrollo en P-serie con coeficientes $c(t)$ (con $c(\emptyset) = 1$). Supongamos que dicho método es canónico, y por tanto verifica las condiciones (53). Definimos como en [18] la relación de equivalencia \sim sobre TP como la menor relación de equivalencia que cumple que $\forall t \in TP, t \sim \bar{t}$, y $\forall t \in \overline{TP}^1, \forall z \in \overline{TP}^2, t \cdot z \sim z \cdot t$. En la Figura 11 se muestra una clase de equivalencia de dicha relación.

Si un método dado cumple la condiciones (53) y tiene orden de consistencia $\geq N - 1$, teniendo en cuenta que

$$\frac{1}{\gamma(t)} \frac{1}{\gamma(z)} = \frac{1}{\gamma(t \cdot z)} + \frac{1}{\gamma(z \cdot t)},$$

es claro que dados dos P-árboles $t \sim z$ de orden N

$$c(t) = \frac{1}{\gamma(t)} \iff c(z) = \frac{1}{\gamma(z)},$$

de modo que las condiciones (53) simplifican las condiciones de orden de tal forma que para que un método con desarrollo en P-serie de coeficientes $c(t)$ que verifique

(53) tenga para sistemas generales (no necesariamente Hamiltonianos) de la forma (2) orden de consistencia $\geq N$, basta que se verifique una ecuación de orden (11) para un P-árbol de cada clase de equivalencia de TP/\sim .

2.2.2 H-árboles

Obsérvense los P-árboles equivalentes de la Figura 11. Es claro que los árboles inducidos correspondientes son equivalentes entre sí, en el sentido de que sólo difieren en la localización de la raíz. Sin embargo, dicha condición no es suficiente para que dos P-árboles dados sean equivalentes, y no parece fácil determinar de forma directa si dos P-árboles dados son equivalentes.

En esta subsección definiremos dos clases especiales de grafos orientados a los cuales llamaremos H-árboles y H'-árboles. Estableceremos una biyección entre el conjunto de H'-árboles y \overline{TP} , proporcionando una forma alternativa de representar cada P-árbol, así como una forma natural de representar las diferenciales elementales en función de las derivadas parciales del Hamiltoniano. Dicha representación alternativa de los P-árboles permitirá determinar de forma directa si dos P-árboles cualesquiera son equivalentes o no. En este contexto, los H-árboles surgirán como una forma natural de representar las clases de equivalencia de \overline{TP} / \sim .

De este modo, si de las condiciones de orden para métodos particionados (una por cada P-árbol) eliminamos las redundancias que se producen al imponer las condiciones de canonicidad (53), tendremos una condición de orden por cada H-árbol.

Además, como veremos más adelante, los H-árboles servirán asimismo para obtener de una forma directa los Hamiltonianos elementales definidos por Hairer en [18] en función de las derivadas parciales del Hamiltoniano.

Definición de H-árboles etiquetados y H-árboles

Se dice que un *grafo orientado etiquetado* es un par (V, E) , donde V es un conjunto cualquiera, y E es un conjunto de pares ordenados de elementos de E . Los elementos de V son los *vértices* del grafo orientado etiquetado, y los elementos de E , los *arcos*. Dados dos vértices i, j , si $(i, j) \in E$, diremos que el arco (i, j) *sale* del vértice i , y que *entra* al vértice j . Decimos que el *orden* del grafo orientado etiquetado es el número de vértices que tiene.

Es claro que de un grafo orientado etiquetado podemos obtener de forma natural un grafo etiquetado abstrayendo la orientación de los arcos (convirtiéndolos por tanto

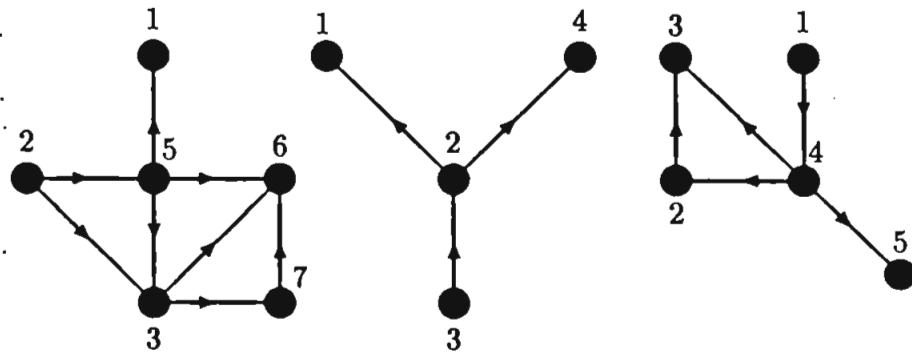


Figura 12: Grafos orientados etiquetados

en aristas). Decimos que dicho grafo etiquetado es el *grafo etiquetado inducido* por el grafo orientado etiquetado.

Los grafos orientados etiquetados son representados gráficamente indicando, en el diagrama correspondiente a su grafo etiquetado inducido, la orientación de cada arco (i, j) por medio de una flecha que va del nodo i al nodo j . En la Figura 12 se encuentran representados varios grafos orientados etiquetados.

Dos grafos orientados etiquetados son *equivalentes* si existe una biyección entre sus respectivos conjuntos de vértices que establece una biyección entre sus conjuntos de arcos. Se dice que una clase de equivalencia de grafos orientados etiquetados es un *grafo orientado*. Llamamos *orden* del grafo orientado al orden de cualquiera de sus representantes.

De forma análoga que en el caso de grafos (no orientados) cada grafo orientado es representado gráficamente eliminando las etiquetas en el diagrama correspondiente a cualquiera de los grafos orientados etiquetados que lo representan.

Por otro lado, es claro que, si dos grafos orientados etiquetados son equivalentes, los grafos etiquetados inducidos por ellos son también equivalentes, de donde se sigue de forma obvia la definición del *grafo inducido* por un grafo orientado.

Decimos que un *H-árbol etiquetado* es un grafo orientado etiquetado que verifica las dos condiciones siguientes:

- (i, j) y (j, i) no son al mismo tiempo arcos del grafo orientado etiquetado.

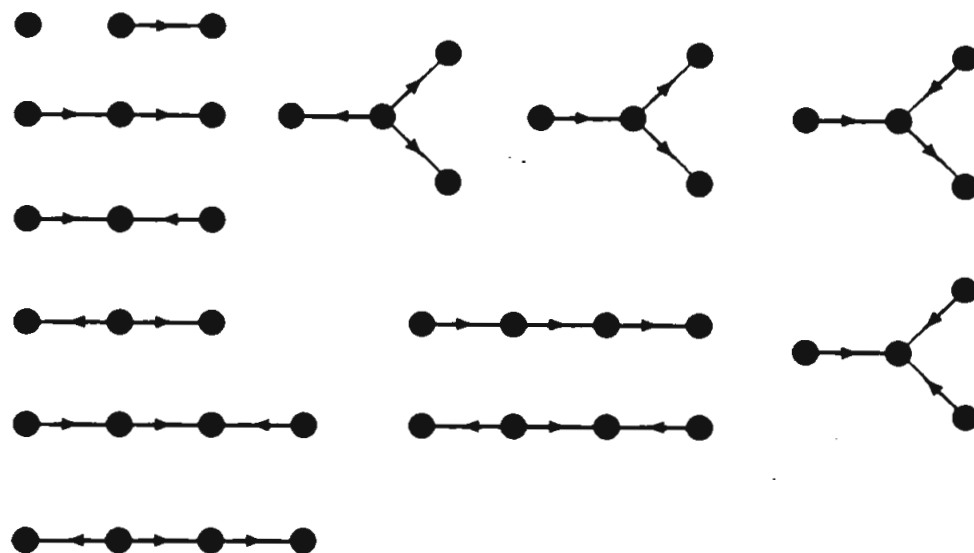


Figura 13: H-árboles de orden ≤ 4

- Su grafo etiquetado inducido es un árbol libre.

Por ejemplo, el grafo orientado etiquetado situado en la parte central de la Figura 12 es un H-árbol etiquetado.

Se comprueba que todo grafo orientado etiquetado equivalente a un H-árbol etiquetado es también un H-árbol etiquetado. Así, decimos que un *H-árbol* es una clase de equivalencia de H-árboles etiquetados. Es claro que el grafo inducido por un H-árbol es un árbol libre. En la Figura 13 pueden verse representados todos los H-árboles de orden ≤ 4 . Denotamos por HT al conjunto de H-árboles.

Un *H'-árbol etiquetado* es un H-árbol etiquetado en el que se destaca un vértice, llamado *raíz*, que puede ser de dos tipos, de tipo *saliente* o de tipo *entrante*. De forma alternativa, y para abreviar, identificaremos el tipo saliente con el número 1, y el entrante con el 2. Así, dado un H-árbol etiquetado $\lambda\omega$, y un vértice i de $\lambda\omega$, denotaremos por $(\lambda\omega, i, a)$ ($a = 1, 2$) al H'-árbol que resulta de tomar, en el H-árbol $\lambda\omega$, al vértice i como raíz de tipo a . Al H-árbol etiquetado $\lambda\omega$ se le llama *H-árbol etiquetado inducido* por el H'-árbol etiquetado.

Dos H'-árboles etiquetados son *equivalentes* si tienen la raíz del mismo tipo, y existe un biyección entre sus conjuntos de vértices tal que lleva de la raíz de uno en

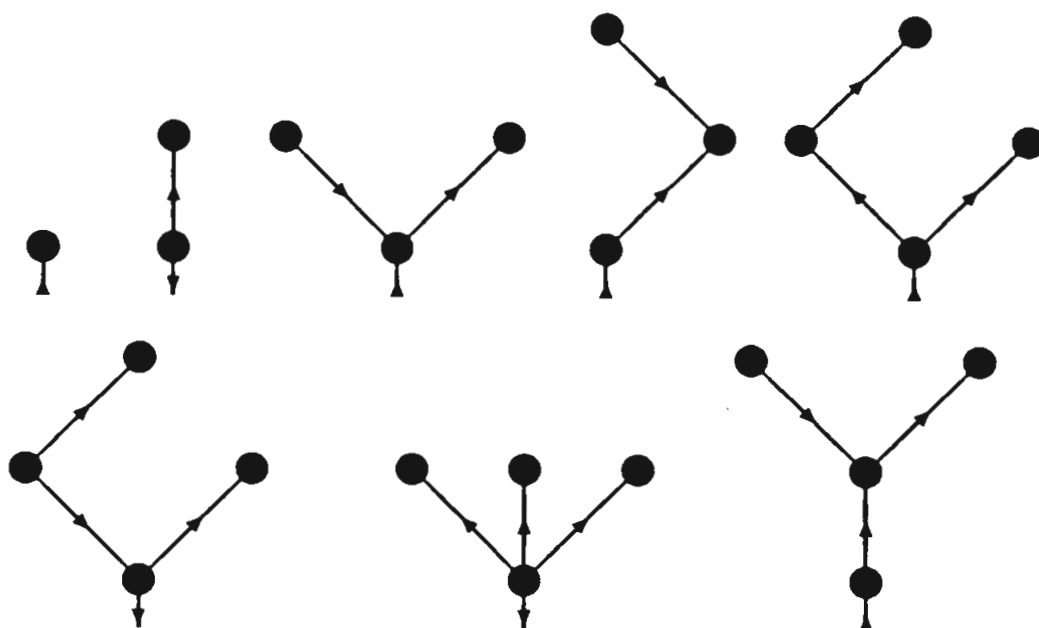


Figura 14: Representación gráfica de H' -árboles

la raíz del otro y establece una biyección entre sus conjuntos de arcos. Un H' -árbol es una clase de equivalencia de H' -árboles etiquetados.

Representaremos los H' -árboles etiquetados por medio del diagrama que se obtiene al añadir en el del H' -árbol inducido, un símbolo en forma de flecha, con un extremo libre y con el otro extremo en la raíz, el cual estará orientado del extremo libre hacia la raíz si ésta es entrante, y en sentido opuesto si la raíz es saliente. En cuanto a la representación gráfica de los H' -árboles, se obtendrá, como es de esperar, suprimiendo las etiquetas en el diagrama de cualquiera de sus representantes. En la Figura 14 se muestran los diagramas correspondientes a varios H' -árboles.

P-árboles, diferenciales elementales y H' -árboles

A cada P-árbol t tenemos asociada una diferencial elemental distinta $F(t)(y)$, que para P-árboles de orden ≥ 1 puede ser expresada como suma de productos de componentes de $f(y)$ y de sus derivadas. En el caso de sistemas Hamiltonianos, ya que para $I = 1, \dots, d$, $f^I(y) = -H_{I+d}(y)$, y $f^{I+d}(y) = H_I(y)$, dichas diferenciales elementales

pueden ser expresadas como suma de productos de derivadas parciales del Hamiltoniano. Veremos que, en ese caso, la representación en términos de las derivadas parciales de $H(y)$ de las diferenciales elementales, nos lleva, de forma natural, a asociar una diferencial elemental a cada H' -árbol. Ello permitirá establecer una biyección entre el conjunto de P -árboles de orden ≥ 1 y el conjunto de H' -árboles.

Veamos el siguiente ejemplo: Consideremos el P -árbol t de la esquina superior izquierda de la Figura 11. La diferencial elemental de t es tal que para $I = 1, \dots, d$, $F^{I+d}(t)(y) \equiv 0$, y

$$F^I(t)(y) = f_J^I(y) f_K^J(y) f_{L+d, M+d}^K(y) f^{L+d}(y) f^{M+d}(y).$$

Aquí y en lo que sigue, siempre que no se especifique lo contrario, consideraremos sumatorios desde 1 a d sobre los índices repetidos. Ahora bien, si f corresponde a un sistema Hamiltoniano, tenemos que para $I = 1, \dots, d$,

$$F^I(t)(y) = -H_{I+d, J}(y) H_{J+d, K}(y) H_{K+d, L+d, M+d}(y) H_L(y) H_M(y).$$

Observese que cada índice repetido, aparece en dos factores, en uno derivando parcialmente respecto de las componentes de p , y en la otra respecto de las componentes correspondientes de q . La diferencial elemental de cualquier P -árbol de orden ≥ 1 puede ser representada de forma análoga, y la estructura de tales expresiones puede ser reflejada por medio de un H' -árbol del modo siguiente: A cada factor le corresponderá un nodo del H' -árbol, y cada índice del sumatorio será asociado a un arco, de tal modo que, para cada nodo, los arcos que entran representarán derivación parcial respecto de las componentes de p , y en cambio, los arcos que salen, derivación parcial respecto de las componentes de q . Finalmente, el factor correspondiente al índice no repetido I , es representado por la raíz del H' -árbol, que será saliente o entrante, si dicho factor es derivado parcialmente por q^I o p^I respectivamente.

En el ejemplo de arriba, el H' -árbol correspondiente al P -árbol t es el de la esquina superior izquierda de la Figura 15.

De este modo, podemos asociar un H' -árbol a cada P -árbol de orden ≥ 1 , pasando de la representación en función de f de la diferencial elemental correspondiente a la representación en función de H . Por otro lado es claro que se puede proceder en sentido inverso.

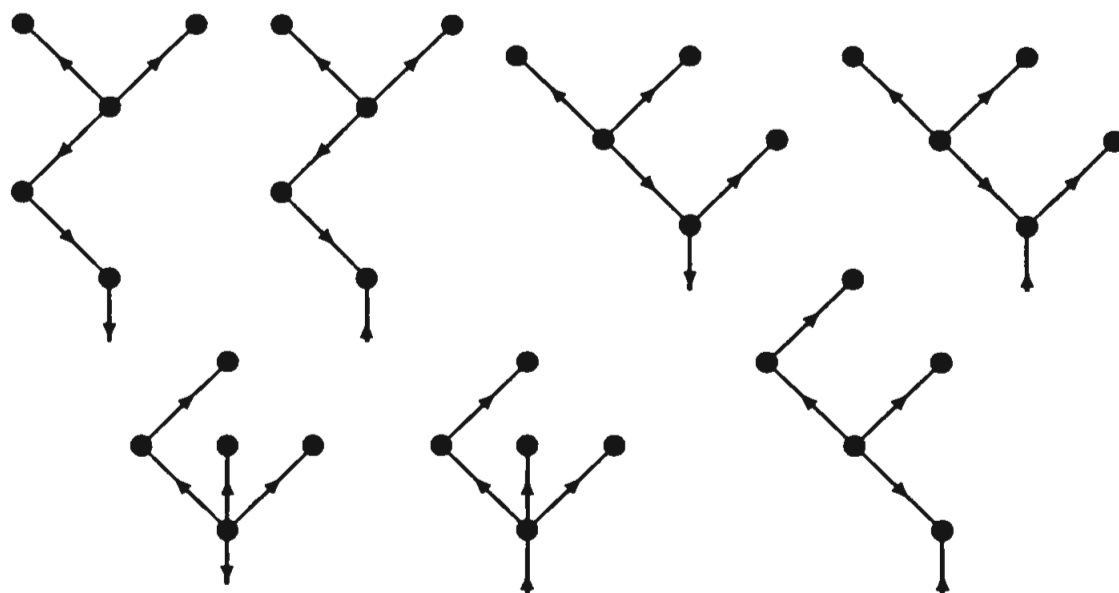


Figura 15: Clase de equivalencia de H'-árboles

De todo ello resulta una biyección entre \overline{TP} y el conjunto de H'-árboles, la cual puede ser descrita a través de sus representaciones gráficas como sigue: Para obtener el H'-árbol correspondiente a un P-árbol t , partimos del árbol inducido por t . La raíz del H'-árbol corresponderá a la raíz del árbol, la cual será del mismo tipo que el del P-árbol (teniendo en cuenta que el tipo saliente equivale al tipo 1, y el entrante al tipo 2). En cuanto a la orientación de los arcos del H'-árbol, si el nodo más alejado de la raíz entre los dos extremos de un arco dado es de tipo 1 (respectivamente, de tipo 2), estará orientado de forma que sale de dicho nodo (respectivamente, entra en dicho nodo). En la Figura 15 se muestran los H'-árboles correspondientes a los P-árboles de la Figura 11.

A partir de ahora identificaremos \overline{TP} con el conjunto de H'-árboles y siempre que no se indique lo contrario, haremos uso de la representación de los H'-árboles.

Volviendo a la clase de equivalencia de P-árboles de la Figura 11, obsérvese que, en su nueva representación en forma de H-árboles, los elementos de la clase sólo difieren entre sí en la localización de la raíz y en el tipo (saliente o entrante) de la misma, es decir, todos inducen el mismo H-árbol.

En general, resulta que dados dos P-árboles t, z con distinto tipo de raíz, se puede

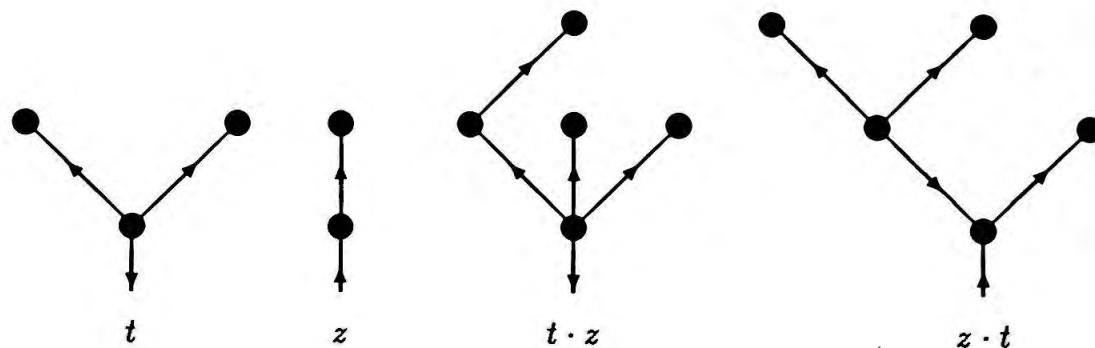


Figura 16: Relación entre $t \cdot z$ y $z \cdot t$

obtener la representación en forma de H'-árbol de $t \cdot z$ a partir de la de $z \cdot t$ (y viceversa), moviendo la raíz a un nodo contiguo, y cambiando a su vez el tipo de la raíz. Vease como ejemplo ilustrativo el de la Figura 16.

Por tanto, con la nueva representación de los P-árboles, la relación de equivalencia de P-árboles definida en la sección anterior adquiere un significado gráfico inmediato: dos P-árboles son equivalentes en su representación como H'-árboles, si y sólo si únicamente difieren en el tipo y en la localización de la raíz. De este modo, las clases de equivalencia de dicha relación de equivalencia de P-árboles son representadas de forma natural por los H-árboles. Así, dado un H-árbol ω , diremos que un P-árbol t pertenece a la clase de equivalencia ω , si la representación en forma de H'-árbol de t induce al H-árbol ω , y en ese caso escribiremos $t \in \omega \cap TP$.

Representación recursiva de H-árboles

Para cada H-árbol ω , denotaremos por $n(\omega)$ al orden de ω . Dados $t_1, \dots, t_m \in \overline{TP}$ denotamos por $\langle t_1, \dots, t_m \rangle$ al H-árbol de orden $n(t_1) + \dots + n(t_m) + 1$ correspondiente a la clase de equivalencia de P-árboles de $[t_1, \dots, t_m]_a$ ($a = 1, 2$). Gráficamente, podemos describir $\langle t_1, \dots, t_m \rangle$ como el H-árbol que resulta de conectar con un nodo adicional las raíces de los P-árboles t_1, \dots, t_m , orientando el arco que une a cada t_i con dicho nodo adicional de tal forma que, si la raíz de t_i es saliente (respectivamente, entrante), dicho arco sale de (respectivamente, entra a) dicha raíz. Representaremos el H-árbol de orden 1 como $\langle \emptyset \rangle$. En la Figura 17 puede verse un ejemplo de

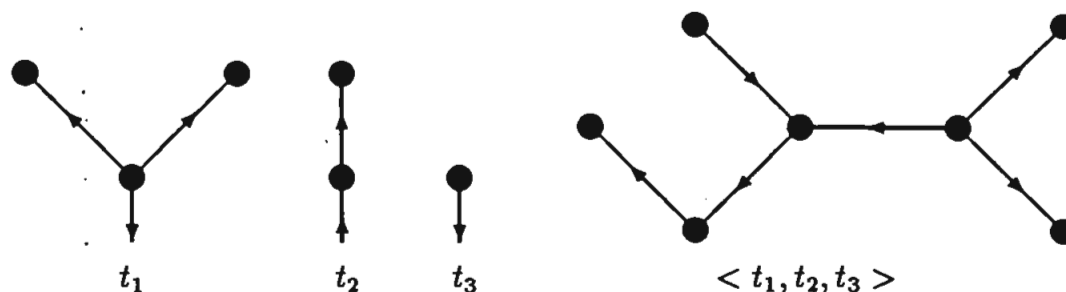


Figura 17: Construcción de $\langle t_1, t_2, t_3 \rangle$ a partir de t_1 , t_2 , y t_3

construcción de $\langle t_1, \dots, t_m \rangle$.

Por otra parte, dados $t, z \in \overline{TP}$ con $w(t) \neq w(z)$ definimos el H-árbol $t * z$, como el H-árbol que representa a la clase de equivalencia de P-árboles de $t \cdot z$ (y $z \cdot t$). Es claro que $t * z$ es de orden $n(t) + n(z)$. Gráficamente, podremos obtener un diagrama del H-árbol $t * z$ a partir de los diagramas (en forma de H-árboles) de t y z , fundiendo por sus extremos libres las dos flechas que indican el tipo de raíz de cada una de ellas, para formar un nuevo arco, que conectara las raíces de t y z .

Dado un P-árbol de la forma $t = [t_1, \dots, t_m]_a$, definimos el peso $\theta(t)$ de t como

$$\theta(t) = \text{Max}\{n(t_1), \dots, n(t_m)\}.$$

Dado un $\omega \in HT$, diremos que $\langle t_1, \dots, t_m \rangle$ es una representación canónica de ω , si minimiza el peso de $[t_1, \dots, t_m]_a$, y se dice que el nodo de ω que está conectado con todos los nodos iniciales de los t_i es un centroide. También diremos en ese caso que $[t_1, \dots, t_m]_a$ ($a = 1, 2$) es un representante canónico de ω .

Dado $\omega \in HT$, $t \in \omega \cap TP$ es un representante canónico de ω si y sólo si para cada $u, v \in \overline{TP}$ tales que $u \cdot v = t$ se tiene que $n(u) \geq n(v)$. En efecto, supongamos que $u \cdot v$ es un representante canónico de un H-árbol ω y que $n(u) < n(v)$. En ese caso es claro que $\theta(u \cdot v) \geq n(v)$, y sin embargo $v \cdot u \in \omega \cap TP$ y $\theta(v \cdot u) = \text{Min}\{n(v) - 1, n(u)\} \leq n(v) - 1$.

Razonando de forma análoga se deduce que $\omega \in HT$ admite dos representaciones canónicas (es decir, tiene dos centroides) si y sólo si existen $t \in TP^1$, $z \in TP^2$ tales que $n(t) = n(z)$ y $t \cdot z \in \omega \cap TP$, en cuyo caso ω puede ser representado de forma

única como $t * z$ con $n(t) = n(z)$. En caso contrario, ω admite una sola representación canónica (es decir, tiene un solo centroide).

Funciones especiales sobre H-árboles

Definimos la simetría $\sigma(\omega)$ de ω , de forma análoga a como se define para árboles libres en [4], como el orden del grupo de simetrías de ω ; es decir, del grupo de isomorfismos sobre las etiquetas de un H-árbol etiquetado que representa a ω que transforman a dicho H-árbol etiquetado en sí mismo.

Definimos además $\beta(\omega)$ como el número de H-árboles etiquetados distintos que representan al H-árbol ω . Es fácil ver que

$$\beta(\omega) = \frac{n(\omega)!}{\sigma(\omega)}.$$

Fijado un $\omega \in HT$ y $t \in \omega \cap TP^a$, con $1 \leq a \leq 2$, sea $\lambda\omega$ un H-árbol etiquetado que representa a ω , consideremos el número de vértices i de $\lambda\omega$ tales que $(\lambda\omega, i, a)$ es un P-árbol etiquetado que representa a t . Dicho número es independiente del representante $\lambda\omega$ de ω elegido, y lo denotaremos por $S(t)$.

Se demuestra sin mayor dificultad que





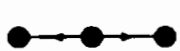



$$S(t)\beta(\omega) = \beta(t), \quad \sigma(\omega) = S(t)\sigma(t). \quad (65)$$

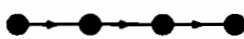
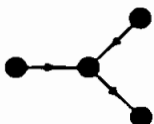



En la Tabla 6 se muestran los $\sigma(\omega)$ y $\beta(\omega)$ para los H-árboles ω de orden ≤ 4 .

Por otro lado, dados $t \in TP^1, z \in TP^2$, sea $\lambda\omega$ un H-árbol etiquetado representante de $t * z$. Fijado un arco (i, j) de $\lambda\omega$, el grafo etiquetado orientado que resulta de quitar dicho arco en $\lambda\omega$ está compuesto de dos H-árboles etiquetados. Sea de tales H-árboles etiquetados $\lambda\omega_i$ el que tiene al vértice i , y $\lambda\omega_j$ el correspondiente al vértice j . Denotamos por $R(t, z)$ al número de arcos (i, j) de $\lambda\omega$ tales que, los P-árboles etiquetados $(\lambda\omega_i, i, 1)$ y $(\lambda\omega_j, j, 2)$ representan respectivamente a los P-árboles t y z . Es claro que dicho número no depende del H-árbol etiquetado representante de $t * z$. Por otro lado, se tiene que

$$R(t, z) = S(t \cdot z)k(t \cdot z, z) = S(z \cdot t)k(z \cdot t, t). \quad (66)$$

Tabla 6: Coeficientes $\sigma(\omega)$ y $\beta(\omega)$ de H-árboles ω de orden ≤ 4

ω	$\sigma(\omega)$	$\beta(\omega)$
	1	1
	1	2
	1	6
	2	3
	2	3
	1	24
	1	24
	1	24

ω	$\sigma(\omega)$	$\beta(\omega)$
	1	24
	2	12
	2	12
	6	4
	6	4

Ya que, si t es representante canónico de algún H-árbol, $S(t) = 1$, la anterior expresión nos permite obtener de forma recursiva tanto los $S(t)$ como los $R(t, z)$ a partir de distintos valores de $k(\cdot, \cdot)$.

Por otra parte, se puede obtener, tanto directamente como a partir de (8) y (65), que dados $t \in TP^1, z \in TP^2$

$$\sigma(t * z) = R(t, z)\sigma(t)\sigma(z). \quad (67)$$

2.2.3 Número de condiciones de orden de métodos particionados canónicos

El número de condiciones de orden que debe de verificar un método desarrollable en P-serie para que sea de orden N coincide con el número de P-árboles no vacíos de orden $\leq N$.



Por otra parte, el número de condiciones de orden que debe verificar un método canónico desarrollable en P-serie para asegurar orden de consistencia N , coincide con el número de H-árboles de orden $\leq N$.

Sea a_n es número de P-árboles $t \in TP^1$ de orden n . Se tiene de forma análoga que en [8] (2.3.4.4) para árboles con raíz, que ([12], ejercicio 1 de II.14):

$$a_n = \sum_{j_1+2j_2+\dots+kj_k=n-1} \binom{2a_1+j_1-1}{j_1} \cdot \binom{2a_2+j_2-1}{j_2} \dots \binom{2a_k+j_k-1}{j_k},$$

y si consideramos la función generatriz $A(z) = a_1z + a_2z^2 + a_3z^3 + \dots$, entonces¹

$$A(z) = z(1-z)^{-2a_1}(1-z^2)^{-2a_2} \dots (1-z^3)^{-2a_3} \dots$$

Sea b_n el número de H-árboles distintos de orden n . Teniendo en cuenta las consideraciones de la subsección anterior, podemos obtener b_n restando a a_n los dos siguientes números:

1. El número de P-árboles $t \in TP^1$ de orden n que no son representantes canónicos de ningún H-árbol. Tales P-árboles pueden descomponerse de forma única como $u \cdot v$, donde $u \in TP^1, v \in \overline{TP}$ y $n(u) < n(v)$.
2. La mitad del número de P-árboles $t \in TP^1$ de orden n que son representantes canónicos de un H-árbol con dos centroides (es decir, con dos representantes canónicos de TP^1). Tales P-árboles pueden ser representados de forma única como $u \cdot v$, donde $u \in TP^1, v \in \overline{TP}$ y $n(u) = n(v)$.

Por tanto, el número de H-árboles de orden n es

$$b_n = a_n - (a_1a_{n-1} + a_2a_{n-2} + \dots + a_{n-2}a_2 + a_{n-1}a_1).$$

De este modo, si consideramos la función generatriz $B(z) = b_1z + b_2z^2 + b_3z^3 + \dots$, resulta que

$$B(z) = A(z) - (A(z))^2.$$

En la Tabla 7 pueden verse los primeros a_n y b_n .

¹Tomando logaritmos en ambos lados de dicha igualdad, se obtiene la siguiente expresión de la función generatriz, $A(z) = z \exp(2(A(z) + \frac{1}{2}A(z^2) + \frac{1}{3}A(z^3) + \dots))$, igualdad que permite obtener fórmulas eficientes para calcular recursivamente los a_i (vease por ejemplo, para el caso de árboles con raíz, el ejercicio 2. de 2.3.4.4 de [8]).

Tabla 7: N° de $t \in TP^1$ de orden n y N° de H-árboles de orden n

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
a_n	1	2	7	26	107	458	2058	9498	44947	216598
b_n	1	1	3	8	27	91	350	1376	5743	24635

2.2.4 Hamiltonianos elementales de H-árboles y H-series

El concepto de Hamiltoniano elemental es debido a Hairer [18], y aparece, en el contexto del análisis regresivo de métodos particionados, al tratar de encontrar, dada una P-serie $P(b, y)$, una serie formal de funciones escalares cuyo gradiente sea $JP(b, y)$.

Hamiltonianos elementales

En la subsección anterior establecíamos la biyección entre el conjunto de P-árboles de orden ≥ 1 y el conjunto de H-árboles a través de la representación de las diferenciales elementales de P-árboles en términos de las derivadas parciales del Hamiltoniano H . Dicha representación de las diferenciales elementales puede ser formalizada como sigue: Dado un $t \in TP^a$ de orden n , sea ω el H-árbol que representa a la clase de equivalencia de P-árboles a la que pertenece t . Sea $\lambda\omega$ un H-árbol etiquetado que represente a ω , con conjunto de vértices $\{1, \dots, n\}$, y conjunto de arcos E . En ese caso, existe al menos un vértice i de $\lambda\omega$ tal que $(\lambda\omega, i, a) = t$. Puede demostrarse que en ese caso, para $I = 1, \dots, d$,

$$F^I(t)(p, q) = \pi(t) \sum_{\substack{J_{kj}=1 \\ (k,j) \in E}}^d -\frac{\partial \mathcal{H}_i(p, q)}{\partial q^I} \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^n \mathcal{H}_l(p, q) \quad \text{si } a = 1, \quad (68)$$

$$F^{I+d}(t)(p, q) = \pi(t) \sum_{\substack{J_{kj}=1 \\ (k,j) \in E}}^d \frac{\partial \mathcal{H}_i(p, q)}{\partial p^I} \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^n \mathcal{H}_l(p, q) \quad \text{si } a = 2, \quad (69)$$

donde fijado un i , si $\{j / (i, j) \in E\} = \{j_1, \dots, j_l\}$ y $\{k / (k, i) \in E\} = \{k_1, \dots, k_m\}$

$$\mathcal{H}_i(p, q) = \frac{\partial^{l+m} H(p, q)}{\partial p^{j_1} \dots \partial p^{j_l} \cdot \partial q^{k_1} \dots \partial q^{k_m}}, \quad (70)$$

y donde $\pi(t) = (-1)^{\delta(t)}$, siendo $\delta(t)$ el número de vértices distintos de la raíz de tipo 1 del P-árbol t (en términos de la representación como H-árbol de t , $\delta(t)$ es el número de arcos (i, j) tales que el vértice i es hijo del vértice j). Decimos que $\pi(t)$ es la *paridad* del P-árbol t . Se comprueba fácilmente que con la paridad así definida se verifica

$$\pi(t) = \pi(\bar{t}) \quad \forall t \in \overline{TP}, \quad (71)$$

$$\pi(t \cdot z) = -\pi(z \cdot t) \quad \forall t \in TP^1, \forall z \in TP^2. \quad (72)$$

La representación de las diferenciales elementales de (68) y (69) sugieren la definición de una función escalar para cada H-árbol. Dado un $\omega \in HT$, definimos el *Hamiltoniano elemental* de ω como la función escalar $H(\omega) : R^{2d} \rightarrow R$ definida como sigue: Si $\omega = \langle \emptyset \rangle$, $H(\omega)(y) = H(y)$. En cuanto a H-árboles ω con $n = n(\omega) \geq 2$, consideremos un H-árbol etiquetado que represente a ω de tal forma que los vértices están etiquetados de 1 a n , y E es el conjunto de arcos orientados (i, j) correspondiente $(1 \leq i, j \leq n)$. Se define para cada $y \in R^{2d}$

$$H(\omega)(y) = \sum_{\substack{j_{k,j}=1 \\ (k,j) \in E}}^d \prod_{i=1}^n \mathcal{H}_i(y),$$

donde los $\mathcal{H}_i(y)$ representan a las mismas derivadas parciales de H que en (70).

Es claro que dicha definición no depende del H-árbol etiquetado elegido como representante de ω . Esta definición de Hamiltoniano elemental es esencialmente la misma que la introducida por Hairer en [18]. De hecho, puede verse que si $\omega = \langle t_1, \dots, t_m, z_1, \dots, z_l \rangle$, donde los $t_i \in TP^1$ y los $z_i \in TP^2$, entonces

$$H(\omega) = \pi(t) \frac{\partial^{m+l} H}{\partial q^{J_1} \dots \partial q^{J_m} \partial p^{K_1} \dots \partial p^{K_l}} F^{J_1}(t_1) \dots F^{J_m}(t_m) F^{K_1}(z_1) \dots F^{K_l}(z_l),$$

donde se sigue manteniendo el convenio de considerar sumatorios de 1 a d sobre los índices repetidos.

Por otra parte, se tiene que, si $t, z \in \overline{TP}$ con $w(t) \neq w(z)$,

$$H(t * z)(y) = \pi(t \cdot z) F(t)(y)^T J^T F(z)(y), \quad (73)$$

o, de forma alternativa, si $t \in TP^1, z \in TP^2$,

$$H(t * z)(y) = \pi(t)\pi(z) {}^1F(t)(y)^T {}^2F(z)(y).$$

En cuanto a las derivadas parciales de $H(\omega)(y)$ tenemos el siguiente resultado, que corresponde al Lema 8 de [18]:

Lema 2.2.8 *Sea el sistema Hamiltoniano (51). Dado un H-árbol ω , se tiene que, si $1 \leq I \leq d$,*

$$\begin{aligned} \frac{\partial H(\omega)(y)}{\partial q^I} &= - \sum_{t \in \omega \cap TP^1} S(t) \pi(t) F^I(t)(y), \\ \frac{\partial H(\omega)(y)}{\partial p^I} &= \sum_{t \in \omega \cap TP^2} S(t) \pi(t) F^{I+d}(t)(y). \end{aligned} \quad (74)$$

Demostración: Si $\omega = \langle \emptyset \rangle$, se tiene de forma trivial. Para H-árboles de orden ≥ 2 , demostraremos solamente la primera igualdad (la demostración de la segunda es totalmente análoga).

Sea $n = n(\omega)$. De la definición de $H(\omega)$ se tiene que dado un H-árbol etiquetado $\lambda\omega$ que representa a ω , con conjunto de vértices $\{1, \dots, n\}$ y conjunto de arcos E

$$\frac{\partial H(\omega)(y)}{\partial q^I} = \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{J_{k_j=1} \\ (k,j) \in E}}^d \frac{\partial \mathcal{H}_i(y)}{\partial q^I} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq i}}^n \mathcal{H}_i(y).$$

Se observa que el sumatorio interior coincide con $-\pi(t)F^I(t)(y)$, donde el P-árbol t es el representado por $(\lambda\omega, i, 1)$. Además, por definición de $S(t)$, dado un $t \in \omega \cap TP^1$, $(\lambda\omega, i, 1)$ representa a t para $S(t)$ vértices i distintos. \square

H-series

Dado $\phi : HT \rightarrow R$, decimos que la serie formal

$$\mathcal{H}(\phi, y) = \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \phi(\omega) H(\omega)(y)$$

es una H-serie de coeficientes $\phi(\omega)$.

Denotamos por $\dot{\mathcal{H}}(\phi, y)$ a la serie formal que resulta de derivar parcialmente la H-serie $\mathcal{H}(\phi, y)$ respecto de h .

Definimos asimismo la P-serie inducida por la H-serie de coeficientes $\phi : HT \rightarrow R$ como la P-serie de coeficientes $\phi^* : TP \rightarrow R$ tal que $\phi^*(\emptyset) = 0$ y para cada $t \in \omega \cap TP$,

$$\phi^*(t) = \pi(t)\phi(\omega).$$

Como aplicación del Lema 2.2.8 tenemos el siguiente resultado:

Lema 2.2.9 *Dada una H-serie $\mathcal{H}(\phi, y)$, la P-serie inducida cumple que*

$$P(\phi^*, y) = J^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}(\phi, y)}{\partial y}.$$

Por otra parte, definimos los coeficientes $\mathbf{b}^* : HT \rightarrow R$ de la H-serie inducida por una P-serie de coeficientes $\mathbf{b} : TP \rightarrow R$ del siguiente modo: para cada $\omega \in HT$

$$\mathbf{b}^*(\omega) = \frac{1}{2n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap TP} \pi(t) S(t) \mathbf{b}(t).$$

Es claro que para todo $\phi : HT \rightarrow R$, se tiene que $\phi^{**} \equiv \phi$. En cambio, dado un $\mathbf{b} : TP \rightarrow R$, en general no se cumple $\mathbf{b}^{**} \equiv \mathbf{b}$.

Lema 2.2.10 *Dado $\mathbf{b} : TP \rightarrow R$, si se verifican las condiciones siguientes*

$$\begin{aligned} \mathbf{b}(\emptyset) &= 0 \\ \forall t \in \overline{TP}, \quad \mathbf{b}(\bar{t}) &= \mathbf{b}(t), \\ \forall t \in TP^1, \forall z \in TP^2, \quad \mathbf{b}(t \cdot z) + \mathbf{b}(z \cdot t) &= 0, \end{aligned} \tag{75}$$

*se tiene que $\mathbf{b}^{**} \equiv \mathbf{b}$.*

Demostración: Dicha identidad si se cumple si $\mathbf{b}(\emptyset) = 0$ y $\pi(t)\mathbf{b}(t)$ se mantiene constante para todo P-árbol t equivalente, es decir, si

1. Es independiente del tipo de raíz de t , que teniendo en cuenta (71) se reduce a la segunda condición del lema.
2. Es independiente de la localización de la raíz de t , para lo cual basta con que $\pi(t)\mathbf{b}(t)$ coincida para todo par de P-árboles con raíces contiguas y de distinto tipo, lo cual se traduce aplicando (72) en la tercera condición.

□

Todo ello, junto con el Lema 2.2.8, nos lleva al siguiente resultado:

Teorema 2.2.11 *Dada una P-serie $P(\mathbf{b}, y)$, se tiene que $JP(\mathbf{b}, y)$ es el gradiente de una función escalar si y sólo si los coeficientes $\mathbf{b}(t)$ verifican las condiciones (75). En ese caso se tendrá en concreto que*

$$P(\mathbf{b}, y) = J^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{b}^*, y)}{\partial y} \tag{76}$$

Demostración: La suficiencia de dichas condiciones así como la igualdad (76) se deducen del Lema 2.2.9 y 2.2.10.

En cuanto a la necesidad, para que $JP(\mathbf{b}, y)$ sea el gradiente de una función escalar es condición necesaria (y suficiente) que su matriz Jacobiana sea simétrica, que teniendo en cuenta que $J^T = -J$, se traduce en que

$$J \frac{\partial P(\mathbf{b}, y)}{\partial y} + \left(\frac{\partial P(\mathbf{b}, y)}{\partial y} \right)^T J \equiv 0. \quad (77)$$

Si consideramos el sistema (2) con $f(y) \equiv 0$, de dicha identidad se deduce que $\mathbf{b}(\emptyset) = 0$.

Por otra parte, si dado un $t \in \overline{TP}$ consideramos el sistema Hamiltoniano construido en el Lema 2.2.6, tomando en la identidad (77) la componente $(1, 2 + d)$, se tiene la segunda condición de (75).

Finalmente, dados $t \in \overline{TP}^2$, $z \in \overline{TP}^2$, si consideramos en (77) la componente $(1, 2 + d)$ del Lema 2.2.7, se tiene la tercera condición de (75). \square

Independencia de los Hamiltonianos elementales

Nos planteamos ahora si los Hamiltonianos elementales $H(\omega)(y)$ son independientes en el sentido de que si para todo $y \in R^{2d}$, y para todo Hamiltoniano H suficientemente regular se verifica

$$\sum_{\substack{\omega \in HT \\ n(\omega) \leq N}} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \phi(\omega) H(\omega)(y) = 0,$$

entonces se tiene que $\phi(\omega) = 0$ para todo $\omega \in HT / n(\omega) \leq N$. Si derivamos parcialmente respecto a y dicha expresión y premultiplicamos por J^{-1} , obtenemos

$$\sum_{\substack{t \in \overline{TP} \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} \phi^*(t) F(t)(y) \equiv 0.$$

De este modo, la independencia de las diferenciales elementales para sistemas Hamiltonianos, establecida en el Lema 1.4.1, implica la independencia de los Hamiltonianos elementales.

2.2.5 Análisis regresivo de métodos canónicos

En esta sección demostraremos de forma alternativa el resultado principal de [18], es decir, que si el sistema (2) es Hamiltoniano, el sistema perturbado (37) correspondiente a un método canónico es Hamiltoniano. Ello viene a afirmar que la solución numérica dada por un método particionado canónico al integrar un sistema Hamiltoniano, se encuentra muy próxima a la solución exacta de otro sistema Hamiltoniano perturbación del original. Dicha propiedad de los métodos canónicos, hace que tales métodos resulten muy adecuados para estudiar numéricamente el comportamiento cualitativo de sistemas Hamiltonianos.

Para que el sistema (37) sea Hamiltoniano, en virtud del Teorema 2.2.11, es condición necesaria y suficiente que se verifiquen las condiciones (75). Por otra parte, si un método de integración con desarrollo en P-serie $P(\mathbf{c}, y)$ es canónico, y por tanto verifica las condiciones (53), de la observación 1. de la Sección 1.7 se deduce que para todo entero r la P-serie $P(\mathbf{c}_r, y)$ es también canónica, es decir verifica las condiciones (53). Y puesto que para todo $r \in \mathbb{R}$ $(\mathbf{c}_r(t \cdot z) + \mathbf{c}_r(z \cdot z) - \mathbf{c}_r(t)\mathbf{c}_r(z))$ es un polinomio en r , se tiene que dicha expresión es también nula para los r no enteros.

El siguiente resultado (que corresponde al Teorema 6 de [18]) nos asegura que si el método de integración es canónico (y por tanto, según el razonamiento arriba desarrollado también la P-serie $P(\mathbf{c}_r, y)$), los coeficientes $\mathbf{b}(t)$ verifican las condiciones (75), lo que aplicando el Lema 2.2.9 implica que el sistema perturbado (37) será Hamiltoniano.

Lema 2.2.12 *Dados $\mathbf{b}, \mathbf{c}_r : TP \rightarrow R$ que verifican (39), se tienen las siguientes implicaciones*

$$\forall t \in \overline{TP}, \mathbf{b}(t) = \mathbf{b}(\bar{t}) \iff \forall t \in \overline{TP}, \forall r \in R, \mathbf{c}_r(t) = \mathbf{c}_r(\bar{t}), \quad (78)$$

$$\forall t \in TP^1, \forall z \in TP^2, \mathbf{b}(t \cdot z) + \mathbf{b}(z \cdot t) = 0 \iff \quad (79)$$

$$\forall t \in TP^1, \forall z \in TP^2, \forall r \in R, \mathbf{c}_r(t \cdot z) + \mathbf{c}_r(z \cdot t) = \mathbf{c}_r(t)\mathbf{c}_r(z).$$

Demostración: La doble implicación (78) se tienen directamente de las fórmulas (41), ya que $\mathbf{c}^{(z)}(t) = \mathbf{c}^{(\bar{z})}(\bar{t})$.

En cuanto a la implicación (79), de (39) y (1.5.8) se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr}(\mathbf{c}_r(t \cdot z)) &= \sum_{u,v \in \overline{TP}} \mathbf{b}(u \cdot v) \mathbf{c}_r^{(u)}(t) \mathbf{c}_r^{(v)}(z) + \sum_{u \in \overline{TP}} \mathbf{b}(u) \mathbf{c}_r^{(u)}(t) \mathbf{c}_r(z) \\ &= \sum_{u,v \in \overline{TP}} \mathbf{b}(u \cdot v) \mathbf{c}_r^{(u)}(t) \mathbf{c}_r^{(v)}(z) + \mathbf{c}_r(z) \frac{d}{dr} \mathbf{c}_r(t), \end{aligned}$$

y por tanto

$$\frac{d}{dr}(\mathbf{c}_r(t \cdot z) + \mathbf{c}_r(z \cdot t) - \mathbf{c}_r(t) \mathbf{c}_r(z)) = \sum_{u,v \in \overline{TP}} (\mathbf{b}(u \cdot v) + \mathbf{b}(v \cdot u)) \mathbf{c}_r^{(u)}(t) \mathbf{c}_r^{(v)}(z),$$

y puesto que $\mathbf{c}_0(t) = 0 \quad \forall t \in \overline{TP}$, se tiene directamente la implicación \Leftarrow , mientras que la implicación recíproca se tiene de la misma expresión por inducción, ya que en el sumatorio de la derecha los sumandos correspondientes a $u, v \in \overline{TP} / n(u) \geq n(t)$ o $n(v) \geq n(z)$ son nulos. \square

De todo ello, y aplicando el Teorema 1.7.2, se tiene el siguiente resultado:

Teorema 2.2.13 *La solución numérica $y_1 = (p_1, q_1)$ que resulta de aplicar un paso de longitud h de un método canónico desarrollable en P -serie a un sistema Hamiltoniano (51) con Hamiltoniano de clase $N + 1$, verifica $y_1 = \tilde{y}(x_0 + h) + O(h^{N+1})$, donde $\tilde{y}(x) = (\tilde{p}(x), \tilde{q}(x))$ es la solución exacta del sistema perturbado*

$$\tilde{p}' = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q}(\tilde{p}, \tilde{q}), \quad \tilde{q}' = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p}(\tilde{p}, \tilde{q}),$$

y donde el Hamiltoniano perturbado \tilde{H} está dado por

$$\tilde{H}(y) = \sum_{\substack{\omega \in HT \\ n(\omega) \leq N}} \frac{h^{n(\omega)-1}}{\sigma(\omega)} \phi(\omega) H(\omega)(y),$$

es decir, $h\tilde{H}(y) = \mathcal{H}(\phi, y)$, donde

$$\phi(\omega) = \begin{cases} \mathbf{b}^*(\omega) & n(\omega) \leq N \\ 0 & n(\omega) > N \end{cases}$$

2.2.6 Composición de H-series con P-series

En esta sección probaremos que la composición de una H-serie con una P-serie es asimismo otra H-serie, y obtendremos fórmulas que nos permitirán calcular los coeficientes de dicha H-serie en términos de los coeficientes de la H-serie y la P-serie originales.

Lema 2.2.14 Sean $\mathbf{a}, \mathbf{b} : TP \rightarrow R$ con $\mathbf{a}(\emptyset) = \mathbf{b}(\emptyset) = 0$, entonces

$$P(\mathbf{a}, y)^T J^T P(\mathbf{b}, y) = \mathcal{H}(\mathbf{a} * \mathbf{b}, y),$$

donde para cada $\omega \in HT$

$$(\mathbf{a} * \mathbf{b})(\omega) = \sum_{\substack{t, z \in TP \\ t * z = \omega}} R(t, z) \pi(t \cdot z) \mathbf{a}(t) \mathbf{b}(z).$$

Demostración: Debido a que si las raíces de t y z son del mismo tipo se verifica $F(t)(y)^T J^T F(z)(y) \equiv 0$, y aplicando (67) y (73) se tiene que

$$\begin{aligned} P(\mathbf{a}, y)^T J^T P(\mathbf{b}, y) &= \sum_{t, z \in TP} \frac{h^{n(t)} h^{n(z)}}{\sigma(t) \sigma(z)} \mathbf{a}(t) \mathbf{b}(z) F(t)(y)^T J^T F(z)(y) \\ &= \sum_{\substack{t, z \in TP \\ \omega(t) \neq \omega(z)}} \frac{h^{n(t * z)}}{\sigma(t * z)} R(t, z) \mathbf{a}(t) \mathbf{b}(z) F(t)(y)^T J^T F(z)(y) \\ &= \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \sum_{\substack{t, z \in TP \\ t * z = \omega}} R(t, z) \mathbf{a}(t) \mathbf{b}(z) H(\omega)(y) \\ &= \mathcal{H}(\mathbf{a} * \mathbf{b}, y). \end{aligned}$$

□

Lema 2.2.15 Sea $\mathbf{c} : TP \rightarrow R$ con $\mathbf{c}(\emptyset) = 1$, se tiene que

$$H(P(\mathbf{c}, y)) = \mathcal{H}(\bar{\mathbf{c}}, y),$$

donde para cada $\omega \in HT$

$$\bar{\mathbf{c}}(\omega) = (\mathbf{c}')^*(\omega) = \frac{1}{2n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap TP} \pi(t) S(t) \mathbf{c}'(t). \quad (80)$$

Demostración: Es claro que basta con demostrar que

$$\frac{d}{dh}H(P(\mathbf{c}, y)) = \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)-2}}{\sigma(\omega)} n(\omega)(n(\omega) - 1) \bar{c}(\omega) H(\omega)(y).$$

Si denotamos por $H'(y)$ al gradiente (como vector fila) de $H(y)$,

$$\begin{aligned} h^2 \frac{\partial}{\partial h} H(P(\mathbf{c}, y)) &= h^2 H'(P(\mathbf{c}, y)) \frac{\partial}{\partial h} P(\mathbf{c}, y) \\ &= h f(P(\mathbf{c}, y))^T J^T h \frac{\partial}{\partial h} P(\mathbf{c}, y) \\ &= P(\mathbf{c}', y)^T J^T h \frac{\partial}{\partial h} P(\mathbf{c}, y). \end{aligned}$$

Por tanto, en virtud del Lema 2.2.14, basta con probar que para cada $\omega \in HT$

$$n(\omega)(n(\omega) - 1) \bar{c}(\omega) = \sum_{\substack{t, z \in \overline{TP} \\ t * z = \omega}} R(t, z) \pi(t \cdot z) \mathbf{c}'(t) n(z) \mathbf{c}(z). \quad (81)$$

Pero teniendo en cuenta (16) y que para cada $u \in \overline{TP}$

$$n(u) - 1 = \sum_{\substack{t, z \in \overline{TP} \\ t \cdot z = u}} n(z) k(t \cdot z, z),$$

se tiene que

$$\begin{aligned} n(\omega)(n(\omega) - 1) \bar{c}(\omega) &= \frac{1}{2} \sum_{u \in \omega \cap \overline{TP}} (n(\omega) - 1) \pi(u) S(u) \mathbf{c}'(u) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{t, z \in \overline{TP} \\ t \cdot z \in \omega \cap \overline{TP}}} n(z) \pi(t \cdot z) k(t \cdot z, z) S(t \cdot z) \mathbf{c}'(t \cdot z). \end{aligned}$$

Y de ahí, observando que el interior del sumatorio es invariante respecto del tipo de nodo de t , se llega a que

$$n(\omega)(n(\omega) - 1) \bar{c}(\omega) = \sum_{\substack{t, z \in \overline{TP} \\ t * z = \omega}} n(z) \pi(t \cdot z) k(t \cdot z, z) S(t \cdot z) \mathbf{c}'(t \cdot z),$$

de donde, aplicando la igualdad (65) se tiene (81). \square

Teorema 2.2.16 *Dados $\phi : HT \rightarrow R$ y $c : TP \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, entonces $\mathcal{H}(\phi, P(c, y)) = \mathcal{H}(c\phi, y)$, donde para todo $\omega \in HT$*

$$c\phi(\omega) = \sum_{\nu \in HT} \phi(\nu) c^{(\nu)}(\omega),$$

y para todo $\omega, \nu \in HT$, dado $z \in \nu \cap \overline{TP}$

$$c^{(\nu)}(\omega) = \sum_{t \in \omega \cap \overline{TP}} \frac{\pi(t)S(t)}{\pi(z)S(z)} c^{(z)}(t). \quad (82)$$

Demostración: Es claro que basta con demostrar que para cada $\nu \in HT$

$$\frac{h^{n(\nu)}}{\sigma(\nu)} H(\nu)(P(c, y)) = \mathcal{H}(c^{(\nu)}, y).$$

Para el caso en que $\nu = \langle \emptyset \rangle$, se tiene del lema anterior, donde para cada $\omega \in HT$ se verifica que $c^{(\langle \emptyset \rangle)}(\omega) = n(\omega)\bar{c}(\omega) = n(\omega)(c')^*(\omega)$.

Si $n(\nu) \geq 2$, entonces existen $u \in \overline{TP}^1, v \in \overline{TP}^2$ tales que $\nu = u * v$. De (67), (73) y del teorema de composición de P-series 1.5.5 se concluye

$$\frac{h^{n(\nu)}}{\sigma(\nu)} H(\nu)(P(c, y)) = \frac{\pi(t \cdot z)}{R(t, z)} P(c^{(u)}, y)^T J^T P(c^{(v)}, y),$$

y por tanto, en virtud del lema 2.2.14, basta con demostrar que para cada $\nu, \omega \in HT$

$$c^{(\nu)}(\omega) = \sum_{\substack{t, z \in \overline{TP} \\ t * z = \omega}} \frac{R(t, z)\pi(t \cdot z)}{R(u, v)\pi(u \cdot v)} c^{(u)}(t) c^{(v)}(z). \quad (83)$$

Teniendo en cuenta por un lado que $c^{(u)}(t) = 0$ si t y u tienen la raíz de distinto tipo, y por otro lado (65), junto con el lema 1.5.8, se tiene (82). \square

El siguiente teorema relaciona la composición de H-series con P-series, con la composición de P-series, en términos de P-series y H-series inducidas, de modo que podemos obtener los coeficientes de la composición de una H-serie con una P-serie a partir de la composición de dos P-series.

Teorema 2.2.17 *Dado $\phi : HT \rightarrow R$ y $c : TP \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, sea $b : TP \rightarrow R$ tal que $b = \phi^*$, se tiene que*

$$\mathcal{H}(\phi, P(c, y)) = \mathcal{H}((cb)^*, y).$$



Demostración: Siguiendo la notación del teorema (2.2.16), basta con probar que

$$n(\omega)(\mathbf{cb})^*(\omega) = \sum_{\nu \in HT} n(\nu)\phi(\nu)c^{(\nu)}(\omega).$$

Haciendo uso de la definición de $c^{(\nu)}(\omega)$,

$$\begin{aligned} n(\nu)c^{(\nu)}(\omega) &= \frac{1}{2} \sum_{z \in \nu \cap TP} S(z)c^{(\nu)}(\omega) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{t \in \omega \cap TP} \sum_{z \in \nu \cap TP} \frac{\pi(t)S(t)}{\pi(z)} c^{(z)}(t), \end{aligned}$$

y por tanto,

$$\begin{aligned} n(\omega)(\mathbf{cb})^*(\omega) &= \frac{1}{2} \sum_{t \in \omega \cap TP} \pi(t)S(t) \sum_{z \in TP} \mathbf{b}(z)c^{(z)}(t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{t \in \omega \cap TP} \pi(t)S(t) \sum_{\nu \in HT} \sum_{z \in \nu \cap TP} \frac{\phi(\nu)}{\pi(z)} c^{(z)}(t) \\ &= \sum_{\nu \in HT} n(\nu)\phi(\nu)c^{(\nu)}(\omega). \end{aligned}$$

□

2.2.7 Funciones generatrices

Funciones generatrices de transformaciones simplécticas

Las funciones generatrices juegan un papel fundamental en la teoría de transformaciones canónicas, pues permiten describir una transformación canónica en R^{2d} mediante una sola función real en vez de mediante las $2d$ funciones reales componente de la transformación. Se pueden definir muchos tipos distintos de funciones generatrices [2, 22, 25]. Aquí consideraremos una familia de funciones generatrices que está incluida entre las consideradas en [22].

Dada una transformación simpléctica

$$y^* = \psi(y),$$

donde $y = (p^T, q^T)^T$, $y^* = (p^{*T}, q^{*T})^T$, fijado un $\lambda \in R$, denotamos $z_\lambda = A_\lambda y^* + B_\lambda y$, donde

$$A_\lambda = \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad B_\lambda = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & 1 - \lambda \end{pmatrix}. \quad (84)$$

Se demuestra que existe un función escalar $S_\lambda : R^{2d} \rightarrow R$, tal que se verifica

$$y^* = y + J^{-1} \frac{\partial S_\lambda(z_\lambda)}{\partial z_\lambda}, \quad (85)$$

y recíprocamente, dada una función escalar S_λ , la igualdad (85) define implícitamente una transformación canónica. En [22] se pueden encontrar pruebas de estos resultados para una clase mas amplia de funciones generatrices.

Es de señalar que, fijado λ , tal función S_λ está definida de forma única salvo una constante independiente de z_λ , ya que $\frac{\partial S_\lambda}{\partial z_\lambda}$ está definido de forma única a través de (85). Para cada $\lambda \in R$, diremos que dicha función escalar $S_\lambda(z)$ es la λ -función generatriz de la transformación $y^* = \psi(y)$.

En particular, para $\lambda = 1$ se tiene que $z_1 = (p^T, q^{*T})^T$, y S_1 es tal que $p^T q^* - S_1(z_1)$ es la función generatriz de tercera especie considerada en [2, 25]. En cambio, en el caso de $\lambda = 1/2$, $S_{1/2}$ es la función generatriz de Poincaré [22, 25], mientras que para $\lambda = 0$ se tiene que $q^T p^* - S_0(z_0)$ es la función generatriz de segunda especie [2].

Puesto que para todo λ se tiene que $A_{1-\lambda} = B_\lambda$, de (85) se tiene fácilmente el siguiente resultado:

Lema 2.2.18 *La λ -función generatriz de la transformación inversa de una transformación canónica dada, es la opuesta de la $(1 - \lambda)$ -función generatriz de la transformación original.*

En particular, la función generatriz de Poincaré ($\lambda = 1/2$) de la transformación inversa es la opuesta de la función generatriz de Poincaré de la transformación canónica original.

Función generatriz de una familia de transformaciones canónicas

Consideremos ahora una familia de transformaciones canónicas suficientemente regulares

$$y^* = \psi_t(y), \quad (86)$$

que dependen regularmente del parámetro $t \in R$, y tal que ψ_0 sea la transformación identidad. Para cada $t \in R$, consideremos una λ -función generatriz $S_\lambda(z, t)$ de la transformación correspondiente, de tal forma que $S_\lambda(z, t)$ es suficientemente regular como función de z y t . Aunque tal función $S_\lambda(z, t)$ no está determinado de forma única, si lo está $\partial S_\lambda(z, t)/\partial z$.

Es claro que, para t suficientemente pequeño, tales transformaciones admiten una transformación inversa ψ_t^{-1} . Decimos que una familia de transformaciones de la forma (86) es *simétrica*, si verifica (para t suficientemente pequeño) que $\psi_{-t} = \psi_t^{-1}$. De lo visto en la subsección anterior sobre funciones generatrices de transformaciones inversas, es inmediato el siguiente resultado:

Lema 2.2.19 *La familia de transformaciones (94) es simétrica si y sólo si para algún λ se tiene que $S_\lambda(z, -t) \equiv -S_{1-\lambda}(z, t)$ (en cuyo caso se verificará para todo λ). En particular, será simétrica si y sólo si la función de generatriz de Poincaré es impar respecto de t .*

Sea el sistema Hamiltoniano (51); si efectuamos un cambio de variables de acuerdo con (86), obtenemos un nuevo sistema en las variables y^* y t . El siguiente resultado generaliza el resultado clásico correspondiente a la función generatriz de tercera especie (Sección 45A de [2], Sección 11.2 de [25]):

Teorema 2.2.20 *El sistema que resulta de aplicar en (51) el cambio de variables (86) es el sistema Hamiltoniano (en general no autónomo) cuyo Hamiltoniano viene dado por*

$$H^*(y^*, t) = H(y) + \frac{\partial S_\lambda(z_\lambda, t)}{\partial t}, \quad (87)$$

donde $y^* = \psi_t(y)$, $z_\lambda = A_\lambda y^* + B_\lambda y$, y $S_\lambda(z, t)$ es la función generatriz de la transformación (86).

Demostración: Sea $y(t)$ una solución del sistema Hamiltoniano autónomo (51), y sea $y^*(t)$ definido de forma implícita como

$$y^*(t) = y(t) + J^{-1} \frac{\partial S_\lambda(A_\lambda y^*(t) + B_\lambda y(t), t)}{\partial z}.$$

Para simplificar la notación omitiremos el argumento t en $y(t)$ e $y^*(t)$. Sea $z_\lambda = A_\lambda y^* + B_\lambda y$; de la anterior igualdad, se tiene por un lado que

$$y^* = z_\lambda + B_\lambda J^{-1} \frac{\partial S_\lambda(z_\lambda, t)}{\partial z_\lambda}, \quad y = z_\lambda - A_\lambda J^{-1} \frac{\partial S_\lambda(z_\lambda, t)}{\partial z_\lambda}, \quad (88)$$

y, por otro lado, derivando respecto de t en ambos miembros de dicha igualdad,

$$\dot{y}^* = \dot{y} + J^{-1} \frac{\partial^2 S_\lambda}{\partial z_\lambda^2} \dot{z}_\lambda + J^{-1} \frac{\partial^2 S_\lambda}{\partial t \partial z_\lambda}.$$

Efectuando en esta última expresión la sustitución $\dot{z}_\lambda = A_\lambda \dot{y}^* + B_\lambda \dot{y}$, reordenando términos y premultiplicando por J se tiene que

$$\left(J - \frac{\partial^2 S_\lambda}{\partial z_\lambda^2} A_\lambda \right) \dot{y}^* = \left(J + \frac{\partial^2 S_\lambda}{\partial z_\lambda^2} B_\lambda \right) \dot{y} + \frac{\partial^2 S_\lambda}{\partial z_\lambda \partial t}. \quad (89)$$

Por otra parte, puesto que A_λ y B_λ son simétricas y, tal como se comprueba fácilmente, se verifican las igualdades $J^T = J^{-1} = -J$, $JB_\lambda = A_\lambda J$, $A_\lambda + B_\lambda = I$, se tiene de (88) que

$$\left(\frac{\partial y^*}{\partial z_\lambda} \right)^T J = \left(J - \frac{\partial^2 S_\lambda}{\partial z_\lambda^2} A_\lambda \right), \quad \left(\frac{\partial y}{\partial z_\lambda} \right)^T J = \left(J + \frac{\partial^2 S_\lambda}{\partial z_\lambda^2} B_\lambda \right).$$

De ahí, sustituyendo las expresiones entre paréntesis de (89), y premultiplicando por $(\partial z_\lambda / \partial y^*)^T$ se tiene finalmente

$$J\dot{y}^* = \left(\frac{\partial y}{\partial y^*} \right) \frac{\partial H}{\partial y} + \left(\frac{\partial z_\lambda}{\partial y^*} \right)^T \frac{\partial}{\partial z_\lambda} \left(\frac{\partial S_\lambda}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial y^*} \left(H + \frac{\partial S_\lambda}{\partial z_\lambda} \right),$$

con lo cual queda finalizada la demostración. \square

En particular, si aplicamos el cambio de variables canónico (86) al sistema Hamiltoniano $y' = 0$, del teorema anterior se tiene que la transformación (86) es la solución del sistema Hamiltoniano (en general no autónomo), con Hamiltoniano $\hat{H}(y^*, t)$ definido de forma implícita como

$$\hat{H}(y^*, t) = \frac{\partial S_\lambda(z_\lambda, t)}{\partial t}. \quad (90)$$

Si (86) es el flujo exacto de un sistema Hamiltoniano autónomo (51) con Hamiltoniano H , $\hat{H}(y, t)$ ha de coincidir con $H(\psi_t(y)) = H(y)$, de modo que como caso particular de (90) se tiene la llamada ecuación de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S_\lambda(z_\lambda, t)}{\partial t} = H(y^*) (= H(y)), \quad (91)$$

o de forma equivalente, sustituyendo y^* por la expresión correspondiente de (88)

$$\frac{\partial S_\lambda(z_\lambda, t)}{\partial t} = H \left(z_\lambda + B_\lambda J^{-1} \frac{\partial S_\lambda(z_\lambda, t)}{\partial z_\lambda} \right).$$

Dicha ecuación nos permite obtener la λ -función generatriz $S_\lambda(z_\lambda, t)$ del flujo exacto del sistema Hamiltoniano (51) como solución de una ecuación diferencial en derivadas parciales.

Orden de consistencia de métodos simplécticos de integración de sistemas Hamiltonianos

Todo método de un paso de integración de sistemas Hamiltonianos de la forma (51), puede ser representado como una familia de transformaciones $\psi_{H,h} : R^{2d} \rightarrow R^{2d}$ dependientes del Hamiltoniano H y del parámetro h (la longitud de paso), que trata de aproximar localmente (para $h \rightarrow 0$) el flujo exacto $\phi_{H,h} : R^{2d} \rightarrow R^{2d}$ del sistema

(51). Así, un método $\psi_{h,H}$ tiene orden de consistencia $\geq N$ si para cada Hamiltoniano H y cada $y \in R^{2d}$

$$\phi_{H,h}(y) - \psi_{H,h}(y) = O(h^{N+1}).$$

Seguidamente veremos que para el caso de métodos simplécticos, la teoría de funciones generatrices de transformaciones simplécticas permite obtener distintas caracterizaciones del orden de consistencia.

Teorema 2.2.21 *Fijado $\lambda \in R$, sea $S_\lambda(z, h)$ la λ -función generatriz del flujo exacto $\phi_{H,h}$ del sistema Hamiltoniano (51), y sea $\tilde{S}_\lambda(z, h)$ la λ -función generatriz del método simpléctico $\psi_{H,h}$. El orden de consistencia de dicho método es $\geq N$ si y sólo si para cada Hamiltoniano H*

$$S_\lambda(z, h) - \tilde{S}_\lambda(z, h) = k(h) + O(h^{N+1}), \quad (92)$$

donde $k(h)$ no depende de z .

Demostración: Sean

$$\Theta(z, h) = J^{-1} \frac{\partial S_\lambda(z, h)}{\partial z}, \quad \tilde{\Theta}(z, h) = J^{-1} \frac{\partial \tilde{S}_\lambda(z, h)}{\partial z},$$

de modo que si denotamos $z = A_\lambda y^* + B_\lambda y$ y $\tilde{z} = A_\lambda \tilde{y}^* + B_\lambda y$, se verifican

$$y^* = y + \theta(z, h), \quad \tilde{y}^* = y + \tilde{\theta}(\tilde{z}, h).$$

De dichas igualdades se obtiene fácilmente la siguiente:

$$\Theta(z, h) - \tilde{\Theta}(z, h) = \left(I - \frac{\partial \tilde{\Theta}(z, h)}{\partial z} A_\lambda \right) (y^* - \tilde{y}^*) + O(|y^* - \tilde{y}^*|^2).$$

De ahí se deduce que el orden del método es $\geq N$ si y sólo si $\Theta(z, h) - \tilde{\Theta}(z, h) = O(h^{N+1})$, afirmación que es equivalente a la del teorema. \square

Dado un método de integración $\psi_{H,h}$, definimos para cada λ y cada Hamiltoniano H (de forma análoga a como se define en [23, 25] para la función generatriz de tercera especie) la función escalar $\Gamma(y, h)$ como

$$\Gamma(y, h) = \frac{\partial S_\lambda(z_\lambda, h)}{\partial h}, \quad (93)$$

donde $z_\lambda = A_\lambda \psi_{H,h}(y) + B_\lambda y$, o de forma equivalente, teniendo en cuenta (90)

$$\Gamma(y, h) = \hat{H}(\psi_t(y), h).$$

De esta última igualdad se deduce que $\Gamma(y, t)$ no depende de λ . En caso de que el método sea exacto, en virtud de la ecuación (91) de Hamilton-Jacobi, $\Gamma(y, t)$ coincide con $H(y) = H(\psi_{H,h}(y))$.

Se dice que el método de integración *adjunto* de un método $\psi_{H,h}$ es el método $\bar{\psi}_{H,h}$ tal que $\psi_{H,h} \circ \bar{\psi}_{H,-h}$ es la identidad, es decir, $\bar{\psi}_{H,h} = \psi_{H,-h}^{-1}$. Se dice que el método $\psi_{H,h}$ es *simétrico* si para cada H la familia de transformaciones dependiente de h correspondiente es simétrica, es decir, cuando el método coincide con su adjunto.

Considerando el Lema 2.2.18 para $\lambda = 1/2$, se tiene fácilmente el siguiente resultado.

Lema 2.2.22 *Dado un método de integración simpléctico con función generatriz $S_\lambda(z, h)$, sea $\bar{S}_\lambda(z, h)$ la función generatriz del método adjunto. Sea $\hat{H}(y^*, t)$ el Hamiltoniano no autónomo definido en (90), y sea la función escalar $\bar{\Gamma}(y, t)$ correspondiente, según (93), al método adjunto. Entonces se verifica*

$$\bar{\Gamma}(y, h) = \hat{H}(y, -h).$$

Lema 2.2.23 *Dado un método de integración simpléctico $\psi_{h,H}$, sean $\hat{H}(y, h)$ y $\Gamma(y, h)$ definidos respectivamente en (90) y (93), entonces, el orden de consistencia del método $\psi_{H,h}$ es $\geq N$ si y sólo si se verifica alguna de las dos condiciones siguientes:*

1. $\hat{H}(y, h) - H(y) = k(h) + O(h^N)$,
2. $\Gamma(y, h) - H(y) = k(h) + O(h^N)$,

donde $k(h)$ no depende de z .

La caracterización 2 es debida a Sanz-Serna y Abia [23], y se hace uso de ella en [23, 1, 6] para desarrollar la teoría canónica del orden de los métodos Runge-Kutta, Runge-Kutta particionados, y Runge-Kutta-Nyström simplécticos respectivamente. En cambio, MacLachlan adopta en [9] la primera caracterización del lema.

Demostración: La caracterización 1 se deduce del hecho de que $\psi_{H,h}(y)$ es el operador solución del sistema Hamiltoniano no autónomo con Hamiltoniano $\hat{H}(y, h)$. En cuanto a la segunda, puesto que, como es sabido, el orden de un método cualquiera y el de su adjunto son iguales, se deduce de la primera caracterización y del Lema 2.2.22. \square

Función generatriz de un método desarrollable en P-serie

Sea el sistema Hamiltoniano (51), y sea

$$y^* = \psi_{h,H}(y) \quad (94)$$

un método canónico que admite un desarrollo en P-serie $P(c, y)$ con $c(\emptyset) = 1$ (es decir, que para $h = 0$ sea la identidad). Fijado $\lambda \in R$, la λ -función generatriz dependerá del parametro h , y nuestro objetivo es desarrollar dicha función generatriz en serie de potencias de h . Sea $S_\lambda(z, h)$ dicha función generatriz, denotemos por $\Theta(z, h)$ a

$$\Theta(z, h) = J^{-1} \frac{\partial S_\lambda(z, h)}{\partial z},$$

de modo que

$$\psi_{H,h}(y) = y + \Theta(A_\lambda \psi_{H,h}(y) + B_\lambda y, h).$$

Es claro que formalmente $z_\lambda = A_\lambda \psi_{H,h}(y) + B_\lambda y = P(a, y)$, donde

$$a(\emptyset) = 1, \quad a(t) = \begin{cases} \lambda c(t) & \text{si } t \in TP^1, \\ (1 - \lambda)c(t) & \text{si } t \in TP^2. \end{cases} \quad (95)$$

Por tanto, $P(c, y) = y + \Theta(P(a, y), h)$, de donde se deduce que $\Theta(z, h)$ admite un desarrollo en P-serie $P(b, z)$ con $b(\emptyset) = 0$, que verificará que

$$P(c, y) = y + P(b, P(a, y)),$$

de modo que aplicando el Teorema 1.5.5 se tiene que para cada $t \in \overline{TP}$

$$c(t) = ab(t) = \sum_{z \in \overline{TP}} b(z) a^{(z)}(t). \quad (96)$$

Dicha formula nos permite calcular de forma recursiva los coeficientes $\mathbf{c}(t)$ (y por tanto los $\mathbf{a}(t)$) a partir de los $\mathbf{b}(t)$, y viceversa.

Por definición de Θ tenemos que $J\Theta(z, h)$ es el gradiente de una función escalar, de lo cual, en virtud del Lema 2.2.9 se deduce que los coeficientes $\mathbf{b}(t)$ deben verificar las condiciones (75), y por consiguiente $P(\mathbf{b}, z)$ será una P-serie inducida por una H-serie, la cual es única. Ello implica por un lado, que basta con calcular los coeficientes $\mathbf{b}(t)$ para un P-árbol $t \in \omega \cap TP$ por cada $\omega \in HT$. Por otro lado, se tiene que existe una λ -función generatriz de la transformación (94) que admite un desarrollo en H-serie de la forma $\mathcal{H}(\varphi, z)$, donde $\varphi^* \equiv \mathbf{b}$.

En caso de que $P(\mathbf{c}, y)$ sea precisamente el desarrollo en P-serie del flujo exacto del sistema Hamiltoniano autónomo (51), la ecuación de Hamilton-Jacobi (91) nos permite obtener, de forma más directa el desarrollo en H-serie de la λ -función generatriz: Teniendo en cuenta (88), si suponemos que el desarrollo en H-serie de la λ -función generatriz $S_\lambda(z, h)$ es $\mathcal{H}(\phi, z)$, la ecuación de Hamilton-Jacobi se traduce en términos de H-series y P-series en

$$\dot{\mathcal{H}}(\phi, z) = H(z + B_\lambda P(\phi^*, z)),$$

o de forma equivalente

$$\dot{\mathcal{H}}(\phi, z) = H(P(\mathbf{d}, z)),$$

donde














$$\mathbf{d}(\emptyset) = 1, \quad \mathbf{d}(t) = \begin{cases} \lambda\phi^*(t) & \text{si } t \in TP^1 \\ (1 - \lambda)\phi^*(t) & \text{si } t \in TP^2 \end{cases}$$

De ahí, teniendo en cuenta el Lema 2.2.15 llegamos a que

$$\begin{aligned} \phi(\langle \emptyset \rangle) &= 1, \\ \phi(\omega) &= \frac{1}{2n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap TP} S(t)\pi(t)\mathbf{d}'(t), \quad \text{si } n(\omega) \geq 2. \end{aligned}$$

En la Tabla 8 se muestran los coeficientes $\phi(\omega)$ para H-árboles de orden ≤ 4 de la λ -función generatriz del flujo exacto del sistema Hamiltoniano (51). Observese que para el caso de la función generatriz de Poincaré ($\lambda = 1/2$), los coeficientes $\phi(\omega)$

Tabla 8: Coeficientes $\phi(\omega)$ para $\omega \in HT$ de orden ≤ 4

ω	$\phi(\omega)$
	1
	$-\lambda + 1/2$
	$(\lambda - 1/2)^2 - 1/12$
	$(\lambda - 1/2)^2 + 1/12$
	$(\lambda - 1/2)^2 + 1/12$
	$-(\lambda - 1/2)^3$
	$-(\lambda - 1/2)^3$
	$-(\lambda - 1/2)^3 - \lambda/6 - 1/12$
	$-(\lambda - 1/2)^3 - \lambda/6 - 1/12$
	$-(\lambda - 1/2)^3 + \lambda/12 - 1/24$
	$-(\lambda - 1/2)^3 + \lambda/12 - 1/24$
	$-(\lambda - 1/2)^3 + \lambda/4 - 1/8$
	$-(\lambda - 1/2)^3 + \lambda/4 - 1/8$

se anulan para los H-árboles de orden 2 y 4. Ello es debido a que el flujo exacto del sistema Hamiltoniano es una familia de transformaciones simétricas, y por tanto, del Lema 2.2.19 se tiene que la función generatriz de Poincaré es una función impar respecto de h , de modo que $\phi(\omega) = 0$ para todo H-árbol ω de orden par.

Seguidamente obtendremos el desarrollo en H-serie de la función escalar $\Gamma(y, h)$ correspondiente al método canónico con desarrollo formal $P(\mathbf{c}, y)$: Por definición de $\Gamma(y, h)$, dicha función escalar puede ser representada formalmente como

$$\dot{\mathcal{H}}(\varphi, P(\mathbf{a}, y)),$$

donde $\mathcal{H}(\varphi, z)$ es el desarrollo en H-serie de la λ -función generatriz del método y $P(\mathbf{a}, y) = y + A_\lambda P(\mathbf{c}, y)$. Ahora bien, aplicando el Teorema 2.2.17 a la igualdad (96), se tiene que

$$\Gamma(y, h) = \dot{\mathcal{H}}(\varphi, P(\mathbf{a}, y)) = \dot{\mathcal{H}}(\mathbf{c}^*, y).$$

Por otro lado, y como consecuencia de la igualdad anterior, en virtud del Lema 2.2.22, si $P(\bar{\mathbf{c}}, y)$ es el desarrollo en P-serie del método adjunto, tenemos que los coeficientes $\theta(\omega)$ del desarrollo en serie $\dot{\mathcal{H}}(\theta, y)$ de $\hat{H}(y, h)$ verifican que, para cada $\omega \in HT$ $\theta(\omega) = (-1)^{n(\omega)}(\bar{\mathbf{c}})^*(\omega)$.

De los Lemas 2.2.23 y 2.2.22, junto con lo visto en la Sección 2.2.1, se obtiene el siguiente resultado:

Teorema 2.2.24 *Consideremos un método canónico de la forma (94), desarrollable como una P-serie $P(\mathbf{c}, y)$. Dado $\lambda \in R$, sean $\phi, \varphi : HT \rightarrow R$ los coeficientes del desarrollo en H-serie de la λ -función generatriz del flujo exacto del sistema Hamiltoniano (51) y del método (94) respectivamente, las siguientes afirmaciones son equivalentes:*

1. *Dicho método es de orden de consistencia $\geq N$.*
2. *Para cada $\omega \in HT / n(\omega) \leq N$, para al menos un $t \in \omega \cap TP$ se verifica $\mathbf{c}(t) = 1/\gamma(t)$.*
3. *$\mathbf{c}^*(\langle \emptyset \rangle) = 1$ y para cada $\omega \in HT / 2 \leq n(\omega) \leq N$ se cumple que $\mathbf{c}^*(\omega) = 0$.*
4. *Para cada $\omega \in HT / n(\omega) \leq N$, $\varphi(\omega) = \phi(\omega)$.*



Observaciones:

1. Las condiciones de orden del punto 3 de arriba son análogas a las condiciones de orden homogéneas obtenidas por Sanz-Serna y Abia en [23] para el caso de métodos Runge-Kutta canónicos. Condiciones de orden análogas son obtenidas para métodos Runge-Kutta particionados para sistemas separables y para métodos Runge-Kutta-Niström respectivamente en [1] y [5].
2. Las condiciones de orden del punto 3 permiten obtener de forma cómoda las condiciones de orden de métodos canónicos basados en λ -funciones generatrices. Tal es el caso de los métodos desarrollados por Miesbach [10], que hace uso de la función generatriz de Poincaré para obtener métodos simétricos (no particionados) simplécticos.
3. Dados $N \geq 1$ y un número real λ , sea

$$S_{\lambda,N}(z, h) = \sum_{\substack{\omega \in HT \\ n(\omega) \leq N}} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \phi(\omega) H(\omega)(z),$$

donde los $\phi(\omega)$ son los coeficientes del desarrollo en H-serie de la λ -función generatriz del flujo exacto del sistema Hamiltoniano (51). Para distintos valores de λ , se pueden obtener métodos simplécticos de orden arbitrario N , tomando como aproximación numérica de $\phi_{H,h}$ a y^* definido de forma implícita como

$$y^* = y + \frac{\partial S_{\lambda,N}(A_\lambda y^* + B_\lambda y, h)}{\partial z}. \quad (97)$$

Tales métodos fueron desarrollados, para una clase más amplia de funciones generatrices, por Feng en [22]. Es de notar que la familia de métodos (97) son métodos de P-serie de una sola etapa, ya que la derivada parcial respecto de z de la H-serie truncada que define a $S_{\lambda,N}(z, y)$, premultiplicada por J^{-1} , es precisamente la P-serie inducida por la misma, y por tanto, dichos métodos pueden ser representados como

$$y^* = y + \sum_{\substack{t \in TP \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} \phi^*(t) F(t)(A_\lambda y^* + B_\lambda y).$$

4. Haciendo uso de la teoría de funciones generatrices puede demostrarse de forma indirecta el Teorema 2.2.1 a partir del Teorema 2.2.11, y viceversa:

Fijado $\lambda \in R$, para toda familia de transformaciones (94) tal que $\psi_{H,0}$ es la transformación identidad, existe un único $\Theta(z, h)$ tal que para todo h suficientemente pequeño

$$y^* = y + \Theta(A_\lambda y^* + B_\lambda y, h).$$

Se tiene que la transformación (94) es canónica si y sólo si $J\Theta(z, h)$ es gradiente de una función escalar. Por otra parte, si (94) es desarrollable como una P-serie $P(c, y)$ con $c(\emptyset) = 1$, entonces $\Theta(z, h)$ es así mismo desarrollable como una P-serie $P(b, z)$ con $b(\emptyset) = 0$ y viceversa, donde los coeficientes c y b verifican (96).

Por otra parte, de (96) y (1.5.8) se tiene que si $t, z \in \overline{TP}$,

$$\begin{aligned} c(t \cdot z) &= \sum_{u, v \in \overline{TP}} b(u \cdot v) a^{(u)}(t) a^{(v)}(z) + \sum_{u \in \overline{TP}} b(u) a^{(u)}(t) a(z) \\ &= \sum_{u, v \in \overline{TP}} b(u \cdot v) a(u)(t) a(v)(z) + c(t) a(z). \end{aligned}$$

Puesto que por definición de a se tiene que $c(t)a(z) + c(z)a(t) = c(t)c(z)$ si $t \in TP^1, z \in TP^2$, se deduce que

$$a(t \cdot z) + a(z \cdot t) - a(t)a(z) = \sum_{u, v \in \overline{TP}} (b(u \cdot v) + b(v \cdot u)) a^{(u)}(t) a^{(v)}(z).$$

Por tanto, los $c(t)$ verifican las condiciones (53) si y sólo si los $b(t)$ verifican las condiciones (75).

Aplicación al análisis regresivo de métodos canónicos desarrollables en P-series

Haciendo uso de las funciones generatrices, puede demostrarse de forma alternativa el resultado principal de la Sección 2.2.5, y obtenerse de forma directa el Hamiltoniano perturbado, así como el desarrollo en H-serie de la función generatriz de la solución del sistema Hamiltoniano perturbado correspondiente.

Teorema 2.2.25 *Dado un método canónico $\psi_{H,h}$ con función generatriz de Poincaré desarrollable como una H-serie $\mathcal{H}(\varphi, z)$, fijado h , existe $\varphi : HT \rightarrow R$ tal que para el Hamiltoniano perturbación del original formalmente como $\tilde{H}(y) = \mathcal{H}(\phi, y)$, si $\phi_{\tilde{H},t}$ es el flujo exacto del sistema Hamiltoniano autónomo perturbado correspondiente a \tilde{H} , entonces $\psi_{H,h} = \phi_{\tilde{H},h}$. Además, la función generatriz $\tilde{S}(z, t)$ del flujo exacto $\phi_{\tilde{H},t}$ de dicho sistema perturbado es tal que*

$$\tilde{S}(z, rh) = \mathcal{H}(\varphi_r, z).$$

donde para cada $\varphi_r : HT \rightarrow R$ ($r \in R$), con $\varphi_r(\langle \emptyset \rangle) = 1$, y para cada H-árbol ω de orden ≥ 2 se verifica

$$\begin{aligned} \varphi_0(\omega) &= 0, \quad \varphi_1(\omega) = \varphi(\omega) \\ \frac{d}{dr}\varphi_r(\omega) &= \sum_{\nu \in HT} \phi(\nu) d_r^{(\nu)}(\omega), \end{aligned} \quad (98)$$

donde para cada $r \in R$ $d_r : TP \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, y cada $t \in \overline{TP}$ $\varphi_r^*(t) = 2dd_r(t)$.

Demostración: Supongamos que existen $\phi, \varphi_r : HT \rightarrow R$ tales que verifican las condiciones de arriba. Entonces, $\mathcal{H}(\varphi_r, z)$ es el desarrollo en H-serie de la función generatriz $\tilde{S}(z, rh)$ del flujo exacto del sistema Hamiltoniano con Hamiltoniano $\tilde{H}_h(y)$ si y sólo si se verifica la ecuación de Hamilton-Jacobi (91), es decir

$$\frac{\partial}{\partial r} \mathcal{H}(\varphi_r, z) = \mathcal{H}\left(\phi, z + \frac{1}{2} J^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}(\varphi_r, z)}{\partial z}\right) = \mathcal{H}(\phi, P(d_r, z)),$$

igualdad que es equivalente a las condiciones (98).

Por tanto, basta con ver que existen tales ϕ y φ_r . De las condiciones (98) se tiene que

$$\begin{aligned} \phi(\omega) &= \varphi(\omega) - \sum_{\substack{\nu \in HT \\ n(\nu) < n(\omega)}} \phi(\nu) \int_0^1 d_r^{(\nu)}(\omega) dr, \\ \varphi(\omega) &= r\phi(\omega) + \sum_{\substack{\nu \in HT \\ n(\nu) < n(\omega)}} \phi(\nu) \int_0^r d_s^{(\nu)}(\omega) ds. \end{aligned}$$

Estas igualdades nos permiten obtener recursivamente los coeficientes $\phi(\omega)$ y $\varphi_r(\omega)$. Además, permiten demostrar por inducción que para todo H-árbol ω , $\varphi_r(\omega)$ es un polinomio en r de grado $\leq n(\omega)$. \square

Aunque en este teorema se ha hecho uso, por comodidad, de la función generatriz de Poincaré, otro tanto podría hacerse sin mayor cambio haciendo uso de la λ -función generatriz para cualquier $\lambda \in R$ previamente fijado.

2.2.8 Métodos simplécticos no particionados

Todo método de un paso no particionado que es desarrollable en B-serie es asimismo desarrollable en P-serie. Por tanto, los conceptos desarrollados y los resultados obtenidos en las subsecciones precedentes para métodos simplécticos desarrollables en P-series son también aplicables a los métodos simplécticos no particionados desarrollables en B-series. Ahora bien, así como en el estudio de los métodos desarrollables en B-serie se puede prescindir del concepto de P-árbol, limitándose al uso del concepto de árbol, veremos que, en el caso de métodos simplécticos desarrollables en B-series, los árboles libres no superfluos pueden jugar un papel análogo al de los H-árboles en las subsecciones precedentes.

Arboles libres no superfluos. Paridad de árboles y de H-árboles

Se dice que dos árboles son equivalentes si inducen el mismo árbol libre, es decir, si sólo difieren en la localización de la raíz. En este sentido, los árboles libres representan las clases de equivalencia de dicha relación sobre el conjunto de árboles T . Así, dado un árbol libre $\omega \in FT$ y un árbol $t \in T$, pondremos $t \in \omega \cap T$ si t pertenece a la clase de equivalencia correspondiente a ω .

Dados dos árboles t y z , denotaremos por $t * z$ al árbol libre ω para el cual $t \cdot z \in \omega \cap T$. Todo árbol libre de orden ≥ 2 puede ser construido de dicho modo, aunque en general no de forma única. Se dice que un árbol libre ω es *superfluo* si existe $t \in T$ tal que $\omega = t * t$.

Dado un árbol t , de forma totalmente análoga al caso de P-árboles, se define $S(t)$ como sigue: Dado un árbol etiquetado (V, E, i) que representa al árbol t , consideremos el número de vértices j distintos tales que (V, E, j) representa al árbol t . Dicho número no depende del árbol etiquetado elegido, y lo denotamos por $S(t)$. Por ejemplo, sea (V, E) el árbol libre etiquetado de la Figura 2, tanto $(V, E, 5)$ como $(V, E, 7)$ representan el mismo árbol t , mientras que para cualquier otro vértice $j \neq 5, 7$, (V, E, j) representa a un árbol distinto de t . Por consiguiente, $S(t) = 2$. Puede verse

que dado $t \in T$ se verifica

$$2S(t) = \sum_{\substack{z \in TP \\ z' = t}} S(z), \quad (99)$$

donde para cada $z \in TP$, denotamos por z' al árbol inducido por el P-árbol z .

Por otro lado, dado un árbol libre etiquetado se define [4] su *simetría* como el número de permutaciones distintas de sus vértices que lo transforman en sí mismo. Es claro que la simetría coincide para árboles libres etiquetados equivalentes. Dado un árbol libre ω , se define su *simetría* $\sigma(\omega)$ como la simetría de cualquier árbol libre etiquetado que lo represente. Puede verse que, dado un $\omega \in FT$ y un $t \in \omega \cap T$

$$\sigma(\omega) = S(t)\sigma(t). \quad (100)$$

Resulta conveniente definir para cada $t \in T$ su *paridad* $\pi(t)$ de tal modo que para cada par de árboles u, v se verifica

$$\pi(u \cdot v) = -\pi(v \cdot u), \quad (101)$$

es decir que, si un árbol t puede obtenerse de otro árbol z moviendo su raíz a un nodo contiguo, entonces $\pi(t) = -\pi(z)$. No es difícil ver que dicha condición implica que, si ω es un árbol libre superfluo, para cada $t \in \omega \cap T$ se verifica $\pi(t) = 0$. Recíprocamente, si para algún $t \in \omega \cap T$ la condición (101) implica que $\pi(t) = 0$, entonces el árbol libre ω es superfluo. Para completar la definición del concepto de paridad, para cada árbol libre ω no superfluo fijamos un $t \in \omega \cap T$ para el cual asignamos $\pi(t) = 1$.

Dado un H-árbol ω , denotaremos por ω' al árbol libre que induce. Dado un H-árbol ω , puede verse que para cada $t \in \omega \cap TP$, $\pi(t)\pi(t')$ es independiente del P-árbol t elegido. Para probarlo, basta con ver que, dados $u, v \in \overline{TP}$, se tiene que $(u \cdot v)' = u' \cdot v'$, y por tanto, teniendo en cuenta (72) y (101)

$$\pi(u \cdot v)\pi((u \cdot v)') = \pi(v \cdot u)\pi((v \cdot u)').$$

Así, definimos para cada $\omega \in HT$ su *paridad* $\pi(\omega)$ como $\pi(t)\pi(t')$ donde $t \in \omega \cap TP$. Por definición se tiene que dado $\omega \in HT$, si ω' es un árbol libre superfluo, entonces $\pi(\omega) = 0$. Por otra parte, es fácil ver que dados dos H-árboles ω, ν tales que $\omega' = \nu'$, se verifica que $\pi(\omega) = \pi(\nu)$ si puede obtenerse uno de otro cambiando la orientación de un número par de arcos, y $\pi(\omega) = -\pi(\nu)$ si dicho número es impar.

H-series y B-series

Sabemos que podemos interpretar las B-series (es decir, la P-series con $P = 1$) como P-series (con $P = 2$) cuyos coeficientes $c(t)$ verifican que $c(t) = c(t')$. En particular, ello implica que para cada $t \in T$

$$\frac{F(t)}{\sigma(t)} = \sum_{\substack{z \in TP \\ z'=t}} \frac{F(z)}{\sigma(z)}, \quad (102)$$

donde $F(t)$ es la diferencial elemental del árbol t (definida en la Sección 1.3, considerando t como un P-árbol con $P = 1$) y los $F(z)$ son las diferenciales elementales de los P-árboles z .

En la teoría de métodos canónicos particionados desarrollada en las subsecciones precedentes, las H-series juegan un papel fundamental. Nuestro objetivo es estudiar las H-series correspondientes a los métodos no particionados. Dada una H-serie $\mathcal{H}(\phi, y)$, nos preguntamos qué deben verificar sus coeficientes $\phi(\omega)$ para que la P-serie inducida $P(\phi^*, y)$ sea equivalente a una B-serie. Para ello, los coeficientes $\phi^*(t)$ han de depender únicamente del árbol inducido t' . Y puesto que dados $\omega \in HT$ y $t \in \omega \cap TP$, se verifica que

$$\phi^*(t) = \pi(t)\phi(\omega) = \pi(t')\pi(\omega)\phi(\omega),$$

se deduce que para $\phi^*(t)$ sólo dependa de t' , $\pi(\omega)\phi(\omega)$ sólo puede depender del árbol libre ω' inducido por el H-árbol ω . En ese caso, si para cada $\nu \in FT$ denotamos por $\phi(\nu)$ a $\pi(\omega)\phi(\omega)$ si $\omega' = \nu$, se tiene que

$$\mathcal{H}(\phi, y) = \sum_{\nu \in FT} h^{n(\nu)} \phi(\nu) \sum_{\substack{\omega \in HT \\ \omega' = \nu}} \pi(\omega) \frac{H(\omega)(y)}{\sigma(\omega)}. \quad (103)$$

Observese que en esta serie formal hay una expresión independiente por cada árbol libre no superfluo (los términos correspondientes a árboles libres superfluos se anulan, ya que $\pi(\omega) = 0$ si ω' es superfluo).

Hamiltonianos elementales de árboles libres

La expresión (103) nos da pie a definir, para cada árbol libre ν , el *Hamiltoniano elemental* $H(\nu)$ como la función escalar que verifica

$$\frac{H(\nu)(y)}{\sigma(\nu)} = \sum_{\substack{\omega \in HT \\ \omega' = \nu}} \pi(\omega) \frac{H(\omega)(y)}{\sigma(\omega)}.$$

Puede demostrarse que dados $t, z \in T$, se verifica

$$H(t * z)(y) = \pi(t \cdot z) F(t)(y)^T J F(z)(y).$$

De esta igualdad se deduce que, dado $\nu \in FT$, si $t = [t_1, \dots, t_m] \in \nu \cap T$,

$$H(\nu)(y) = \pi(t) H_{J_1, \dots, J_m}(y) F^{J_1}(y) \cdots F^{J_m}(t_m)(y). \quad (104)$$

En esta última igualdad queda claro que el concepto de Hamiltoniano elemental de árboles libres coincide esencialmente con el de diferencial elemental canónica introducido por Sanz-Serna y Abia en [23].

En cuanto al gradiente del Hamiltoniano elemental de un árbol libre, se tiene el siguiente resultado, análogo al Lema 2.2.8:

Lema 2.2.26 Dado $\nu \in FT$, para cada $y \in R^{2d}$ se tiene que

$$J^{-1} \frac{\partial H(\nu)(y)}{\partial y} = \sum_{t \in \nu \cap T} \pi(t) S(t) F(t)(y).$$

Demostración: En virtud del Lema 2.2.8, se tiene que

$$\begin{aligned} J^{-1} \frac{\partial H(\nu)(y)}{\partial y} \frac{1}{\sigma(\nu)} &= \sum_{\substack{\omega \in HT \\ \omega' = \nu}} \pi(\omega) J^{-1} \frac{\partial H(\omega)(y)}{\partial y} \frac{1}{\sigma(\omega)} \\ &= \sum_{\substack{\omega \in HT \\ \omega' = \nu}} \pi(\omega) \sum_{z \in \omega \cap TP} \pi(t) \frac{F(t)(y)}{\sigma(t)} \\ &= \sum_{t \in \nu \cap T} \pi(t) \sum_{\substack{z \in TP \\ z' = t}} \frac{F(z)(y)}{\sigma(z)}, \end{aligned}$$



y teniendo en cuenta (102) y multiplicando por $\sigma(\nu)$ en ambos miembros de la igualdad se tiene el resultado requerido. \square

Es de notar que este lema puede ser demostrado prescindiendo de los Hamiltonianos elementales de H-árboles, basando la definición de Hamiltoniano elemental de árboles libres en la igualdad (104).

En lo que sigue, en general omitiremos las demostraciones de los resultados presentados en esta subsección, los cuales pueden ser obtenidos, o bien deduciéndolos a partir de los resultados relativos a P-series y H-series, o bien directamente, procediendo de forma análoga a las demostraciones obtenidas en las subsecciones precedentes para el caso particionado.

BH-series

Dado $\phi : FT \rightarrow R$, decimos que la serie formal

$$B\mathcal{H}(\phi, y) = \sum_{\omega \in FT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \phi(\omega) H(\omega)(y)$$

es una *BH-serie* de coeficientes $\phi(\omega)$.

Denotamos por $B\dot{\mathcal{H}}(\phi, y)$ a la serie formal que resulta de derivar parcialmente la BH-serie $B\mathcal{H}(\phi, y)$ respecto de h .

Del Lema 2.2.26 se deduce que, dada una BH-serie $B\mathcal{H}(\phi, y)$,

$$J^{-1} \frac{\partial B\mathcal{H}(\phi, y)}{\partial y}$$

es una B-serie, que denotamos por $B(\phi^*, y)$, y cuyos coeficientes son tales que, $\phi^*(\emptyset) = 0$ y para cada $t \in \omega \cap T$ con $\omega \in FT$ se verifica $\phi^*(t) = \pi(t)\phi(\omega)$. Decimos que $B(\phi^*, y)$ es la *B-serie inducida* por la BH-serie $B\mathcal{H}(\phi, y)$.

Teorema 2.2.27 *Una B-serie $B(\mathbf{b}, y)$ es la B-serie inducida por una BH-serie si y sólo si verifica que $\mathbf{b}(\emptyset) = 0$ y para cada $t, z \in \bar{T}$*

$$\mathbf{b}(t \cdot z) + \mathbf{b}(z \cdot t) = 0. \quad (105)$$

Las H-series inducidas por P-series juegan un papel fundamental en la composición de H-series con P-series y en la teoría de funciones generatrices de métodos

simpléticos particionados. Es de esperar que en el caso de métodos no particionados podamos asociar a cada B-serie una BH-serie que juegue un papel análogo al de las H-series inducidas. Dada una B-serie $B(\mathbf{c}, y)$, donde $\mathbf{c} : T \rightarrow R$, consideremos la H-serie $\mathcal{H}(\phi, y)$ inducida por dicha B-serie (es decir, la H-serie inducida por la P-serie $P(\mathbf{c}, y)$, tal que para todo $t \in TP$, $\mathbf{c}(t) = \mathbf{c}(t')$). En ese caso, es claro que $\forall \omega \in HT$

$$\phi(\omega) = \mathbf{c}^*(\phi) = \frac{1}{2n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap TP} \pi(t)S(t)\mathbf{c}(t) = \frac{1}{2n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap TP} \pi(\omega)\pi(t')S(t)\mathbf{c}(t'),$$

y por tanto teniendo en cuenta (99),

$$\pi(\omega)\phi(\omega) = \frac{1}{n(\omega')} \sum_{t \in \omega' \cap T} \pi(t)S(t)\mathbf{c}(t). \quad (106)$$

Se observa por tanto que $\pi(\omega)\phi(\omega)$ sólo depende del árbol libre inducido ω' y, por consiguiente, podemos reescribir $\mathcal{H}(\phi, y)$ como una BH-serie, que denotamos por $B\mathcal{H}(\mathbf{c}^*, y)$, y donde para cada $\nu \in FT$

$$\mathbf{c}^*(\nu) = \frac{1}{n(\nu)} \sum_{t \in \nu \cap T} \pi(t)S(t)\mathbf{c}(t).$$

Decimos que $B\mathcal{H}(\mathbf{c}^*, y)$ es la *BH-serie inducida* por la B-serie $B(\mathbf{c}, y)$. Se comprueba fácilmente que dada una B-serie inducida por una BH-serie, la BH-serie inducida por dicha B-serie coincide con la BH-serie original.

Análisis regresivo de métodos simpléticos desarrollables en B-series

Dado un método de un paso con desarrollo en B-serie $B(\mathbf{c}, y)$, el sistema perturbado (37) del Teorema 1.7.2 es tal que $h\tilde{f}(y)$ es desarrollable en B-serie. En concreto, $h\tilde{f}(y) = B(\mathbf{b}, y)$, donde los coeficientes pueden obtenerse como se indica en la demostración del Teorema 1.7.2 (para el caso en que $P = 1$).

Para el caso en que el método sea canónico, se tiene el siguiente resultado:

Teorema 2.2.28 *La solución numérica y_1 que resulta de aplicar un paso de longitud h de un método canónico no particionado (con desarrollo en B-serie $B(\mathbf{c}, y)$) a un sistema Hamiltoniano (51) con Hamiltoniano de clase $N + 1$, verifica*

$$y_1 = \tilde{y}(x_0 + h) + O(h^{N+1}),$$

donde $\tilde{y}(x)$ es la solución exacta del sistema perturbado

$$\tilde{y}' = J^{-1} \frac{\partial \tilde{H}(y)}{\partial y},$$

y donde el Hamiltoniano perturbado \tilde{H} está dado por

$$h\tilde{H}(y) = \mathcal{B}\mathcal{H}(\phi, y),$$

donde para cada $\omega \in FT$ tal que $n(\omega) \leq N$, dado $t \in \omega \cap T$ se verifica $\phi(\omega) = \pi(t)\mathbf{b}(t)$, mientras que $\phi(\omega) = 0$ para árboles libres de orden mayor que N .

Teniendo en cuenta que un método simpléctico es de orden $\geq N$ si y sólo si $\tilde{H}(y) = H(y) + O(h^N)$, de este teorema se puede deducir de forma alternativa el resultado de [7] según el cual para que un método simpléctico desarrollable en B-serie sea de orden $\geq N$ basta con que se verifique una condición por cada árbol libre no superfluo de orden $\leq N$.

Composición de BH-sries con B-series

De forma análoga al caso particionado, la composición de una BH-serie con una B-serie es otra BH-serie. En este sentido, se pueden obtener resultados análogos a todos los obtenidos en la Subsección 2.2.6, de los cuales aquí presentaremos la parte más relevante.

Lema 2.2.29 Sea $c : T \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, se tiene que

$$H(B(c, y)) = \mathcal{B}\mathcal{H}(\bar{c}, y),$$

donde para cada $\omega \in FT$

$$\bar{c}(\omega) = (c')^*(\omega) = \frac{1}{n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap T} \pi(t)S(t)c'(t). \quad (107)$$

Teorema 2.2.30 Dado $\phi : FT \rightarrow R$ y $c : T \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, sea $\mathbf{b} : T \rightarrow R$ tal que $\mathbf{b} = \phi^*$, se tiene que

$$\mathcal{B}\mathcal{H}(\phi, B(c, y)) = \mathcal{B}\mathcal{H}((\mathbf{c}\mathbf{b})^*, y),$$

donde, siguiendo con la notación habitual, $\mathbf{c}\mathbf{b} : T \rightarrow R$ es tal que $B(\mathbf{b}, B(c, y)) = B(\mathbf{c}\mathbf{b}, y)$.

Teoría canónica del orden

Los conceptos presentados en la Subsección 2.2.7 dedicada a las funciones generatrices, permiten obtener distintas formas de verificar el orden de los métodos canónicos de un paso. En dicha subsección, demostrábamos que dado un método canónico desarrollable en P-serie, fijado un $\lambda \in R$, la λ -función generatriz del método admite un desarrollo en H-serie, la cual puede ser obtenida haciendo uso de la composición de P-series. En el caso de métodos canónicos desarrollables en B-serie, se deduce de forma análoga que, la función generatriz de Poincaré (es decir, $\lambda = 1/2$) es desarrollable en BH-serie. Debido a ello, en virtud del Teorema 2.2.21, dado un método canónico desarrollable en B-serie, pueden obtenerse condiciones de orden para dicho método comparando el desarrollo en BH-serie de la función generatriz de Poincaré del método con el desarrollo de la función generatriz del flujo exacto del sistema, obteniéndose una condición por cada árbol libre no superfluo de orden menor o igual que el orden de consistencia requerido.

En concreto, sea $B(c, y)$ la B-serie correspondiente al método canónico, se tiene que el desarrollo en BH-serie de su función generatriz de Poincaré es $\mathcal{BH}(\varphi, z)$, donde

$$B(c, y) = y + B\left(\varphi^*, y + \frac{1}{2}B(c, y)\right),$$

igualdad que permite obtener los coeficientes $\varphi(\omega)$ de dicho desarrollo.







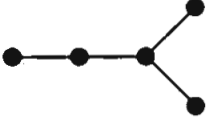



De forma análoga que para el caso particionado, el desarrollo en BH-serie $\mathcal{BH}(\phi, z)$ de la función generatriz de Poincaré del flujo exacto del sistema Hamiltoniano (51) puede ser obtenido de forma alternativa expresando la ecuación de Hamilton-Jacobi en términos de series formales, es decir

$$\mathcal{BH}(\phi, z) = H\left(z + \frac{1}{2}B(\phi^*, z)\right).$$

De dicha igualdad se deduce como aplicación del Lema 2.2.29 que

$$\begin{aligned}\phi(\langle \emptyset \rangle) &= 1, \\ \phi(\omega) &= \frac{1}{n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap T} \pi(t)S(t)d'(t), \quad \text{si } n(\omega) \geq 2,\end{aligned}$$

Tabla 9: Coeficientes $\phi(\omega)$ no nulos para árboles libres de orden ≤ 6

ω	t	$\sigma(\omega)$	$\phi(\omega)$
		1	1
		2	$\frac{1}{12}$
		2	$\frac{1}{120}$
		2	$-\frac{1}{240}$
		24	$\frac{1}{80}$

donde $d(\emptyset) = 1$ y para cada $t \in \bar{T}$, $2d(t) = \phi^*(t)$. Por otra parte, puesto que, como ya se ha visto, la función generatriz del flujo exacto es un función impar respecto de h , se tiene que $\phi(\omega) = 0$ para todo árbol libre de orden par.

En la Tabla 9 se muestra para cada árbol libre ω de orden 1, 3, y 5, los coeficientes $\phi(\omega)$ del desarrollo en BH-serie de la función generatriz del flujo exacto, junto con los coeficientes $\sigma(\omega)$, y un árbol $t \in \omega \cap T$ para el cual fijamos $\pi(t) = 1$. Así, tenemos que la función generatriz de Poincaré $S(z, h)$ del flujo exacto del sistema (51) verifica

$$\begin{aligned}
 S(z, h) = & hH(y) + \frac{h^3}{24} H_{IJ}(z) f^I(z) f^J(z) \\
 & + \frac{h^5}{1920} \left(8H_{IJ}(z) f_K^I(z) f_L^J(z) f^K(z) f^L(z) \right. \\
 & - 4H_{IJK}(z) f_L^I(z) f^L(z) f^J(z) f^K(z) \\
 & \left. + H_{IJKL}(z) f^I(z) f^J(z) f^K(z) f^L(z) \right) + O(h^7),
 \end{aligned}$$

donde se consideran sumatorios de 1 a $2d$ sobre los índices repetidos.

Truncando el desarrollo en BH-serie de la función generatriz de Poincaré del flujo

exacto, pueden obtenerse como se indica en la segunda observación que sigue al Teorema 2.2.24, métodos simpléticos simétricos implícitos de orden arbitrario. El método de orden 2 de dicha familia de métodos es precisamente el conocido método del punto medio. En cuanto al método de orden 4, puede verse que coincide con el método (44) construido al final de la Sección 1.8.1.

Otra forma de obtener condiciones de orden para métodos canónicos es la introducida por Sanz-Serna en [23] para métodos Runge-Kutta simpléticos, es decir, haciendo uso del segundo criterio del Lema 2.2.23: Análogamente al caso particionado, y haciendo uso del Teorema 2.2.30, se tiene que, dado un método simplético con desarrollo en B-serie $B(\mathbf{c}, y)$, la función escalar $\Gamma(y, h)$ correspondiente definida en (93) puede ser desarrollada formalmente como $\mathcal{BH}(\mathbf{c}^*, y)$. Por tanto, un método simplético con desarrollo en B-serie $B(\mathbf{c}, y)$ es de orden $\geq N$ si y sólo si es consistente y para cada árbol libre ω tal que $2 \leq n(\omega) \leq N$ verifica

$$\sum_{t \in \omega \cap T} \pi(t) S(t) \mathbf{c}(t) = 0.$$



2.3 Métodos simplécticos particionados para sistemas Hamiltonianos separables

Consideremos ahora métodos simplécticos particionados para sistemas Hamiltonianos separables, es decir, sistemas Hamiltonianos con Hamiltoniano

$$H(p, q) = T(p) + V(q). \quad (108)$$

Dichos sistemas son por tanto de la forma

$$\dot{p} = -\frac{\partial V(q)}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial T(p)}{\partial p}. \quad (109)$$

En tales sistemas, 1f no depende de ${}^1y = p$ ni 2f de ${}^2y = q$, y por tanto, como ya se ha observado en la Sección 1.4, las diferenciales elementales de todo P-árbol con al menos dos nodos contiguos del mismo tipo son idénticamente nulas, de modo que, para el caso de sistemas Hamiltonianos separables, los coeficientes de las P-series correspondientes a tales P-árboles no tienen ninguna relevancia. Llamamos, como en la Sección 1.4, PS-árboles a los P-árboles que no tienen nodos contiguos del mismo tipo. Denotamos por TPS al conjunto de PS-árboles, y $\overline{TPS} = TPS - \{\emptyset\}$, $TPS^1 = TPS \cap TP^1$, y $TPS^2 = TPS \cap TP^2$.

Dado $c : TPS \rightarrow R$, denotamos por $PS(c, y)$ a la serie formal

$$PS(c, y) = \sum_{t \in TPS} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} c(t) F(t)(y),$$

y decimos que es la *PS-serie* de coeficientes $c(t)$.

Es claro que, tanto la solución exacta del sistema Hamiltoniano (51) con Hamiltoniano separable, como la aplicación a dicho sistema de un método desarrollable en P-serie, son desarrollables en PS-series. Por tanto, las condiciones de orden de dichos métodos aplicados a sistemas separables se reducen de forma considerable.

2.3.1 PS-series canónicas

Más adelante demostraremos el siguiente teorema, que da condiciones necesarias y suficientes para que una PS-serie dada sea canónica:

Teorema 2.3.1 *La PS-serie de coeficientes $c : TPS \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$ es canónica para sistemas Hamiltonianos separables si y sólo si para cada $t \in TPS^1$, $z \in TPS^2$*

$$c(t \cdot z) + c(z \cdot t) = c(t)c(z). \quad (110)$$

El siguiente lema será de utilidad para demostrar el Teorema 2.3.1 (en lo que sigue, omitiremos el argumento y de las diferenciales elementales):

Lema 2.3.2 *Sea un sistema Hamiltoniano separable. Dado un $t^* \in \overline{TPS}$, se verifica*

$$F'(t^*)^T J + JF'(t^*) = - \sum_{\substack{t, z \in \overline{TPS} \\ t \cdot z = t^*}} k(t^*, z) (F'(t)^T JF'(z) + F'(z)^T JF'(t)).$$

Demostración: Para $n(t^*) = 1$, ello se reduce a $F'(\tau_a)^T J + JF'(\tau_a) = 0$ ($a = 1, 2$), igualdad que es satisfecha, ya que para $I, J = 1, \dots, d$ se tiene que

$$\frac{\partial^2 V}{\partial q^I \partial q^J} = \frac{\partial^2 V}{\partial q^J \partial q^I}, \quad \frac{\partial^2 T}{\partial p^I \partial p^J} = \frac{\partial^2 T}{\partial p^J \partial p^I}.$$

Es claro que dados dos P-árboles t, z , si $t \cdot z \in TPS$, entonces $t, z \in TPS$. Además, si t es un PS-árbol de orden ≥ 2 , se tiene que $\bar{t} \notin TPS$. Así, teniendo en cuenta que para sistemas separables las diferenciales elementales de P-árboles que no son PS-árboles son idénticamente nulas, el resultado de este lema se deduce del Lema 2.2.3. \square

El siguiente lema permitirá demostrar la necesidad de las condiciones (110). En cuanto a su demostración, se puede obtener siguiendo la del Lema 2.2.7 (que a su vez recurre al Lema 2.2.4, cuya demostración es de carácter constructivo), comprobando que para el caso en que t y z sean PS-árboles el Hamiltoniano correspondiente es separable.

Lema 2.3.3 *Dados $t \in TPS^1, z \in TPS^2$, existe un Hamiltoniano separable polinómico $H : R^{2d} \rightarrow R$ con $d = n(t) + n(z) + 1$, tal que para el sistema Hamiltoniano separable correspondiente, dados $u, v \in TPS$, se verifica $(F'(u)(0)^T JF'(v)(0))_{1, 2+d} \neq$*

0 si y sólo si $u = t$ y $v = z$, ó $u = z \cdot t$ y $v = \emptyset$, ó $u = \emptyset$ y $v = t \cdot z$. Además, se tiene que

$$\begin{aligned} (F'(t)(0)^T J F'(z)(0))_{1,2+d} &= \frac{1}{k(t \cdot z, z)} (F'(t \cdot z)(0)^T J)_{1,2+d} \\ &= \frac{1}{k(z \cdot t, t)} (J F'(z \cdot t)(0))_{1,2+d}. \end{aligned}$$

Demostración del Teorema 2.3.1: Derivando término a término respecto de y la PS-serie $PS(c, y)$ se obtiene

$$\begin{aligned} (\Psi')^T J \Psi' &= J + \sum_{t \in TPS} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} c(t) (F'(t)^T J + J F'(t)) \\ &\quad + \sum_{\substack{t, z \in TPS \\ z \in TPS^2}} \frac{h^{n(t)+n(z)}}{\sigma(t)\sigma(z)} c(t)c(z) F'(t)^T J F'(z). \end{aligned}$$

Aplicando los Lemas 2.3.2 y 1.2.2 tenemos que

$$\begin{aligned} \sum_{t \in TPS} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} c(t) (F'(t)^T J + J F'(t)) &= \\ - \sum_{\substack{t \in TPS^1 \\ z \in TPS^2}} \frac{h^{n(t)+n(z)}}{\sigma(t)\sigma(z)} (c(t \cdot z) + c(z \cdot t)) &(F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t)), \end{aligned}$$

y por tanto

$$\begin{aligned} (\Psi')^T J \Psi' - J &= \tag{111} \\ \sum_{\substack{t \in TPS^1 \\ z \in TPS^2}} \frac{h^{n(t)+n(z)}}{\sigma(t)\sigma(z)} (c(t)c(z) - c(t \cdot z) - c(z \cdot t)) &(F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t)), \end{aligned}$$

de donde se tiene la suficiencia de la condición (110). En cuanto a la necesidad, se sigue del Lema 2.3.3, considerando las componentes $(1, 2+d)$ en la expresión anterior.

□

2.3.2 Simplificación de las condiciones de orden

Definiendo en TPS la relación de equivalencia $\overset{\sim}{\sim}$, tal que $t \overset{\sim}{\sim} z$ si difieren solamente en la localización de la raíz (en particular, si $t \in TPS^1, z \in TPS^2$, se tiene que

$t \cdot z \stackrel{s}{\sim} z \cdot t$), se deduce lo siguiente de forma totalmente análoga que en el caso de sistemas Hamiltonianos generales: Si una PS-serie $PS(\mathbf{c}, \gamma)$ verifica las condiciones de canonicidad (110) para sistema separables, y representa una aproximación de orden $\geq N - 1$ de la solución exacta de sistemas separables, entonces, si $t \stackrel{s}{\sim} z$

$$\mathbf{c}(t) = \frac{1}{\gamma(t)} \iff \mathbf{c}(z) = \frac{1}{\gamma(z)}.$$

Dicha propiedad, y la consecuente simplicación de las condiciones de orden para sistemas separables, ya es estudiada por Abia y Sanz-Serna [1] para el caso particular de métodos Runge-Kutta particionados.

Respecto a la relación de equivalencia \sim definida sobre TP , se tiene que, dados $t, z \in TPS$ tales que $n(t), n(z) \geq 2$, se verifica que

$$t \stackrel{s}{\sim} z \text{ si y sólo si } t \sim z.$$

Sin embargo, se tiene que $\tau_1 \sim \tau_2$ y en cambio no se cumple $\tau_1 \stackrel{s}{\sim} \tau_2$. Por tanto, las clases de equivalencia correspondientes por \sim ó $\stackrel{s}{\sim}$ a PS-árboles de orden ≥ 2 pueden ser representadas por H-árboles. Los H-árboles ω de orden ≥ 2 tales que $\omega \cap TPS \neq \emptyset$ tienen una estructura especial, con dos tipos de nodos: los que todos sus arcos adyacentes entran al mismo, y los que todos sus arcos adyacentes salen de él. En [1] las clases de equivalencia de $TPS / \stackrel{s}{\sim}$ son representadas gráficamente como PS-árboles en los que se hace abstracción de la localización de la raíz, a los cuales se les denomina *árboles bicolors*. Es claro que podemos identificar cada árbol bicolor de orden ≥ 2 con un H-árbol ω tal que $\omega \cap TPS \neq \emptyset$. Dichos H-árboles son precisamente los que pueden ser representados como $t * z$ donde $t \in TPS^1$ y $z \in TPS^2$. En la Figura 18 se muestran los árboles bicolors ω tales que $2 \geq n(\omega) \geq 4$ junto con los correspondientes H-árboles. En cuanto a los árboles bicolors de orden 1, denotaremos por $\langle \emptyset_1 \rangle$ al formado por un sólo nodo de tipo 1, y por $\langle \emptyset_2 \rangle$ al formado por un sólo nodo de tipo 2. Denotaremos por BT el conjunto de árboles bicolors.

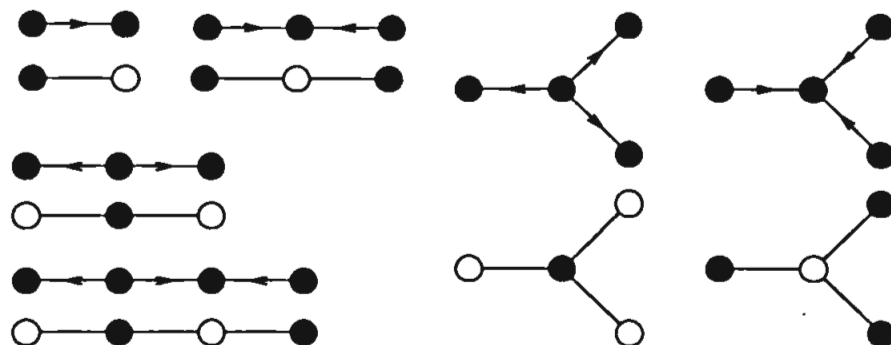


Figura 18: Árboles bicolores

2.3.3 Hamiltonianos elementales de árboles bicolores

Los árboles bicolores desempeñan para los sistemas Hamiltonianos separables el mismo papel que los H-árboles para los sistemas Hamiltonianos generales, es decir, representar las condiciones de orden independientes para métodos canónicos. Por tanto, parece natural definir los Hamiltonianos elementales de árboles bicolores de forma que se obtenga un resultado análogo al Lema 2.2.8, donde el gradiente del Hamiltoniano de un árbol bicolor ω sea expresado como una combinación lineal de diferenciales elementales de los PS-árboles que pertenezcan a la clase de equivalencia correspondiente a ω .

Definimos para cada $p, q \in R^d$

$$H(\langle \emptyset_1 \rangle)(p, q) = V(q), \quad H(\langle \emptyset_2 \rangle)(p, q) = T(p),$$

y para cada árbol bicolor ω de orden ≥ 2 , ya que puede ser identificado con un H-árbol, adoptamos la definición de Hamiltoniano dada para H-árboles. Así, dados $t \in TPS^1, z \in TPS^2$ tenemos que el Hamiltoniano elemental del árbol bicolor $t * z$ es tal que para cada $p, q \in R^d$

$$H(t * z)(p, q) = -\pi(t)\pi(z) {}^1F(t)(p, q) {}^2F(z)(p, q). \quad (112)$$

Considerando por un lado los dos casos triviales en que $n(\omega) = 1$, y aplicando por otro lado el Lema 2.2.8, se llega al siguiente resultado (tomamos el gradiente del Hamiltoniano como un vector columna):

Lema 2.3.4 Dado un sistema Hamiltoniano separable, para todo $\omega \in BT$ se tiene

$$\begin{aligned}\frac{\partial H(\omega)(p, q)}{\partial q} &= - \sum_{t \in \omega \cap TPS^1} S(t) \pi(t)^1 F(t)(p, q), \\ \frac{\partial H(\omega)(p, q)}{\partial p} &= \sum_{t \in \omega \cap TPS^2} S(t) \pi(t)^2 F(t)(p, q).\end{aligned}$$

2.3.4 HS-series

Dado $\phi : BT \rightarrow R$, decimos que la serie formal

$$\mathcal{HS}(\phi, y) = \sum_{\omega \in BT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \phi(\omega) H(\omega)(y)$$

es una *HS-serie* de coeficientes $\phi(\omega)$. Denotamos por $\mathcal{HS}(\phi, y)$ a la serie formal que resulta de derivar parcialmente respecto de h la HS-serie $\mathcal{HS}(\phi, y)$.

Definimos asimismo la PS-serie inducida por la HS-serie de coeficientes $\phi : BT \rightarrow R$ como la PS-serie de coeficientes $\phi^* : TPS \rightarrow R$ tal que $\phi^*(\emptyset) = 0$, y para cada $t \in \omega \cap TPS$, con $\omega \in BT$,

$$\phi^*(t) = \phi(\omega) \pi(t).$$

Por otra parte, definimos los coeficientes $\mathbf{b}^* : BT \rightarrow R$ de la HS-serie inducida por una PS-serie de coeficientes $\mathbf{b} : TPS \rightarrow R$ del siguiente modo: $\forall \omega \in BT$

$$\mathbf{b}^*(\omega) = \frac{1}{n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap TPS} \pi(t) S(t) \mathbf{b}(t).$$

Como aplicación del Lema 2.3.4 tenemos el siguiente resultado:

Lema 2.3.5 Dada una HS-serie $\mathcal{HS}(\phi, y)$, la PS-serie inducida cumple que

$$PS(\phi^*, y) = J^{-1} \frac{\partial \mathcal{HS}(\phi, y)}{\partial y}.$$

Es claro que, de forma análoga que para los coeficientes de H-series, por un lado, se tiene que para cada $\phi : BT \rightarrow R$, $\phi^{**} \equiv \phi$, y por otro lado, se demuestra el siguiente resultado (análogo al Lema 2.2.10):

Lema 2.3.6 Dado $\mathbf{b} : TPS \rightarrow R$, si se verifican las condiciones siguientes

$$\begin{aligned} \mathbf{b}(\emptyset) &= 0, \\ \mathbf{b}(t \cdot z) + \mathbf{b}(z \cdot t) &= 0, \quad \forall t \in TPS^1, \forall z \in TPS^2, \end{aligned} \quad (113)$$

se tiene que $\mathbf{b}^{**} \equiv \mathbf{b}$.

Y de forma análoga al Teorema 2.2.11, se tiene:

Teorema 2.3.7 Dada un PS-serie $PS(\mathbf{b}, y)$, se tiene que $J PS(\mathbf{b}, y)$ es el gradiente de una función escalar si y sólo si los coeficientes $\mathbf{b}(t)$ verifican las condiciones (113). En ese caso se tendrá que

$$PS(\mathbf{b}, y) = J^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}S(\mathbf{b}^*, y)}{\partial y}. \quad (114)$$

Demostración: Tanto la suficiencia de dichas condiciones como la igualdad (114) se deducen del Lema 2.3.5 y 2.3.6.

En cuanto a la necesidad de dichas condiciones, para que $JPS(\mathbf{b}, y)$ sea el gradiente de una función escalar es condición necesaria (y suficiente) que se verifique

$$J \frac{\partial PS(\mathbf{b}, y)}{\partial y} + \left(\frac{\partial PS(\mathbf{b}, y)}{\partial y} \right)^T J \equiv 0. \quad (115)$$

Si consideramos el sistema (109) con $H(y) \equiv 0$, de la identidad anterior se deduce que $\mathbf{b}(\emptyset) = 0$.

Finalmente, dados $t \in TPS^1$, $z \in TPS^2$, si consideramos en (115) la componente $(1, 2 + d)$, del Lema 2.3.3 se tiene la segunda condición de (113). \square

2.3.5 Análisis regresivo

Sea un método canónico de integración de sistemas Hamiltonianos separables que admite un desarrollo en PS-serie $PS(\mathbf{c}, y)$; consideremos una P-serie $P(\mathbf{c}, y)$ tal que sus coeficientes correspondientes a PS-árboles coinciden con los de $PS(\mathbf{c}, y)$. Consideremos el sistema perturbado (37) de la Sección 1.7 correspondiente a dicha P-serie, y sea $P(\mathbf{b}, y)$ tal que $h\tilde{f}(y) = P(\mathbf{b}, y)$. Para el caso de sistemas Hamiltonianos separables las diferenciales elementales de los P-árboles que no son PS-árboles se anulan,

de modo que en ese caso $h\tilde{f}(y) = PS(\mathbf{b}, y)$. De forma análoga que en el Lema 2.2.12, se demuestra que $PS(\mathbf{c}, y)$ verifica las condiciones de canonicidad (110) si y sólo si $PS(\mathbf{b}, y)$ verifica las condiciones (113). Por tanto, en virtud del Teorema 2.3.7, $PS(\mathbf{c}, y)$ es canónica si y sólo si $JPS(\mathbf{b}, y)$ es el gradiente de la función escalar $\mathcal{H}S(\mathbf{b}^*, y)$. Así, tenemos el siguiente resultado:

Teorema 2.3.8 *Consideremos un método canónico para sistemas Hamiltonianos separables desarrollable en PS-serie. La solución numérica $y_1 = (p_1, q_1)$ que resulta de aplicar un paso de longitud h de dicho método a un sistema Hamiltoniano separable (109) con Hamiltoniano de clase $N + 1$, verifica $y_1 = \tilde{y}(x_0 + h) + O(h^{N+1})$, donde $\tilde{y}(x) = (\tilde{p}(x), \tilde{q}(x))$ es la solución exacta del sistema perturbado*

$$\tilde{p}' = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q}(\tilde{p}, \tilde{q}), \quad \tilde{q}' = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p}(\tilde{p}, \tilde{q}),$$

y donde el Hamiltoniano perturbado \tilde{H} está dado por

$$\tilde{H}(y) = \sum_{\substack{\omega \in BT \\ n(\omega) \leq N}} \frac{h^{n(\omega)-1}}{\sigma(\omega)} \mathbf{b}^*(\omega) H(\omega)(y).$$

Es de señalar que $\tilde{H}(y)$ no es separable, a no ser que $\tilde{H}(y)$ coincida con $H(y)$, es decir, el método sea de orden $\geq N$.

2.3.6 Composición de HS-series con PS-series

Las ideas desarrolladas en la Subsección 2.2.6 en torno a la composición de H-series con P-series para sistemas Hamiltonianos generales pueden ser extendidas para el caso de sistemas Hamiltonianos separables para obtener resultados análogos relativos a la composición de HS-series con PS-series.

El resultado correspondiente al Lema 2.2.15 es el siguiente:

Lema 2.3.9 *Sea $\mathbf{c} : TPS \rightarrow R$ con $\mathbf{c}(\emptyset) = 1$, se tiene que*

- (a) $hV(^2PS(\mathbf{c}, y)) = \mathcal{H}S(\mathbf{c}^{(\langle \emptyset_1 \rangle)}, y),$
- (b) $hT(^1PS(\mathbf{c}, y)) = \mathcal{H}S(\mathbf{c}^{(\langle \emptyset_2 \rangle)}, y),$

donde para todo $\omega \in HT$

$$\begin{aligned} \mathbf{c}^{(\langle \Phi_1 \rangle)}(\omega) &= n(\omega)(\mathbf{c}^{(\tau_1)})^*(\omega) = \sum_{t \in \omega \cap TPS^1} \pi(t)S(t)\mathbf{c}'(t), \\ \mathbf{c}^{(\langle \Phi_2 \rangle)}(\omega) &= n(\omega)(\mathbf{c}^{(\tau_2)})^*(\omega) = \sum_{t \in \omega \cap TPS^2} \pi(t)S(t)\mathbf{c}'(t). \end{aligned}$$

Demostración: Demostraremos solamente (a), ya que la demostración de (b) es totalmente análoga. Es claro que basta con demostrar que

$$h^2 \frac{d}{dh} V(^2PS(\mathbf{c}, y)) = \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} (n(\omega) - 1) \mathbf{c}^{(\langle \Phi_1 \rangle)}(\omega) H(\omega)(p, q).$$

Si denotamos por $V'(q)$ al gradiente (como vector fila) de $V(q)$,

$$\begin{aligned} h^2 \frac{d}{dh} V(^2PS(\mathbf{c}, y)) &= h^2 V'(^2PS(\mathbf{c}, y)) \frac{d}{dh} ^2PS(\mathbf{c}, y) \\ &= -h^{-1} f(^2PS(\mathbf{c}, y))^T h \frac{d}{dh} ^2PS(\mathbf{c}, y) \\ &= -^1PS(\mathbf{c}', y)^T \sum_{z \in TPS^2} \frac{h^{n(z)}}{\sigma(z)} n(z) \mathbf{c}(z) ^2F(t)(y). \end{aligned}$$

Aplicando Lema 2.2.14, se deduce que

$$h^2 \frac{d}{dh} V(^2PS(\mathbf{c}, y)) = \mathcal{HS}(\phi, y),$$

donde para todo árbol bicolor ω

$$\phi(\omega) = \sum_{\substack{t \in TPS^1, z \in TPS^2 \\ t \cdot z = \omega}} R(t, z) \pi(t \cdot z) \mathbf{c}'(t) n(z) \mathbf{c}(z).$$

De ahí, aplicando (65) y (16) se tiene que

$$\begin{aligned} \phi(\omega) &= \sum_{\substack{t \in TPS^1, z \in TPS^2 \\ t \cdot z \in \omega \cap TPS^1}} n(z) \pi(t \cdot z) k(t \cdot z, z) S(t \cdot z) \mathbf{c}'(t \cdot z) \\ &= \sum_{u \in \omega \cap TPS} \left(\sum_{\substack{t \in TPS^1, z \in TPS^2 \\ t \cdot z = u}} n(z) k(t \cdot z, z) \right) \pi(u) S(u) \mathbf{c}'(u) \\ &= (n(\omega) - 1) \mathbf{c}^{(\langle \Phi_1 \rangle)}(\omega). \end{aligned}$$

□

A partir de este último lema y de los Teoremas 2.2.16 y 2.2.17, se deducen fácilmente los siguientes resultados:

Teorema 2.3.10 *Dados $\phi : BT \rightarrow R$ y $c : TPS \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, se tiene que $\mathcal{HS}(\phi, PS(c, y)) = \mathcal{HS}(c\phi, y)$, donde para cada $\omega \in BT$*

$$c\phi(\omega) = \sum_{\nu \in BT} \phi(\nu)c^{(\nu)}(\omega),$$

y para cada $\omega, \nu \in BT$, dado $z \in \nu \cap TPS$

$$c^{(\nu)}(\omega) = \sum_{t \in \omega \cap TPS} \frac{\pi(t)S(t)}{\pi(z)S(z)} c^{(z)}(t). \quad (116)$$

Teorema 2.3.11 *Dados $\phi : BT \rightarrow R$ y $c : TPS \rightarrow R$ con $c(\emptyset) = 1$, se tiene que*

$$\mathcal{HS}(\phi, PS(c, y)) = \mathcal{HS}((cb)^*, y),$$

donde $b = \phi^*$, y para cada $t \in TPS$

$$cb(t) = \sum_{z \in TPS} b(z)c^{(z)}(t).$$

2.3.7. Teoría canónica del orden

Sea un método de integración canónico para sistemas Hamiltonianos separables (109) que admite un desarrollo en PS-serie $P(c, y)$ (con $c(\emptyset) = 0$). De forma análoga al caso de métodos canónicos para sistemas Hamiltonianos generales, se demuestra que, fijado $\lambda \in R$, existe una λ -función generatriz $S_\lambda(z, h)$ que admite un desarrollo en HS-serie $\mathcal{HS}(\varphi, z)$ tal que se verifica

$$PS(c, y) = y + PS(\varphi^*, PS(a, y)), \quad (117)$$

donde

$$a(\emptyset) = 1, \quad a(t) = \begin{cases} \lambda c(t) & \text{si } t \in TPS^1, \\ (1 - \lambda)c(t) & \text{si } t \in TPS^2. \end{cases}$$

En cuanto al desarrollo en HS-serie de la λ -función generatriz del flujo exacto del sistema (109), puede ser obtenida como caso particular del desarrollo en H-serie $\mathcal{H}(\phi, z)$ de la λ -función generatriz del flujo exacto del sistema Hamiltoniano general considerado en la Subsección 2.2.7. Sin embargo, es posible proceder de forma directa como sigue: Sea $\mathcal{HS}(\phi, z)$ el desarrollo en HS-serie de la λ -función generatriz



$S_\lambda(z, h)$ del flujo exacto del sistema; la ecuación de Hamilton-Jacobi se puede poner en términos de series formales como

$$\mathcal{H}S(\phi, z) = H(PS(d, z)),$$

donde

$$d(\emptyset) = 1, \quad d(t) = \begin{cases} \lambda\phi^*(t) & \text{si } t \in TPS^1 \\ (1-\lambda)\phi^*(t) & \text{si } t \in TPS^2 \end{cases}$$

De ahí, teniendo en cuenta el Lema 2.3.9 se tienen las siguientes fórmulas, que nos permiten obtener los coeficientes $\phi(\omega)$ de los árboles bicolores ω de forma recursiva:

$$\begin{aligned} \phi(\langle \emptyset_1 \rangle) &= \phi(\langle \emptyset_2 \rangle) = 1, \\ \phi(\omega) &= \frac{1}{n(\omega)} \sum_{t \in \omega \cap TPS} S(t)\pi(t)d'(t), \quad \text{si } n(\omega) \geq 2. \end{aligned}$$

Todo ello, haciendo uso del Lema 2.2.23, nos permite obtener de forma alternativa las condiciones de orden de métodos canónicos desarrollables en PS-series para sistemas Hamiltonianos separables. Dichas condiciones de orden pueden ser especialmente cómodas de formar en el caso de métodos basados en funciones generatrices, como los de Miesbach [10], para los cuales el desarrollo en serie de la λ -función generatriz puede ser obtenido de forma fácil, sin recurrir a (117).

Siguiendo las mismas ideas que en la Subsección 2.2.7 para el caso general, en el caso de sistemas Hamiltonianos separables, se puede demostrar que la función escalar $\Gamma(y, h)$ correspondiente, según la definición de (93), al método canónico con desarrollo formal $PS(c, y)$, admite como desarrollo en HS-serie a $\mathcal{H}S(c^*, y)$. Para ello, basta con traducir la definición de $\Gamma(y, h)$ en términos de series formales y aplicar el Teorema 2.3.11. De ahí, aplicando el Lema 2.2.22, y teniendo en cuenta que si $t \in TPS^1$, $z \in TPS^2$ y $t \stackrel{s}{\sim} z$ entonces $\pi(t) = -\pi(z)$, se tiene que un método consistente desarrollable en PS-serie que es simpléctico para sistemas Hamiltonianos separables es de orden $\geq N$ para tales sistemas si y sólo si se verifica que para cada $\omega \in BT$ tal que $2 \leq n(\omega) \leq N$

$$\sum_{t \in \omega \cap TPS^1} S(t)c(t) = \sum_{t \in \omega \cap TPS^2} S(t)c(t).$$

Estas condiciones fueron obtenidas por Abia y Sanz-Serna en [1] para el caso particular de métodos Runge-Kutta particionados simpléticos para sistemas Hamiltonianos separables.

2.4 Métodos simplécticos para sistemas Hamiltonianos de tipo Nyström

Consideremos el caso de sistemas Hamiltonianos separables (109) con Hamiltoniano de la forma

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

es decir, sistemas de la forma

$$\dot{p} = -V'(q), \quad \dot{q} = p, \quad (118)$$

o de forma equivalente

$$\ddot{q} = -V'(q).$$

Diremos que tal sistema es un *sistema Hamiltoniano de tipo Nyström*.

Tal como se ha visto en la Sección 1.4, para tales sistemas las diferenciales elementales de todo P-árbol $t \in TP - SNT$ son idénticamente nulas, y por tanto el desarrollo en P-serie $P(c, y)$ de la aplicación de un método dado al sistema (118) se reduce a

$$\sum_{t \in SNT} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} c(t) F(t)(y).$$

Dado $c : SNT \rightarrow R$, decimos que dicha serie formal es la *SN-serie* de coeficientes $c(t)$, y la denotamos por $\mathcal{SN}(c, y)$.

2.4.1 SN-series canónicas

En esta subsección demostraremos el siguiente teorema, que da condiciones necesarias y suficientes para que una SN-serie dada sea canónica:

Teorema 2.4.1 *La SN-serie de coeficientes $c : SNT \rightarrow R$ es canónica para sistemas de tipo Nyström si y sólo si*

$$\begin{aligned} (a) \quad & c(t \cdot \tau_2) + c(\tau_2 \cdot t) = c(t)c(\tau_2), \quad \forall t \in SNT^1, \\ (b) \quad & c(t \cdot [z]_2) - c(z \cdot [t]_2) = c(t)c([z]_2) - c([t]_2)c(z), \quad \forall t, z \in SNT^1. \end{aligned} \quad (119)$$

Antes de abordar los dos lemas de los que haremos uso para demostrar la necesidad de las condiciones de canonicidad para sistemas de la forma (118) del Teorema 2.4.1, obtendremos varias fórmulas relativas a diferenciales elementales para el caso particular de sistemas de la forma (118):

Sea $y^T = (p^T, q^T)$, para cada $t \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$ e $I = 1, \dots, d$

$$F^{I+d}([t]_2)(y) = F^I(t)(y),$$

donde por convenio tomamos $[\emptyset]_2 = \tau_2$. Por otro lado, si $t \in SNT^1$, o bien $t = \tau_1$ o bien puede ser representado como $t = [[t_1]_2, \dots, [t_m]_2]_1$, donde $t_1, \dots, t_m \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$, en cuyo caso, para $I = 1, \dots, d$

$$F^I(t)(p, q) = -V_{I, J_1, \dots, J_m}(q) F^{J_1}(t_1)(y) \cdots F^{J_m}(t_m)(y).$$

Aquí y en el resto de esta subsección tomaremos por convenio sumatorios de 1 a d sobre los índices repetidos. Por otra parte, los subíndices J en $V(q)$ representan derivadas parciales de la función potencial $V(q)$ respecto de q^J .

De esta última igualdad se tiene que si $t \in SNT^1$, y $z \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$, para $I = 1, \dots, d$

$$F^I(t \cdot [z]_2)(y) = F^I_{(J+d)}(t)(y) F^J(z)(y).$$

Finalmente, se deduce que, dado $t \in SNT^1$, para $I, J = 1, \dots, d$

$$F^I_{(J+d)}(t)(y) = F^I_{(J+d)}(t)(y) + \sum_{\substack{u, v \in SNT^1 \\ u \cdot [v]_2 = t}} k(t, [v]_2) F^I_{(K+d)}(u)(y) F^K_{(J+d)}(v)(y). \quad (120)$$

Lema 2.4.2 Dado $t \in SNT^1$, existe $d \in N$, $p_0, q_0 \in R^d$, y $V : R^d \rightarrow R$ polinómica tal que para el sistema (118) correspondiente se tiene que, si $u \in SNT^1$ es tal que $n(u) \leq n(t)$, entonces

$$F^1_{2d}(u)(p_0, q_0) \neq 0 \quad \text{si y sólo si} \quad u = t.$$

Demostración: Sea $d - 2$ el número de nodos de tipo 2 de t . Asignemos a cada nodo de tipo 2 del SN-árbol t una etiqueta distinta de 2 a $d - 1$.

Para $i = 2, \dots, d-1$ denotamos por $M(i)$ al conjunto de las etiquetas correspondientes a nodos nietos (descendientes de segunda generación) del nodo i . Por otra parte, denotamos por $M(1)$ al conjunto de las etiquetas correspondientes a los hijos de la raíz de t .

Elegimos $p_0, q_0 \in R^d$ de tal forma que $q_0^j = 0$ para todo $j = 1, \dots, d$, y

$$\begin{aligned} p_0^j &= 1 && \text{si } j \text{ corresponde a un nodo final de } t, \\ p_0^j &= 0 && \text{en otro caso.} \end{aligned}$$

Construimos $V(q)$ como sigue:

$$V(q) = -q^d q^1 \prod_{j \in M(1)} q^j - \sum_{i=2}^{d-1} q^i \prod_{j \in M(i)} q^j.$$

De este modo, tenemos que

$$\begin{aligned} -\frac{\partial V(q)}{\partial q^1} &= q^d \prod_{j \in M(1)} q^j, \\ -\frac{\partial V(q)}{\partial q^d} &= q^1 \prod_{j \in M(1)} q^j, \\ -\frac{\partial V(q)}{\partial q^i} &= \prod_{j \in M(i)} q^j + q^d q^1 \prod_{j \in M(1)-\{i\}} q^j, \text{ si } i \in M(1), \\ -\frac{\partial V(q)}{\partial q^i} &= \prod_{j \in M(i)} q^j + q^k \prod_{j \in M(k)-\{i\}} q^j, \text{ si } 2 \leq k \leq d-1, i \in M(k). \end{aligned}$$

Es claro que $F^I(u)(p_0, q_0) \geq 0$ para cada $I = 1, \dots, d$ y $u \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$.

En caso de que $t = \tau_1$, tenemos que $d = 2$, $p_0, q_0 = 0$, $V(q) = q^1 q^2$, y la afirmación del lema es satisfecha de forma trivial.

Supongamos pues que $n(t) \geq 2$, de modo que $M(1) \neq \emptyset$. Para cada $i = 2, \dots, d-1$ sea $t_i \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$ tal que el SN-subárbol de t formado por el nodo i y todos sus descendientes es $[t_i]_2$.

Procederemos a demostrar el lema (en realidad, un resultado ligeramente más fuerte) probando las siguientes afirmaciones:

1. $F^1(u)(p_0, q_0) = F^d(u)(p_0, q_0) = 0$, $\forall u \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$.

Para $u = \emptyset$ y $u = \tau_1$ es claro que se verifican dichas igualdades. En otro caso, u es de la forma $u = [[u_1]_2, \dots, [u_m]_2]_1$ con $u_1, \dots, u_m \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$. Ahora bien, es claro que $F^1(u)(p_0, q_0) \neq 0$ implica que para algún $j = 1, \dots, m$ se verifica que $F^d(u_j)(p_0, q_0) \neq 0$, y de forma análoga, $F^d(u)(p_0, q_0) \neq 0$ implica que $F^1(u_j)(p_0, q_0) \neq 0$ para algún $j = 1, \dots, m$. A partir de ello, se demuestra la afirmación 1. por inducción sobre $n(u)$.

2. Dados $u \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$ y $2 \leq i \leq d-1$ tal que $n(u) \leq n(t_i)$, se tiene que

$$F^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \quad \text{si y sólo si} \quad u = t_i.$$

Demostraremos este punto por inducción sobre $n(u)$. Para $u = \emptyset$ se verifica de forma trivial. Para $u = \tau_1$, sea i un nodo tal que $n(t_i) \geq n(u) = 1$, es decir, i no es un nodo final; $F^i(u)(p_0, q_0) = -V_i(q_0)$, de modo que se tiene, por construcción de $V(q)$, que $F^i(u)(p_0, q_0) \neq 0$ si y sólo si $M(i) = \emptyset$. Ahora bien, ya que i no es un nodo final, $M(i) = \emptyset$ si y sólo si $t_i = \tau_1$.

Si $n(u) \geq 2$, u es de la forma $u = [[u_1]_2, \dots, [u_m]_2]_1$ con $u_1, \dots, u_m \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$, Supongamos que la afirmación del punto 2 es satisfecha para todo SN-árbol de orden $< n(u)$. Supongamos que el sumando correspondiente a ciertos valores concretos de los índices J_1, \dots, J_m en la siguiente expresión es no nulo:

$$F^i(u)(p_0, q_0) = -V_{i, J_1, \dots, J_m}(q_0) F^{J_1}(u_1)(p_0, q_0) \cdots F^{J_m}(u_m)(p_0, q_0). \quad (121)$$

Es claro que $V_{i, J_1, \dots, J_m}(q_0) \neq 0$ implica que o bien $\{J_1, \dots, J_m\} = M(i)$ o bien $k \in \{J_1, \dots, J_m\}$, donde $i \in M(k)$. En el segundo caso, ello implica que $F^k(u_j)(p_0, q_0) \neq 0$ para algún $j = 1, \dots, m$, lo cual por hipótesis de inducción es absurdo, ya que $n(t_k) > n(t_i) \geq n(u) > n(u_j)$. Por tanto, todos los sumandos no nulos de (121) corresponden a valores de índices distintos tales que $\{J_1, \dots, J_m\} = M(i)$, y por hipótesis de inducción se tiene que para cada $l = 1, \dots, m$, $F^{J_l}(u_l)(p_0, q_0) \neq 0$ si y sólo si $u_l = t_{J_l}$, de donde se deduce la afirmación 2.

3. Si $u \in SNT^1$ tal que $n(u) \leq n(t)$

$$F_{(2d)}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \quad \text{si y sólo si} \quad i = 1 \text{ y } u = t.$$

Si $u = \tau_1$, es claro que $F_{(2d)}^i(u)(p_0, q_0) = V_{i,d}(q_0) = 0$, ya que $M(1) \neq \emptyset$. Sea $u = [[u_1]_2, \dots, [u_m]_2]_1$ tal que $u_1, \dots, u_m \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$. Se tiene que $F_{(2d)}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0$ si y sólo si existen valores de los índices J_1, \dots, J_m tales que $V_{i,d,J_1, \dots, J_m}(q_0) \neq 0$ y para $l = 1, \dots, m$ se verifica que $F^{J_l}(u_l)(p_0, q_0) \neq 0$. Por definición de $V(q)$, ello implica que $\{i, J_1, \dots, J_m\} = M(i) \cup \{1\}$, y puesto que por el punto 1. tenemos que $F^1(u_l)(p_0, q_0) = 0$ para cada l , teniendo en cuenta el punto 2., se deduce la doble implicación de 3.

4. Si $u \in SNT^1$ tal que $n(u) \leq n(t)$,

$$F_{2d}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \quad \text{si y sólo si} \quad i = 1, \quad u = t.$$

Se puede demostrar por inducción sobre $n(u)$: En el caso en que $n(u) = 1$, se deduce del punto 3., ya que $F_{2d}^i(\tau_1) = F_{(2d)}^i(\tau_1)$. Si $n(u) > 1$, y suponiendo que dicha doble implicación se verifica para todo SN-árbol de orden menor que $n(u)$, se deduce que también se verifica para u , haciendo uso de la fórmula (120) para desarrollar $F_{2d}^i(u)(p_0, q_0)$, y aplicando el resultado del punto 3. y la hipótesis de inducción.

□

Lema 2.4.3 *Dados $t, z \in SNT^1$, existe $d \in N$, $p_0, q_0 \in R^d$, y $V : R^d \rightarrow R$ polinómica tal que para el sistema (118) correspondiente se tiene que:*

- Si $u \in SNT^1$ tal que $n(u) \leq n(t) + n(z)$, entonces

$$F_{d+2}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \quad \text{si y sólo si} \quad i = 1, u = t.$$

- Si $u \in SNT^1$ tal que $n(u) \leq n(t) + n(z)$, entonces

$$F_{d+3}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \quad \text{si y sólo si} \quad i = 1, u = z.$$

Demostración: Sea $d-3$ la suma del número de nodos de tipo 2 de t y z . Asignemos a cada nodo de tipo 2 de los SN-árboles t y z una etiqueta distinta de 4 a d .



Para $i = 4, \dots, d$ denotamos por $M(i)$ al conjunto de las etiquetas correspondientes a los nodos nietos del nodo i (en t o en z). Por otra parte, denotamos por $M(2)$ al conjunto de las etiquetas correspondientes a los hijos de la raíz de t , y por $M(3)$ al conjunto de las etiquetas correspondientes a los hijos de la raíz de z .

Elegimos $p_0, q_0 \in R^d$ de tal forma que $q_0^j = 0$ para todo $j = 1, \dots, d$, y

$$\begin{aligned} p_0^j &= 1 && \text{si } j \text{ corresponde a un nodo final de } t \text{ o } z, \\ p_0^j &= 0 && \text{en otro caso.} \end{aligned}$$

Construimos $V(q)$ como sigue:

$$V(q) = -q^2 q^1 \prod_{j \in M(2)} q^j - q^3 q^1 \prod_{j \in M(3)} q^j - \sum_{i=4}^d q^i \prod_{j \in M(i)} q^j.$$

Por tanto, tenemos que

$$\begin{aligned} -\frac{\partial V(q)}{\partial q^1} &= q^2 \prod_{j \in M(2)} q^j + q^3 \prod_{j \in M(3)} q^j, \\ -\frac{\partial V(q)}{\partial q^2} &= q^1 \prod_{j \in M(2)} q^j, \\ -\frac{\partial V(q)}{\partial q^3} &= q^1 \prod_{j \in M(3)} q^j, \\ -\frac{\partial V(q)}{\partial q^i} &= \prod_{j \in M(i)} q^j + q^2 q^1 \prod_{j \in M(2) - \{i\}} q^j, \text{ si } i \in M(2), \\ -\frac{\partial V(q)}{\partial q^i} &= \prod_{j \in M(i)} q^j + q^3 q^1 \prod_{j \in M(3) - \{i\}} q^j, \text{ si } i \in M(3), \\ -\frac{\partial V(q)}{\partial q^i} &= \prod_{j \in M(i)} q^j + q^k \prod_{j \in M(k) - \{i\}} q^j, \text{ si } 4 \leq k \leq d, i \in M(k). \end{aligned}$$

En caso de que $t, z = \tau_1$, $d = 3$, $p_0, q_0 = 0$, $V(q) = q^1 q^2 + q^1 q^3$, y el lema es satisfecho de forma trivial.

Supongamos pues que $n(t) + n(z) \geq 3$. Para cada $i = 4, \dots, d$, sea $t_i \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$ tal que el SN-subárbol de t o z formado por el nodo i y todos sus descendientes es $[t_i]_2$.

La demostración del lema puede ser obtenida demostrando, de forma totalmente análoga que para el lema anterior, los siguientes puntos:

$$1. F^1(u)(p_0, q_0) = F^2(u)(p_0, q_0) = F^3(u)(p_0, q_0) = 0, \forall u \in SNT^1.$$

$$2. \text{ Si } u \in SNT^1 \text{ y } 4 \leq i \leq d \text{ tal que } n(u) \leq n(t_i)$$

$$F^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \text{ si y sólo si } u = t_i.$$

$$3. \text{ Si } u \in SNT^1 \text{ tal que } n(u) \leq n(t) + n(z)$$

$$F_{(d+2)}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \text{ si y sólo si } i = 1, u = t,$$

$$F_{(d+3)}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \text{ si y sólo si } i = 1, u = z.$$

$$4. \text{ Si } u \in SNT^1 \text{ tal que } n(u) \leq n(t) + n(z),$$

$$F_{d+2}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \text{ si y sólo si } i = 1, u = t,$$

$$F_{d+3}^i(u)(p_0, q_0) \neq 0 \text{ si y sólo si } i = 1, u = z.$$

□

Demostración del teorema 2.4.1: Consideremos una PS-serie que para sistemas Hamiltonianos de la forma (118) se reduce a la SN-serie $\mathcal{SN}(c, y)$.

La igualdad (111) se reduce para el caso de sistemas de tipo la forma (118) a la siguiente

$$(\Psi')^T J \Psi' - J = \sum_{\substack{t \in SNT^1 \\ z \in SNT^2}} \frac{h^{n(t)+n(z)}}{\sigma(t)\sigma(z)} (c(t)c(z) - c(t \cdot z) - c(z \cdot t)) (F'(t)^T J F'(z) + F'(z)^T J F'(t)).$$

Ahora bien, todo SN-árbol con raíz de tipo 2 es de la forma $[z]_2$ donde $z \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$. Además, en ese caso $\sigma([z]_2) = \sigma(z)$, y si $t \in SNT^1$ se tiene que $F'(t)^T J F'([z]_2) = F'(t)^T F'(z)$, de modo que si denotamos $A(t, z) = c(t)c([z]_2) - c(t \cdot [z]_2) - c([z]_2 \cdot t)$,

$$\begin{aligned} (\Psi')^T J \Psi' - J &= \sum_{t \in SNT^1} \frac{h^{n(t)+1}}{\sigma(t)} (c(t)c(\tau_2) - c(t \cdot \tau_2) - c(\tau_2 \cdot t)) (F'(t)^T - F'(t)) \\ &+ \sum_{t, z \in SNT^1} \frac{h^{n(t)+n(z)+1}}{\sigma(t)\sigma(z)} A(t, z) (F'(t)^T F'(z) - F'(z)^T F'(t)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{t \in SNT^1} \frac{h^{n(t)+1}}{\sigma(t)} (\mathbf{c}(t)\mathbf{c}(\tau_2) - \mathbf{c}(t \cdot \tau_2) - \mathbf{c}(\tau_2 \cdot t)) (F'(t)^T - F'(t)) \\
&\quad + \sum_{t, z \in SNT^1} \frac{h^{n(t)+n(z)+1}}{\sigma(t)\sigma(z)} (A(t, z) - A(z, t)) F'(t)^T F'(z).
\end{aligned}$$

De esta última expresión se deduce la suficiencia de las condiciones (119), ya que $[z]_2 \cdot t = [z, t]_2 = [t]_2 \cdot z$, y por tanto

$$A(t, z) - A(z, t) = \mathbf{c}(t)\mathbf{c}([z]_2) - \mathbf{c}(z)\mathbf{c}([t]_2) - \mathbf{c}(t \cdot [z]_2) + \mathbf{c}(z \cdot [t]_2).$$

En cuanto a la necesidad, la condición (a) de (119) se tiene de considerar en la última expresión obtenida para $(\Psi')^T J \Psi' - J$, para cada $t \in SNT^1$, la función potencial $V(q)$ del Lema 2.4.2, ya que en ese caso se tiene que la componente $(1, 2d)$ de la matriz $(\Psi')^T J \Psi' - J$ es en el punto (p_0, q_0) de la forma

$$\left((\Psi')^T J \Psi' - J \right)_{1, 2d} = -\frac{h^{n(t)+1}}{\sigma(t)} (\mathbf{c}(t)\mathbf{c}(\tau_2) - \mathbf{c}(t \cdot \tau_2) - \mathbf{c}(\tau_2 \cdot t)) F_{2d}^1(t) + O(h^{n(t)+2}).$$

Finalmente, para la necesidad de la condición (b) de (119) basta con considerar, para cada par $t, z \in SNT^1$ la función potencial $V(q)$ del Lema 2.4.3. En ese caso se tiene que en el punto (p_0, q_0)

$$\begin{aligned}
\left((\Psi')^T J \Psi' - J \right)_{d+2, d+3} &= \frac{h^{n(t)+n(z)+1}}{\sigma(t)\sigma(z)} (A(t, z) - A(z, t)) (F'(t)^T F'(z))_{d+2, d+3} \\
&\quad + O(h^{n(t)+n(z)+1}) \\
&= \frac{h^{n(t)+n(z)+1}}{\sigma(t)\sigma(z)} (A(t, z) - A(z, t)) F_{d+2}^1(t) F_{d+3}^1(z) \\
&\quad + O(h^{n(t)+n(z)+1})
\end{aligned}$$

□

2.4.2 Simplificación de las condiciones de orden

Las condiciones de canonicidad necesarias y suficientes del Teorema 2.4.1, de forma análoga a las condiciones de los Teoremas 2.2.1, 2.2.2 y 2.3.1, simplifican las condiciones de orden de forma considerable. Definamos en SNT la relación de equivalencia

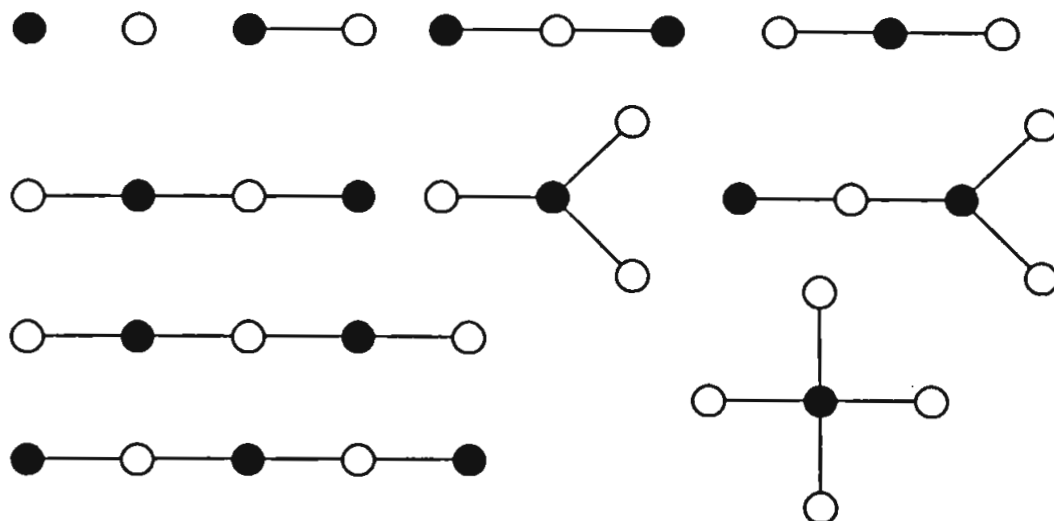


Figura 19: SN-árboles libres de orden ≤ 5

\approx^n , de modo que $t \approx^n z$ si difieren solamente en la localización de la raíz. Ya que $SNT \subset TPS$, dicha relación de equivalencia es de hecho la restricción a SNT de \approx . Es fácil ver que, dado un método desarrollable en SN-serie que verifica las condiciones de canonicidad (119), si dicho método es de orden $\geq N - 1$ entonces, para cada dos SN-árboles t y z tales que $t \approx^n z$, las condiciones de orden correspondientes a dichos SN-árboles son equivalentes. Dicha propiedad ya es estudiada para el caso particular de métodos Runge-Kutta-Nyström en [5, 6].

Las clases de equivalencia de SNT / \approx^n pueden ser representados gráficamente de forma natural como SN-árboles en los que no se especifica la localización de la raíz. A dichos grafos llamaremos, como en [5, 6], SN-árboles libres. Denotaremos por $FSNT$ al conjunto de SN-árboles libres, el cual puede ser considerado como un subconjunto de BT . En la Figura 19 se muestran los SN-árboles libres de orden ≤ 5 .

2.4.3 Hamiltonianos elementales de SN-árboles libres

Consideremos ahora sistemas de la forma (118). Para dichos sistemas el Hamiltoniano elemental de todo árbol bicolor que no corresponda a un SN-árbol libre es nulo. En efecto, todo $\omega \in BT - FSNT$ puede ser representado como $t * z$, donde $t \notin SNT$, y

ya que en ese caso $F(t)(y) \equiv 0$, de la igualdad (112) se tiene que $H(t * z)(y) \equiv 0$.

En concreto, de (112) se tiene que dados $t \in SNT^1, z \in SNT^1 \cup \{\emptyset\}$

$$H(t * [z]_2)(p, q) = \pi(t)\pi(z) {}^1F(t)(p, q)^T {}^1F(z)(p, q).$$

En el caso de sistemas Hamiltonianos de la forma (118), del Lema 2.3.4 se tiene de forma directa el siguiente resultado:

Lema 2.4.4 *Dado un sistema Hamiltoniano de la forma (118), para todo $\omega \in FSNT$ se tiene*

$$\begin{aligned} \frac{\partial H(\omega)(p, q)}{\partial q} &= - \sum_{t \in \omega \cap SNT^1} S(t)\pi(t) {}^1F(t)(p, q), \\ \frac{\partial H(\omega)(p, q)}{\partial p} &= \sum_{t \in \omega \cap SNT^2} S(t)\pi(t) {}^2F(t)(p, q). \end{aligned}$$

2.4.4 HSN-series

En las Secciones 2.2 y 2.3 se ha visto la importancia de las series de Hamiltonianos elementales en el análisis regresivo y en la teoría canónica del orden de métodos canónicos. Dado $\phi : FSNT \rightarrow R$, decimos que la serie formal

$$\mathcal{HSN}(\phi, y) = \sum_{\omega \in FSNT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \phi(\omega) H(\omega)(y)$$

es una HSN-serie de coeficientes $\phi(\omega)$. De forma análoga que para H-series y HS-series, denotamos por $\mathcal{HSN}(\phi, y)$ a la serie formal que resulta de derivar la HSN-serie parcialmente respecto de h . Definimos la SN-serie inducida por la HSN-serie de coeficientes $\phi : FSNT \rightarrow R$ como la SN-serie de coeficientes $\phi^* : SNT \rightarrow R$ tal que

$$\phi^*(\emptyset) = 0, \quad \phi^*(t) = \phi(\omega)\pi(t) \quad \forall t \in \omega \cap SNT.$$

Como aplicación del Lema 2.4.4 tenemos el siguiente resultado:

Lema 2.4.5 *Dada una HSN-serie $\mathcal{HSN}(\phi, y)$, la SN-serie inducida cumple que*

$$SN(\phi^*, y) = J^{-1} \frac{\partial \mathcal{HSN}(\phi, y)}{\partial y}.$$

Y finalmente se tiene el siguiente resultado, análogo a los Teoremas 2.2.11 y 2.3.7:

Teorema 2.4.6 *Dada una SN-serie $SN(\mathbf{b}, y)$, se tiene que $J SN(\mathbf{b}, y)$ es el gradiente de una función escalar si y sólo si los coeficientes $\mathbf{b}(t)$ verifican las siguientes condiciones:*

$$\begin{aligned} \mathbf{b}(\emptyset) &= 0 \\ \mathbf{b}(t \cdot \tau_2) &= -\mathbf{b}([t]_2) \quad \forall t \in SNT^1, \\ \mathbf{b}(t \cdot [z]_2) &= \mathbf{b}(z \cdot [t]_2) \quad \forall t, z \in SNT^1. \end{aligned} \tag{122}$$

En ese caso se tendrá que existe $\phi : FSNT \rightarrow R$ tal que $\phi^* = \mathbf{b}$, es decir

$$SN(\mathbf{b}, y) = J^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}SN(\phi, y)}{\partial y}. \tag{123}$$

Demostración: Las condiciones (122) implican que si $t, z \in SNT$ son tales que $t \stackrel{sn}{\sim} z$, entonces $\pi(t)\mathbf{b}(t) = \pi(z)\mathbf{b}(z)$, y por tanto $\phi : HT \rightarrow R$ puede ser definido de tal forma que $\phi^* = \mathbf{b}$. De este modo, la suficiencia de dichas condiciones así como la igualdad (123) se deducen del Lema 2.4.5.

En cuanto a la necesidad de las condiciones (122), puede ser demostrada de forma análoga a la necesidad de los Teoremas 2.2.11 y 2.3.7, haciendo uso de los Lemas 2.4.2 y 2.4.3. \square

Haciendo uso de este teorema, y procediendo de forma similar que en la Sección 2.3.5, se puede demostrar un resultado análogo al del Teorema 2.3.8, donde el Hamiltoniano $\tilde{H}(y)$ correspondiente al sistema perturbado es tal que $h\tilde{H}(y)$ es una HSN-serie. Se tiene por tanto que el sistema perturbado correspondiente a la aplicación de un método canónico a un sistema Hamiltoniano de tipo Nyström, aunque es un sistema Hamiltoniano, no es de la forma especial (118).

Cabe preguntarse si la composición $\mathcal{H}SN(\phi, SN(\mathbf{c}, y))$ de una HSN-serie con una SN-serie es asimismo una HSN-serie. Si extendemos las definiciones de \mathbf{c} y ϕ a TPS y BT respectivamente (por ejemplo dando valores nulos fuera de SNT y $FSNT$ respectivamente), tendremos que para sistemas Hamiltonianos de tipo Nyström,

$$\mathcal{H}S(\phi, PS(\mathbf{c}, y)) = \mathcal{H}SN(\phi, SN(\mathbf{c}, y)),$$

de modo que la respuesta es afirmativa, ya que toda HS-serie se reduce en el caso de sistemas Hamiltonianos de tipo Nyström a una HSN-serie. Sin embargo, no puede obtenerse un resultado análogo al del Teorema 2.3.11 que relacione los coeficientes correspondientes a la composición de HSN-series con SN-series con los coeficientes de la composición de dos SN-series. Ello es debido a que no todos los PS-árboles de la clase de equivalencia correspondiente a un SN-árbol libre son SN-árboles.

2.4.5 Teoría canónica del orden

Puede verse, de forma análoga al caso general y al caso separable, que la función generatriz de la aplicación a sistemas de tipo Nyström de un método canónico y desarrollable en SN-serie para dichos sistemas, es desarrollable en HSN-serie. Ello permitirá obtener, aplicando el Lema 2.2.23, una condición de orden por cada SN-árbol libre, igualando los coeficientes del desarrollo en HSN-serie de la solución exacta con los de la solución aproximada.

En cuanto a las condiciones de orden que se obtienen de considerar la segunda caracterización de orden de convergencia de métodos simplécticos dada en el Lema 2.2.23, seguidamente veremos que, en el caso de la aplicación a sistemas Hamiltonianos de tipo Nyström de un método de integración simpléctico para dichos sistemas, $\Gamma(y, h)$ puede ser desarrollado como una HSN-serie:

Puesto que $\Gamma(y, h)$ es independiente del λ considerado en (93), tomaremos por comodidad $\lambda = 1/2$. Sea $\mathcal{H}\dot{S}\mathcal{N}(\phi, y)$ el desarrollo en HSN-serie de la función generatriz de Poincaré de dicho método, entonces, por definición de $\Gamma(y, h)$, tenemos que formalmente

$$\Gamma(y, h) = \mathcal{H}\dot{S}\mathcal{N} \left(\phi, \frac{y + SN(c, y)}{2} \right).$$

Extendemos la definición de ϕ a BT de tal forma que $\phi(\omega) = 0$ si $\omega \neq FSNT$, y definimos $\mathbf{a} : TPS \rightarrow R$ como sigue: $\mathbf{a}(\emptyset) = 1$, $\mathbf{a}(t) = c(t)/2$ si $t \in SNT$, y $\mathbf{a}(t) = 0$ si $t \in TPS - SNT$. Así, es claro que

$$\mathcal{H}\dot{S}\mathcal{N} \left(\phi, \frac{y + SN(c, y)}{2} \right) = \mathcal{H}S(\phi, PS(\mathbf{a}, y)).$$



Por tanto, aplicando el Teorema 2.3.11 tenemos que el desarrollo formal de $\Gamma(y, h)$ puede ser representado como $\mathcal{H}\mathcal{S}(\mathbf{d}^*, y)$, donde $\mathbf{d} : TPS \rightarrow R$ es tal que

$$PS(\phi^*, PS(\mathbf{a}, y)) = PS(\mathbf{d}, y), \quad (124)$$

es decir que, para cada $t \in TPS$

$$\mathbf{d}(t) = \sum_{z \in TPS} \phi^*(z) \mathbf{a}^{(z)}(t). \quad (125)$$

Por consiguiente, el desarrollo de $\Gamma(y, h)$ se reduce a $\mathcal{H}\mathcal{SN}(\mathbf{d}^*, y)$, ya que los Hamiltonianos elementales de los árboles bicolors que no son SN-árboles libres son nulos para sistemas Hamiltonianos de tipo Nyström (de hecho, de (125) se puede deducir directamente que $\mathbf{d}(t) = 0$ si t no pertenece a la clase de equivalencia correspondiente a algún SN-árbol libre). Por tanto, para que dicho método tenga orden de consistencia $\geq N$, además de ser consistente ($\mathbf{c}(\tau_1) = \mathbf{c}(\tau_2) = 1$), para cada SN-árbol libre ω tal que $2 \leq n(\omega) \leq N$ ha de verificar $\mathbf{d}^*(\omega) = 0$. Nuestro objetivo ahora es deducir el modo de obtener de forma sencilla los $\mathbf{d}^*(\omega)$ a partir de los coeficientes $\mathbf{c}(t)$ del método.

Por definición de función generatriz de Poincaré, tenemos que

$$y + SN(\phi^*, SN(\mathbf{a}, y)) = SN(\mathbf{c}, y),$$

de donde se deduce, teniendo en cuenta (124), que para cada $t \in SNT - \{\emptyset\}$

$$\mathbf{d}(t) = \mathbf{c}(t).$$

Nos quedan por determinar los $\mathbf{d}(t)$ de los $t \in TPS - SNT$ tales que pertenecen a la clase de equivalencia de algún SN-árbol libre. Dichos PS-árboles son de la forma $[u]_2 \cdot v$ donde $u, v \in SNT^1$. Denotemos por \widetilde{SNT} a dicho conjunto de PS-árboles.

A partir de (125), procediendo de forma análoga a la cuarta observación que sigue al Teorema 2.2.24, se tiene que, dados $t \in SNT^1$, $z \in SNT^2$

$$\mathbf{d}(t \cdot z) + \mathbf{d}(z \cdot t) - \mathbf{d}(t)\mathbf{d}(z) = \sum_{u \in SNT^1, v \in SNT^2} (\phi^*(u \cdot v) + \phi^*(v \cdot u)) \mathbf{a}^{(u)}(t) \mathbf{a}^{(v)}(z).$$

De ahí, ya que $\phi^*(u \cdot v) + \phi^*(v \cdot u) = 0$, tenemos que para cada $t, z \in SNT^1$,

$$d([z]_2 \cdot t) = c(t)c([z]_2) - c(t \cdot [z]_2),$$

con lo cual podemos determinar de forma sencilla los $d(t)$ correspondientes a los PS-árboles t de \widetilde{SNT} a partir de los coeficientes del método.

Así, tenemos que para cada $\omega \in FSNT$

$$\begin{aligned} d^*(\omega) &= \frac{1}{n(\omega)} \sum_{t \in \omega TPS} \pi(t) S(t) d(t) \\ &= \frac{1}{n(\omega)} \pm \left(\sum_{t \in \omega \cap SNT^1} S(t) c(t) - \sum_{t \in \omega \cap SNT^2} S(t) c(t) - \sum_{t \in \omega \cap \widetilde{SNT}} S(t) d(t) \right). \end{aligned}$$

Las condiciones de orden así obtenidas, coinciden con las deducidas por Calvo en [6] para el caso particular de métodos Runge-Kutta-Nyström simplécticos.

2.5 Métodos de P-serie multietapa canónicos

2.5.1 Condiciones de canonicidad suficientes para métodos de P-series multietapa

Dado un sistema Hamiltoniano (51), consideremos la aplicación a dicho sistema de un método de P-series multietapa (con número de partes $P = 2$) de la forma

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 + \sum_{i=1}^s \sum_{z \in \overline{TP}^1} b_i(z) P_i^{(z)}, & q_1 &= q_0 + \sum_{i=1}^s \sum_{z \in \overline{TP}^2} b_i(z) Q_i^{(z)}, \\ P_i &= p_0 + \sum_{j=1}^s \sum_{z \in \overline{TP}^1} a_{ij}(z) P_j^{(z)}, & Q_i &= q_0 + \sum_{j=1}^s \sum_{z \in \overline{TP}^2} a_{ij}(z) Q_j^{(z)}, \end{aligned} \quad (126)$$

donde $Y_i = (P_i^T, Q_i^T)^T$, y para cada $z \in \overline{TP}$

$$Y_i^{(z)} = (P_i^{(z)T}, Q_i^{(z)T})^T = \frac{h^{n(z)}}{\sigma(z)} F(z)(Y_i).$$

Teorema 2.5.1 *Si los coeficientes del método (126) verifican las siguientes condiciones*

$$\begin{aligned} (a) \quad & \text{Si } t \in \overline{TP}, \quad 1 \leq i \leq s, \quad \text{entonces } b_i(t) = b_i(\bar{t}), \\ (b) \quad & \text{Si } 1 \leq i, j \leq s, \quad t, z \in \overline{TP} \text{ tales que } w(t) \neq w(z), \\ & b_i(t)b_j(z) - b_i(t)a_{ij}(z) - b_j(z)a_{ji}(t) = \delta_{ij}(b_i(t \cdot z) + b_i(z \cdot t)), \end{aligned} \quad (127)$$

entonces, la aplicación de dicho método al sistema (51) es simpléctica.

Demostración: Diferenciando término a término en (126), y eliminando dp_0 y dq_0 a partir de las expresiones que se obtienen para dP_i y dQ_i , se tiene

$$\begin{aligned} dp_1 \wedge dq_1 - dp_0 \wedge dq_0 &= \sum_{i=1}^s \sum_{t \in \overline{TP}^1} (b_i(t) dP_i^{(t)} \wedge dQ_i + b_i(\bar{t}) dP_i \wedge dQ_i^{(\bar{t})}) \\ &+ \sum_{i,j=1}^s \sum_{\substack{t \in \overline{TP}^1 \\ z \in \overline{TP}^2}} (b_i(t)b_j(z) - b_i(t)a_{ij}(z) - b_j(z)a_{ji}(t)) dP_i^{(t)} \wedge dQ_j^{(z)}. \end{aligned}$$

Ahora bien, si consideramos el Lema 2.2.3 para $y = Y_i$ y multiplicamos en ambos miembros de la igualdad por $h^{n(t^*)}/\sigma(t^*)$ se obtiene, teniendo en cuenta (8), y que $F'(t)^T J F'(z) \equiv 0$ si $w(t) = w(z)$,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial Y_i^{(t^*)}}{\partial Y_i} \right)^T J + J \frac{\partial Y_i^{(t^*)}}{\partial Y_i} + \left(\frac{\partial Y_i^{(\bar{t}^*)}}{\partial Y_i} \right)^T J + J \frac{\partial Y_i^{(\bar{t}^*)}}{\partial Y_i} = \\ & - \sum_{\substack{t \in TP^1, z \in TP^2 \\ t, z = t^*}} \left(\frac{\partial Y_i^{(t)}}{\partial Y_i} \right)^T J \frac{\partial Y_i^{(z)}}{\partial Y_i} + \left(\frac{\partial Y_i^{(z)}}{\partial Y_i} \right)^T J \frac{\partial Y_i^{(t)}}{\partial Y_i} \\ & - \sum_{\substack{t \in TP^1, z \in TP^2 \\ z, t = \bar{t}^*}} \left(\frac{\partial Y_i^{(t)}}{\partial Y_i} \right)^T J \frac{\partial Y_i^{(z)}}{\partial Y_i} + \left(\frac{\partial Y_i^{(z)}}{\partial Y_i} \right)^T J \frac{\partial Y_i^{(t)}}{\partial Y_i}. \end{aligned}$$

Puede verse que dicha igualdad es equivalente a la siguiente:

$$\begin{aligned} dP_i^{(t^*)} \wedge dQ_i + dP_i \wedge dQ_i^{(\bar{t}^*)} &= - \sum_{\substack{t \in TP^1, z \in TP^2 \\ t, z = t^*}} dP_i^{(t)} \wedge dQ_i^{(z)} \\ & - \sum_{\substack{t \in TP^1, z \in TP^2 \\ z, t = \bar{t}^*}} dP_i^{(t)} \wedge dQ_i^{(z)}, \end{aligned}$$

de donde aplicando las hipótesis del teorema se tiene que $dp_1 \wedge dq_1 - dp_0 \wedge dq_0 = 0$. \square

Extendemos la definición de métodos DJ-reducibles [11] a los métodos de P-series multietapa como sigue:

Definición 2.5.1 Diremos que el método (126) es DJ-reducible si existe un subconjunto no vacío $I \subset \{1, \dots, s\}$ tal que

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_i(t) &= 0 \text{ si } i \in I, t \in \overline{TP} \\ \mathbf{a}_{ji}(t) &= 0 \text{ si } i \in I, j \notin I, t \in \overline{TP}. \end{aligned}$$

En otro caso diremos que es DJ-irreducible.

Puede verse que las etapas $i \in I$ de métodos DJ-reducibles no afectan al resultado numérico del método, y por tanto pueden ser ignoradas.

El siguiente resultado nos permite simplificar las condiciones de canonicidad (127) de métodos DJ-irreducibles:

Lema 2.5.2 *Sea el método (126) DJ-irreducible. Dicho método cumple las condiciones de canonicidad (127) si y sólo si puede ser expresado de la forma*

$$\begin{aligned}
 p_1 &= p_0 + \sum_{i=1}^s \sum_{\omega \in HT} \beta_i(\omega) K_i(\omega), & q_1 &= q_0 + \sum_{i=1}^s \sum_{\omega \in HT} \beta_i(\omega) L_i(\omega), \\
 P_i &= p_0 + \sum_{j=1}^s \sum_{\omega \in HT} \alpha_{ij}(\omega) K_j(\omega), & Q_i &= q_0 + \sum_{j=1}^s \sum_{\omega \in HT} \bar{\alpha}_{ij}(\omega) L_j(\omega), \\
 K_i(\omega) &= -\frac{h^n(\omega)}{\sigma(\omega)} \frac{\partial H(\omega)(P_i, Q_i)}{\partial Q_i}, & L_i(\omega) &= \frac{h^n(\omega)}{\sigma(\omega)} \frac{\partial H(\omega)(P_i, Q_i)}{\partial P_i},
 \end{aligned} \tag{128}$$

donde si $1 \leq i, j \leq s$ y $\omega, \nu \in HT$, se verifica

$$\beta_i(\omega)\beta_j(\nu) - \beta_i(\omega)\bar{\alpha}_{ij}(\nu) - \beta_j(\nu)\alpha_{ji}(\omega) = 0. \tag{129}$$

Demostración: Del Lema 2.2.8 se tiene que el método (128) es un método de la forma (126) tal que

$$\mathbf{b}_i(t) = \beta_i^*(t) = \pi(t)\beta_i(\omega) \text{ si } t \in \omega \cap \overline{TP}, \tag{130}$$

$$\mathbf{a}_{ij}(t) = \alpha_{ij}^*(t) = \pi(t)\alpha_{ij}(\omega) \text{ si } t \in \omega \cap TP^1, \tag{131}$$

$$\mathbf{a}_{ij}(t) = \bar{\alpha}_{ij}^*(t) = \pi(t)\bar{\alpha}_{ij}(\omega) \text{ si } t \in \omega \cap TP^2, \tag{132}$$

en cuyo caso (129) implica (127).

Es claro que para demostrar la implicación inversa basta con probar que $\pi(t)\mathbf{b}_i(t)$ toma el mismo valor en P-árboles equivalentes (es decir, que los $\mathbf{b}_i(t)$ verifican las condiciones (75)), y que $\pi(t)\mathbf{a}_{ij}(t)$ toma el mismo valor para P-árboles equivalentes con el mismo tipo de raíz.

El hecho de que un método DJ-irreducible verifique las condiciones (127) implica que, fijado un $i \in \{1, \dots, s\}$, existe un $t \in TP^1$ tal que $\mathbf{b}_i(t) \neq 0$. En efecto, sea $I = \{i / 1 \leq i \leq s \text{ y } \mathbf{b}_i(t) = 0 \forall t \in \overline{TP}\}$, y dado $j \notin I$, sea $t_j \in \overline{TP}$ un P-árbol de orden maximal tal que $\mathbf{b}_j(t_j) \neq 0$; entonces, para cada $z \in \overline{TP}$, tomando en (127) $t = t_j$ o \bar{t}_j (tal que tenga la raíz de distinto tipo que z), se sigue que $\mathbf{a}_{ij}(z) = 0$. Así, la DJ-irreducibilidad del método implica que $I \neq \emptyset$.

Tomando en (127) $i = j, t = t_i, z = \bar{t}_i$, se tiene que $\mathbf{b}_i(t_i) = \mathbf{a}_{ii}(t_i) + \bar{\mathbf{a}}_{ii}(\bar{t}_i)$. A partir de esto, tomando $i = j, t = t_i$, y $z \in TP^2$ arbitrario por un lado, y por otro

$i = j$, \bar{z} en lugar de t , y \bar{t}_i en lugar de z , y sumando ambas igualdades, se obtiene

$$\mathbf{a}_{ii}(z) + \mathbf{a}_{ii}(\bar{z}) = \mathbf{b}_i(z),$$

mientras que restando miembro a miembro dichas igualdades obtenemos

$$\mathbf{a}_{ii}(z) - \mathbf{a}_{ii}(\bar{z}) = \mu_i \mathbf{b}_i(z),$$

donde $\nu_i = (\mathbf{a}_{ii}(\bar{t}_i) - \mathbf{a}_{ii}(t_i))/\mathbf{b}_i(t_i)$.

Por tanto, tenemos que para cada $t \in TP^1, z \in TP^2$

$$\mathbf{a}_{ii}(z) = \frac{1 + \mu_i}{2} \mathbf{b}_i(z), \quad \mathbf{a}_{ii}(t) = \frac{1 - \mu_i}{2} \mathbf{b}_i(t).$$

De ahí, considerando (127) para $i = j$ y $t \in TP^1, z \in TP^2$ arbitrarios, se tiene que $\mathbf{b}_i(t \cdot z) + \mathbf{b}_i(z \cdot t) = 0$, que junto con la condición (a) de (127) implica que $\pi(t)\mathbf{b}_i(t)$ es constante para todo P-árbol equivalente.

Sean $u, v \in TP^1$ tales que $u \sim v$; tomemos $t = t_i$ (para el caso $u, v \in TP^2$ se procede de forma análoga considerando \bar{t}_i en vez de t_i), i, j arbitrarios, y $z = u$ por un lado y $z = v$ por otro en (127). Multiplicando dichas igualdades respectivamente por $\pi(u)$ y $\pi(v)$, y restando una con otra se obtiene, teniendo en cuenta (por la condición (a) de (127)) que $\pi(u)\mathbf{b}_i(u) = \pi(v)\mathbf{b}_i(v)$,

$$\mathbf{b}_i(t_i)(\pi(u)\mathbf{a}_{ij}(u) - \pi(v)\mathbf{a}_{ij}(v)) = 0,$$

con lo que queda finalizada la demostración. \square

De dicho lema resulta claro que no existen métodos explícitos DJ-irreducibles que verifiquen (127).

Siguiendo razonamientos similares a los de la demostración del lema anterior, se pueden caracterizar los métodos de P-serie multietapa canónicos que satisfacen las condiciones de canonicidad (127) como sigue:

Lema 2.5.3 *Sea el método (126) DJ-irreducible. Dicho método cumple las condiciones de canonicidad (127) si y sólo si existen $\lambda_{ij}, \beta_i(\omega)$ ($1 \leq i, j \leq s, \omega \in HT$), tales que dicho método puede ser expresado de la forma*

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 - \sum_{i=1}^s \frac{\partial H_i}{\partial Q_i}, & q_1 &= q_0 + \sum_{i=1}^s \frac{\partial H_i}{\partial P_i}, \\ P_i &= p_0 - \sum_{j=1}^s (1 - \lambda_{ji}) \frac{\partial H_j}{\partial Q_j}, & Q_i &= q_0 + \sum_{j=1}^s \lambda_{ij} \frac{\partial H_j}{\partial P_j}, \end{aligned} \quad (133)$$

donde para cada $i = 1, \dots, s$

$$H_i = \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \beta_i(\omega) H(\omega)(P_i, Q_i).$$

Demostración: Se comprueba fácilmente que tales métodos son métodos de la forma (128) que verifican las condiciones (129).

Supongamos que un método de P-serie multietapa es DJ-irreducible y cumple las condiciones de canonicidad (127). Del Lema 2.5.2 se tiene que dicho método es de la forma (128), y es tal que se verifican las condiciones (129). De la DJ-irreducibilidad del método se deduce que para cada $i \in \{1, \dots, s\}$ puede elegirse un $\omega_i \in HT$ tal que $\beta_i(\omega_i) \neq 0$.

Tomando en (129) $\nu \in HT$, $1 \leq i, j \leq s$ arbitrarios, y $\omega = \omega_i$, se tiene que $\bar{\alpha}_{ij}(\omega) = \lambda_{ij} \beta_j(\nu)$, donde

$$\lambda_{ij} = 1 - \frac{\alpha_{ji}(\omega_i)}{\beta_i(\omega_i)}.$$

Finalmente, tomando en (129) $\omega \in HT$, $1 \leq i, j \leq s$ arbitrarios, y $\nu = \omega_i$, se tiene que $\alpha_{ji}(\omega) = (1 - \lambda_{ij}) \beta_i(\omega)$. \square

En el caso de que el número de etapas s se reduzca a 1, de lo anterior se deduce que $P_1 = (1 - \lambda_{11})p_1 + \lambda_{11}p_0$ y $Q_1 = \lambda_{11}q_1 + (1 - \lambda_{11})q_0$, de modo que el método correspondiente es el método de λ_{11} -función generatriz

$$S_{\lambda_{11}}(z, h) = \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \beta_1(\omega) H(\omega)(z).$$

En general, dado $\lambda \in R$, si denotamos $z_\lambda = (p_\lambda^T, q_\lambda^T)^T$, donde $p_\lambda = \lambda p_0 + (1 - \lambda)p_1$ y $q_\lambda = \lambda q_1 + (1 - \lambda)q_0$, puede verse que la λ -función generatriz correspondiente al método (133) es

$$S_\lambda(p_\lambda, q_\lambda, h) = \sum_{i=1}^s H_i + \sum_{i,j=1}^s (\lambda_{ij} - \lambda) \left(\frac{\partial H_i}{\partial Q_i} \right)^T \frac{\partial H_j}{\partial P_j}.$$

donde

$$H_i = \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)}}{\sigma(\omega)} \beta_i(\omega) H(\omega)(P_i, Q_i),$$

$$\begin{aligned}
P_i &= p_\lambda + \sum_{j=1}^s (\lambda_{ji} - \lambda) \frac{\partial H_j}{\partial Q_j} \\
Q_i &= q_\lambda + \sum_{j=1}^s (\lambda_{ij} - \lambda) \frac{\partial H_j}{\partial P_j}.
\end{aligned} \tag{134}$$

De hecho, desarrollando la diferencial de $S_\lambda(p_\lambda, q_\lambda, h)$ y sustituyendo dP_i y dQ_i por las expresiones que se obtienen de diferenciar en (134), llega a que

$$dS_\lambda = (p_0 - p_1)dq_\lambda + (q_1 - q_0)dp_\lambda + \sum_{i=1}^s \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)-1}}{\sigma(\omega)} n(\omega) \beta_i(\omega) H(\omega)(P_i, Q_i),$$

lo cual implica, por un lado que S_λ es la λ -función generatriz del método (133), y por otro lado, que la función $\Gamma(p_0, q_0, h)$ definida en (93) es

$$\Gamma(p_0, q_0, h) = \sum_{i=1}^s \sum_{\omega \in HT} \frac{h^{n(\omega)-1}}{\sigma(\omega)} n(\omega) \beta_i(\omega) H(\omega)(P_i, Q_i).$$

Aplicando el Teorema 2.2.17 se puede deducir directamente (tal como se demuestra el caso general de métodos desarrollables en P-series, en la sección 2.2.7) que el desarrollo en H-serie de $\Gamma(p_0, q_0, h)$ es $\mathcal{H}(y_1^*, y_0)$, donde $y_1 : TP \rightarrow R$ corresponde al desarrollo en P-serie entorno a y_0 de la aproximación y_1 .

2.5.2 Inexistencia de métodos Runge-Kutta multiderivada particionados canónicos

Consideremos como caso particular de método de P-serie multietapa un método RK multiderivada particionado (45). En ese caso, las condiciones de canonicidad (127) se reducen teniendo en cuenta (46) y (6) a las siguientes condiciones (${}^1a_{ij}^{(r)} = a_{ij}^{(r)}$ y ${}^2a_{ij}^{(r)} = \bar{a}_{ij}^{(r)}$):

$$\begin{aligned}
(a) \quad & b_i^{(r)} = \bar{b}_i^{(r)} \quad 1 \leq i \leq s, \quad r \geq 1 \\
(b) \quad & b_i^{(r)} \bar{b}_j^{(l)} - b_i^{(r)} \bar{a}_{ij}^{(l)} - \bar{b}_j^{(l)} a_{ji}^{(r)} = \delta_{ij} \frac{r b_i^{(r+l)} + l \bar{b}_i^{(r+l)}}{r+l} \quad 1 \leq i, j \leq s, \quad r, l \geq 1.
\end{aligned} \tag{135}$$

Dichas condiciones generalizan por una parte las condiciones de canonicidad para métodos Runge-Kutta obtenidas independientemente en [23], [26], y [21], por otra las



condiciones de canonicidad para métodos RK particionados (para sistemas Hamiltonianos generales) obtenidas en [1], así como las condiciones de canonicidad para métodos RK multiderivada cuya suficiencia es demostrada en [21]. En [11] se demuestra la inexistencia de métodos RK multiderivada canónicos (con multiplicidad $m \geq 2$). En esta sección extenderemos este resultado al caso particionado.

Volviendo al caso general de métodos de P-serie multietapa, del Lema 2.5.2 se tiene lo siguiente: teniendo en cuenta que si $t, z \in \overline{TP}$ son equivalentes con raíz en nodos contiguos se verifica que $\pi(t) = -\pi(z)$, si un método DJ-irreducible de la forma (126) verifica las condiciones de canonicidad (127), se deduce de las igualdades (130), (131) y (132) que dados dos P-árboles t, z equivalentes con raíz en nodos contiguos, se tiene que $\mathbf{b}_i(t) = -\mathbf{b}_i(z)$, y si además tienen raíz del mismo tipo, entonces $\mathbf{a}_{ij}(t) = -\mathbf{a}_{ij}(z)$. Si dicho método se trata de un método RK multiderivada particionado (en cuyo caso las condiciones de canonicidad (127) corresponden a las condiciones (135)), todo ello, junto con (46), implica que no existen métodos RK multiderivada particionados que verifiquen las condiciones de canonicidad (135) con multiplicidad $m \geq 2$.

Seguidamente probaremos (extendiendo el resultado de [11]) que las condiciones (135) son condiciones de canonicidad necesarias para métodos RK multiderivada particionados (con número de partes $P = 2$) sin etapas equivalentes. Para ello definiremos el concepto de etapas equivalentes y obtendremos varias caracterizaciones del mismo, extendiendo las ideas desarrolladas en [4] sobre etapas equivalentes de métodos Runge-Kutta.

Definición 2.5.2 *Dado un método RK multiderivada particionado de la forma (45), decimos que las etapas i y j ($1 \leq i, j \leq s$) son equivalentes si para todo sistema (2) con f suficientemente regular², para todo $h \in \mathbb{R}$ suficientemente pequeño $Y_i = Y_j$.*

Definición 2.5.3 *Sea un método RK multiderivada particionado de la forma (45), y sean $Y_i(t)$ ($1 \leq i \leq s$) los coeficientes del desarrollo en P-serie de las etapas intermedias Y_i del método. Decimos que las etapas i y j ($1 \leq i, j \leq s$) son P-equivalentes si para todo P-árbol t se verifica que $Y_i(t) = Y_j(t)$.*

²Consideramos f suficientemente regular si la derivada $(m - 1)$ ésima de f satisface la condición de Lipschitz, donde m es la multiplicidad del método.

Lema 2.5.4 *El método Runge-Kutta multiderivada particionado (45) carece de etapas P-equivalentes, si y sólo si para cada $m \in \mathbb{N}$ se verifica la siguiente implicación*

$$\sum_{i=1}^s \sum_{r=1}^m \lambda_{ir} Y_i^{(r)}(t) = 0 \quad \forall t \in TP \implies \lambda_{ir} = 0 \quad 1 \leq i \leq s, 1 \leq r \leq m. \quad (136)$$

Demostración: Es claro que si el método tiene etapas P-equivalentes, entonces no se verifica dicha implicación.

En cuanto al resultado recíproco, sea \mathcal{T} el subespacio de R^{sm} generado por

$$\left\{ \left(Y_1^{(1)}(t), \dots, Y_s^{(1)}(t), \dots, Y_1^{(m)}(t), \dots, Y_s^{(m)}(t) \right) / t \in TP \right\}, \quad (137)$$

basta con demostrar que $\mathcal{T} = R^{sm}$, es decir, que existen sm vectores $v_1, \dots, v_{sm} \in \mathcal{T}$ que son linealmente independientes.

Demostraremos que existen sm polinomios $p_0(x), \dots, p_{sm}(x)$ tales que

1. $p_0(x) = 1$,
2. $p_1(x)$ es un polinomio de grado $\leq sm - 1$ tal que $p_1(1), \dots, p_1(s)$ son distintos dos a dos, y $p_1'(1), \dots, p_1'(s)$ son no nulos,
3. Para $l = 2, \dots, sm - 1$, $p_l(x) = (p_1(x))^l$.
4. Para $l = 1, \dots, sm$, $v_l \in \mathcal{T}$, donde denotamos por v_l al vector de R^{sm}

$$\left(p_{l-1}(1), \dots, p_{l-1}(s), \frac{p_{l-1}^{(1)}(1)}{2!}, \dots, \frac{p_{l-1}^{(1)}(s)}{2!}, \dots, \frac{p_{l-1}^{(m-1)}(1)}{m!}, \dots, \frac{p_{l-1}^{(m-1)}(s)}{m!} \right).$$

Una vez demostrado esto, se deduce que los vectores v_1, \dots, v_{sm} son linealmente independientes como sigue:

Sean $d_1, \dots, d_{sm-1} \in R$ tales que $\sum_{l=1}^{sm} d_l v_l = 0$. Si consideremos el polinomio $q(y) = \sum_{l=1}^{sm} d_l y^{l-1}$, teniendo en cuenta la definición de los v_l , se concluye que $1, \dots, s$ son ceros de multiplicidad $\geq m$ del polinomio $q(p_1(x))$. Ello implica que $p_1(1), \dots, p_1(s)$ son ceros de $q(x)$. Además, se deduce fácilmente que si $p_1'(1), \dots, p_1'(s)$ son no nulos, la multiplicidad de dichos ceros es $\geq m$, lo cual implica que $q(x) \equiv 0$, y por tanto $d_l = 0$ para $l = 1, \dots, sm$, de modo que v_1, \dots, v_{sm} son independientes.

Veamos ahora que existen polinomios $p_0(x), \dots, p_{sm-1}(x)$ tales que satisfacen dichas condiciones.

Para ver que $v_1 \in \mathcal{T}$, basta con tomar en el sistema generador (137) de \mathcal{T} el vector correspondiente a $t = \tau_1$ o $t = \tau_2$.

Puesto que por hipótesis el método es P-irreducible, se pueden elegir $t_1, \dots, t_n \in TP$ tales que, $t_1 = \tau_1$ y para $1 \leq i < i' \leq s$ existe $t_j \in \{t_1, \dots, t_n\}$ tal que $Y_i(t_j) \neq Y_{i'}(t_j)$. Fijados $c_1, \dots, c_n \in R$, es claro que existe un único polinomio $p_1(x)$ de grado $\leq sm - 1$ tal que para $1 \leq i \leq s$, $0 \leq r \leq m - 1$

$$p_1^{(r)}(i) = (r+1)! \sum_{j=1}^n c_j Y_i^{(r+1)}([t_j]_1) = r! \sum_{j=1}^n c_j Y_i^{(r)}(t_j), \quad (138)$$

de tal modo que el correspondiente vector $v_2 \in \mathcal{T}$.

Ahora bien, puede verse que existen $c_1, \dots, c_n \in R$ tales que

$$p_1(i) - p_1(i') = \sum_{j=1}^n c_j (Y_i(t_j) - Y_{i'}(t_j)) \neq 0, \quad 1 \leq i < i' \leq s,$$

$$p_1'(i) = c_1 + \sum_{j=2}^n c_j Y_i^{(1)}(t_j) \neq 0, \quad 1 \leq i \leq s.$$

Finalmente, demostraremos que, eligiendo $p_1(x)$ de acuerdo con coeficientes c_l que verifiquen las condiciones de arriba, los vectores v_2, \dots, v_{sm} correspondientes pertenecen al subespacio \mathcal{T} , es decir que, para $l = 2, \dots, sm - 1$

$$p_l^{(r-1)}(i) = r! \sum_{t \in TP} e_t Y_i^{(r)}(t), \quad 1 \leq i \leq s, \quad 1 \leq r \leq m,$$

donde los e_t son nulos excepto para un número finito de P-árboles t .

Puesto que $p_l(x) = (p_1(x))^l$, aplicando la regla de Leibniz, y teniendo en cuenta (138), tenemos para $1 \leq i \leq s$, $1 \leq r \leq m$,

$$p_l^{(r-1)}(i) = \sum_{\substack{k_1 + \dots + k_l = r-1 \\ k_1, \dots, k_l = 0}}^{r-1} \binom{r-1}{k_1, \dots, k_l} p_1^{(k_1)}(i) \cdots p_1^{(k_l)}(i)$$

$$= (r-1)! \sum_{j_1, \dots, j_l=1}^n c_{j_1} \cdots c_{j_l} \sum_{\substack{k_1 + \dots + k_l = r-1 \\ k_1, \dots, k_l = 0}}^{r-1} Y_i^{(k_1)}(t_{j_1}) \cdots Y_i^{(k_l)}(t_{j_l}).$$

De ahí, aplicando el Teorema de Kastlunger generalizado 1.8.2, se tiene el resultado requerido. \square

Lema 2.5.5 Para el método RK multiderivada particionado (45), e $i \neq j$ ($1 \leq i, j \leq s$), las siguientes afirmaciones son equivalentes:

1. Las etapas i y j son equivalentes.
2. Las etapas i y j son P -equivalentes.
3. Existe una partición $\{I_1, \dots, I_M\}$ de $\{1, \dots, s\}$ con $i, j \in I_1$ tal que si $1 \leq r$, $1 \leq L \leq M$, $1 \leq l, l' \leq s$ y l, l' pertenecen al mismo subconjunto de la partición, entonces se verifica ($1 \leq e \leq P$)

$$\sum_{k \in I_L} e_{a_{lk}}^{(r)} = \sum_{k \in I_L} e_{a_{l'k}}^{(r)}.$$

Demostración:

1. $1. \implies 2.$: Se tiene de la independencia de las diferenciales elementales, ya que para todo N y $1 \leq i, j \leq s$

$$Y_i - Y_j = \sum_{\substack{t \in TP \\ n(t) \leq N}} \frac{h^{n(t)}}{\sigma(t)} (Y_i(t) - Y_j(t)) F(t)(y) + O(h^{N+1}).$$

2. $2. \implies 3.$: Sea $\{I_1, \dots, I_M\}$ la partición de $\{1, \dots, s\}$ formada por las clases de P -equivalencia, de tal forma que $i, j \in I_1$. De la fórmula de Kastlunger generalizada (50) se deduce que para cada $r \geq 1$, y para cada $t \in TP$ se verifica $Y_i^{(r)}(t) = Y_j^{(r)}(t)$. Fijemos $l_1 \in I_1, \dots, l_M \in I_M$ y definamos las M etapas de un método RK multiderivada particionado con coeficientes

$$e_{A_{LK}}^{(r)} = \sum_{k \in I_K} e_{a_{l_k k}}^{(r)}, \quad 1 \leq L, K \leq M, \quad r \geq 1, \quad 1 \leq e \leq P.$$

Sean $Z_L(t)$ los coeficientes del desarrollo en P -serie de la etapa L ($1 \leq L \leq M$), se verifica que si $l \in I_L$ entonces para cada P -árbol t , $Y_l(t) = Z_L(t)$, y por tanto, para cada $t \in TP$ y cada $r \geq 1$ se tiene $Y_l^{(r)}(t) = Z_L^{(r)}(t)$. El método así construido no tiene etapas P -equivalentes, y se verifica que si $l, l' \in I_L$ ($1 \leq L \leq M$)

$$Y_l(t) - Y_{l'}(t) = \sum_{K=1}^M \sum_{r \geq 1} \left(\sum_{k \in I_K} e_{a_{lk}}^{(r)} - \sum_{k \in I_K} e_{a_{l'k}}^{(r)} \right) Z_K^{(r)}(t),$$

de donde aplicando el Lema 2.5.4 se deduce el resultado requerido.

3. 3. \implies 1. : Si el método es explícito se tiene de forma inmediata. En otro caso, si aplicamos la iteración del punto fijo para valores iniciales que verifiquen $Y_i^{[0]} = Y_j^{[0]}$ de forma que sea convergente, se tiene que para toda iteración k $Y_i^{[k]} = Y_j^{[k]}$, y por tanto $Y_i = Y_j$.

□

De la tercera caracterización de etapas equivalentes de este lema, junto con la demostración de la implicación (2. \implies 3.), se deduce que todo método con etapas equivalentes puede ser reducido a un método con menos etapas, que carece de etapas equivalentes y para h suficientemente pequeño proporciona los mismos resultados numéricos que el método original. La segunda caracterización en cambio nos asegura que si un método (45) dado no tiene etapas equivalentes, entonces para todo $m \in \mathbb{N}$ se verifica la implicación (136) del Lema 2.5.4, lo que nos permitirá demostrar el siguiente teorema:

Teorema 2.5.6 *No existen métodos RK multiderivada particionados (con multiplicidad $m \geq 2$) DJ-irreducibles y sin etapas equivalentes.*

Demostración: Es claro que basta con demostrar que las condiciones (135) son necesarias para que el método sea canónico.

Sean $y_1(t)$ los coeficientes del desarrollo en P-serie del método (45). Si dicho método es canónico debe cumplir las condiciones (53) del Teorema 2.2.1 de P-series canónicas. Sean $Y_i(t)$ los coeficientes del desarrollo en P-serie de las etapas intermedias Y_i :

1. De la fórmula de Kastlunger generalizada (50) se deduce que $Y_i^{(r)}(t)$ no depende del tipo de raíz de t , y por tanto

$$y_1(t) - y_1(\bar{t}) = \sum_{i=1}^s \sum_{r \geq 1} (b_i^{(r)} - \bar{b}_i^{(r)}) Y_i^{(r)}(t),$$

de modo que como aplicación del lema 2.5.4 tenemos que se tiene que verificar la condición (a) de (135).

2. Sean $t \in TP^1$ y $z \in TP^2$, si desarrollamos $y_1(t \cdot z)$ haciendo uso de las igualdades (48) y (49) obtenemos

$$\begin{aligned} y_1(t \cdot z) &= \sum_{i=1}^s \sum_{r \geq 1} b_i^{(r)} Y_i^{(r)}(t \cdot z) \\ &= \sum_{i=1}^s \sum_{r, l \geq 1} \frac{r}{r+l} b_i^{(r+l)} Y_i^{(r)}(t) Y_i^{(l)}(z) + \sum_{i=1}^s \sum_{r \geq 1} b_i^{(r)} Y_i^{(r)}(t) Y_i(z) \\ &= \sum_{i=1}^s \sum_{r, l \geq 1} \frac{r}{r+l} b_i^{(r+l)} Y_i^{(r)}(t) Y_i^{(l)}(z) + \sum_{i, j=1}^s \sum_{r, l \geq 1} b_i^{(r)} \bar{a}_{ij}^{(l)} Y_i^{(r)}(t) Y_j^{(l)}(z). \end{aligned}$$

Desarrollando de forma análoga $y_1(z \cdot t)$ se tiene que

$$y_1(t \cdot z) + y_1(z \cdot t) - y_1(t)y_1(z) = \sum_{i, j=1}^s \sum_{r, l \geq 1} m_{ij}^{(r, l)} Y_i^{(r)}(t) Y_j^{(l)}(z),$$

donde

$$m_{ij}^{(r, l)} = \bar{b}_i^{(r)} a_{ij}^{(l)} + b_j^{(l)} \bar{a}_{ji}^{(r)} - \bar{b}_i^{(r)} b_j^{(l)} + \delta_{ij} \frac{r b_i^{(r+l)} + l \bar{b}_i^{(r+l)}}{r+l}.$$

Sea $m \geq 1$, tal que $\forall r > m$ se verifica

$$b_i^{(r)} = \bar{b}_i^{(r)} = a_{ij}^{(r)} = \bar{a}_{ij}^{(r)} = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s,$$

la anterior igualdad viene a decir, teniendo en cuenta el Lema 2.5.4, que la aplicación bilineal de R^{sm} en R^{sm} definida por los coeficientes $m_{ij}^{(r, l)}$ es nula para todo par de vectores de R^{sm} , lo cual implica la condición (b) de (135).

□

2.5.3 Condiciones de canonicidad suficientes para métodos de P-series multietapa aplicados a sistemas Hamiltonianos separables

Dado un sistema Hamiltoniano separable, con Hamiltoniano de la forma (108), consideremos la aplicación a dicho sistema de un método de P-series multietapa (con número de partes $P = 2$) de la forma (126), que por la separabilidad se reduce al siguiente esquema:

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 + \sum_{i=1}^s \sum_{z \in TPS^1} b_i(z) P_i^{(z)}, & q_1 &= q_0 + \sum_{i=1}^s \sum_{z \in TPS^2} b_i(z) Q_i^{(z)}, \\ P_i &= p_0 + \sum_{j=1}^s \sum_{z \in TPS^1} a_{ij}(z) P_j^{(z)}, & Q_i &= q_0 + \sum_{j=1}^s \sum_{z \in TPS^2} a_{ij}(z) Q_j^{(z)}, \end{aligned} \quad (139)$$

$$\left(P_i^{(z)T}, Q_i^{(z)T} \right)^T = \frac{h^{n(z)}}{\sigma(z)} F(z)(P_i, Q_i).$$

Teorema 2.5.7 Si los coeficientes del método (139) verifican que para cada $t \in \overline{TP^1}$, $z \in \overline{TP^2}$, $1 \leq i, j \leq s$,

$$b_i(t)b_j(z) - b_i(t)a_{ij}(z) - b_j(z)a_{ji}(t) = \delta_{ij}(b_i(t \cdot z) + b_i(z \cdot t)), \quad (140)$$

entonces, la aplicación de dicho método al sistema Hamiltoniano separable (51) es simpléctica.

Demostración: Diferenciando término a término, y eliminando dp_0 y dq_0 a partir de las expresiones que se obtienen para dP_i y dQ_i , se llega a

$$\begin{aligned} dp_1 \wedge dq_1 &= dp_0 \wedge dq_0 \\ &+ \sum_{i=1}^s \sum_{t \in TPS^1} b_i(t) dP_i^{(t)} \wedge dQ_i + \sum_{i=1}^s \sum_{t \in TPS^2} b_i(t) dP_i \wedge dQ_i^{(t)} \\ &+ \sum_{\substack{i,j=1 \\ t \in TPS^1 \\ z \in TPS^2}}^s \sum (b_i(t)b_j(z) - b_i(t)a_{ij}(z) - b_j(z)a_{ji}(t)) dP_i^{(t)} \wedge dQ_j^{(z)}. \end{aligned}$$

Ahora bien, si consideramos el Lema 2.3.2 para $y = (P_i^T, Q_i^T)^T$ y $t^* \in TPS^1$ por una lado, y para $t^* \in TPS^2$ por otro, y multiplicamos por $h^{n(t^*)}/\sigma(t^*)$ en ambos

miembros de las igualdades correspondientes, las igualdades que se obtienen pueden ser reescritas en términos de diferenciales como sigue:

$$dP_i^{(t^*)} \wedge dQ_i = - \sum_{\substack{t \in TPS^1, z \in TPS^2 \\ t \cdot z = t^*}} dP_i^{(t)} \wedge dQ_i^{(z)}, \quad t^* \in TPS^1,$$

$$dP_i \wedge dQ_i^{(t^*)} = - \sum_{\substack{t \in TPS^1, z \in TPS^2 \\ z \cdot t = t^*}} dP_i^{(t)} \wedge dQ_i^{(z)}, \quad t^* \in TPS^2.$$

de donde aplicando las hipótesis del teorema se tiene que $dp_1 \wedge dq_1 - dp_0 \wedge dq_0 = 0$. \square

Seguidamente, veremos que todo método de P-serie multietapa explícito que verifica las condiciones de canonicidad para sistemas separables (140) es reducible a un método RK particionado simpléctico para sistemas separables.

Un método para sistemas Hamiltonianos separables de la forma (139) es explícito si verifica que para $i = 1, \dots, s$:

1. $a_{ii}(\tau_1)a_{ii}(\tau_2) = 0$.
2. $a_{ii}(t) = 0$ para cada PS-árbol t de orden ≥ 2 .
3. $a_{ij}(t) = 0$ para cada $j > i$ y cada PS-árbol t .

Definición 2.5.4 Diremos que el método (139) es DJS-reducible si existen $I_1, I_2 \subset \{1, \dots, s\}$ tales que $I_1 \cup I_2 \neq \emptyset$, y

1. $a_{ji}(\tau_2) = b_i(\tau_2) = 0$ si $i \in I_1, j \notin I_2$.
2. $a_{ji}(\tau_1) = b_i(\tau_1) = 0$ si $i \in I_2, j \notin I_1$.
3. $a_{ji}(t) = b_i(t) = 0$ si $i \in I_1 \cup I_2, j \notin I_1, t \in TPS^1 / n(t) \geq 2$.
4. $a_{ji}(t) = b_i(t) = 0$ si $i \in I_1 \cup I_2, j \notin I_2, t \in TPS^2 / n(t) \geq 2$.

En ese caso, el método es tal que los valores intermedios P_i tales que $i \in I_1$, y los Q_i tales que $i \in I_2$ no repercuten en la solución numérica (p_1, q_1) . En particular, es claro que si $I_1 \cap I_2 \neq \emptyset$, el método es DJ-reducible.

Definición 2.5.5 Diremos que dos métodos de la forma (139) son DJS-equivalentes, si o bien coinciden en todos los coeficientes, o bien son DJS-reducibles, con los mismos I_1 e I_2 , y coinciden en todos los coeficientes excepto quizá en los $a_{ij}(t)$ tales que $i \in I_e$ y $t \in TPS^e$ ($e = 1, 2$).

Es claro que, si dos métodos son DJS-equivalentes, dan para sistemas Hamiltonianos separables las mismas aproximaciones (p_1, q_1) .

Teorema 2.5.8 *Sea un método para sistemas separables (139) explícito, y que verifique la condiciones de canonicidad (140), entonces dicho método es DJS-equivalente a un método RK particionado explícito y simpléctico para sistemas separables.*

Demostración: Sean $I_1 = \{i \in / b_i(\tau_2) = 0\}$ y $I_2 = \{i \in / b_i(\tau_1) = 0\}$, basta con demostrar los siguientes puntos:

1. $b_i(t) = 0$, $1 \leq i \leq s$, $t \in TPS / n(t) \geq 2$.
2. $a_{ij}(t) = 0$ si $i \notin I_1$ y $t \in TPS^1 / n(t) \geq 2$.
3. $a_{ij}(t) = 0$ si $i \notin I_2$ y $t \in TPS^2 / n(t) \geq 2$.

En ese caso se tiene que si $I_1 = I_2 = \emptyset$, dicho método es un método de RK particionado explícito, y si en cambio $I_1 \cup I_2 \neq \emptyset$, entonces es DJS-reducible y DJS-equivalente al método RK particionado explícito que resulta de tomar en el método original $a_{ij}(t) = 0$ para cada $i \in T_e$ y cada $t \in TPS^e$ ($e = 1, 2$).

Si denotamos para cada $t \in TPS$ y cada $i = 1, \dots, s$ $d_i(t) = b_i(t) - a_{ii}(t)$, la condición (140) para $i = j$ se puede expresar para métodos explícitos como sigue:

$$d_i(t)d_i(z) = d_i(t \cdot z) + d_i(z \cdot t) \quad \forall t \in TPS^1, \forall z \in TPS^2.$$

Demostraremos que para todo $i = 1, \dots, s$ se verifica $d_i(t) = 0$ para cada $t \in TPS$ tal que $n(t) \geq 2$, y puesto que en tal caso $a_{ii}(t) = 0$ por tratarse de un método explícito, se tendrá el punto 1.

Demostraremos primeramente que o bien $d_i(t) = 0$ para cada $t \in TPS^1$, o bien $d_i(z) = 0$ para cada $z \in TPS^2$. En efecto, en caso contrario, sea $t \in TPS^1$ de

orden maximal entre los $u \in TPS^1$ tales que verifican $d_i(u) \neq 0$, y sea a su vez $z \in TPS^2$ de orden maximal entre los $u \in TPS^2$ tales que $d_i(u) \neq 0$. Se tiene que $d_i(t)d_i(z) = d_i(t \cdot z) + d_i(z \cdot t) = 0$, lo cual es por hipótesis falso.

Supongamos, sin pérdida de generalidad, que $d_i(t) = 0$ para cada $t \in TPS^1$. Entonces, dado $z \in TPS^2 / n(z) \geq 2$, existen $u \in TPS^2, v \in TPS^1$ tales que $z = u \cdot v$, y por tanto $d_i(z) = d_i(v)d_i(u) = 0$.

Finalmente, para demostrar el punto 2, aplicando (140) para $j < i, t \in TPS^1, z = \tau_2$ se tiene que $b_i(\tau_2)(b_j(t) - a_{ij}(t)) = 0$, y por tanto, si $i \notin I_1, a_{ij}(t) = b_i(t) = 0$. De forma análoga se demuestra el punto 3, ya que aplicando (140) para $j < i, t = \tau_1, z \in TPS^2$ se tiene $b_i(\tau_1)(b_j(z) - a_{ij}(z)) = 0$. \square

2.5.4 Métodos Runge-Kutta multiderivada particionados simplécticos para sistemas Hamiltonianos separables

En esta subsección demostraremos que no existen métodos RK multiderivada particionados con multiplicidad $m \geq 3$ que sean simplécticos para sistemas separables. Así mismo, haciendo uso del resultado obtenido en la subsección anterior sobre métodos explícitos, deduciremos que los únicos métodos RK multiderivada particionados explícitos que son simplécticos para sistemas Hamiltonianos son esencialmente métodos RK particionados, métodos simplécticos ya estudiados en [1].

Sea un método RK multiderivada particionado de la forma

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 + \sum_{r \geq 1} \sum_{i=1}^s b_i^{(r)} P_i^{(r)}, & q_1 &= q_0 + \sum_{r \geq 1} \sum_{i=1}^s \bar{b}_i^{(r)} Q_i^{(r)}, \\ P_i^{(r)} &= \frac{h^r}{r!} (D^r p)(P_i, Q_i), & Q_i^{(r)} &= \frac{h^r}{r!} (D^r q)(P_i, Q_i), \\ P_i &= p_0 + \sum_{r \geq 1} \sum_{j=1}^s a_{ij}^{(r)} P_j^{(r)}, & Q_i &= q_0 + \sum_{r \geq 1} \sum_{j=1}^s \bar{a}_{ij}^{(r)} Q_j^{(r)} \end{aligned} \quad (141)$$

donde se supone que para todo r mayor que un cierto m todos los coeficientes son nulos. Decimos en ese caso que el menor de tales m es la *multiplicidad* del método.

Las condiciones suficientes de canonicidad para métodos de P-series multietapa aplicados a sistemas Hamiltonianos separables, se reducen (de forma análoga que para

sistemas Hamiltonianos generales en la Subsección 2.5.2) para el caso particular de métodos RK multiderivada particionados a las siguientes:

$$b_i^{(r)} \bar{b}_j^{(l)} - b_i^{(r)} \bar{a}_{ij}^{(l)} - \bar{b}_j^{(l)} a_{ji}^{(r)} = \delta_{ij} \frac{r b_i^{(r+l)} + l \bar{b}_i^{(r+l)}}{r+l} \quad 1 \leq i, j \leq s, \quad r, l \geq 1. \quad (142)$$

Dichas condiciones generalizan las condiciones ya conocidas para el caso particular de métodos Runge-Kutta particionados, cuya necesidad, para métodos sin etapas equivalentes, es demostrada en [1].

Haciendo uso del concepto de DJS-reducibilidad, probaremos primeramente que las condiciones (142) son satisfechas solamente por métodos RK multiderivada particionados cuya multiplicidad es esencialmente $m \leq 2$.

Para finalizar, siguiendo a las ideas desarrolladas en la Subsección 2.5.2, probaremos que las condiciones (142) son necesarias para métodos sin etapas equivalentes.

Las condiciones de la Definición 2.5.4 de DJS-reducibilidad pueden reescribirse para el caso particular de métodos RK multiderivada particionados como sigue:

$$\begin{aligned} (a) \quad & \bar{a}_{ji}^{(1)} = \bar{b}_i^{(1)} = 0, \text{ si } i \in I_1, j \notin I_2, \\ (b) \quad & a_{ji}^{(1)} = b_i^{(1)} = 0, \text{ si } i \in I_2, j \notin I_1, \\ (c) \quad & a_{ji}^{(r)} = b_i^{(r)} = 0, \text{ si } i \in I_1 \cup I_2, j \notin I_1, r \geq 2, \\ (d) \quad & \bar{a}_{ji}^{(r)} = \bar{b}_i^{(r)} = 0, \text{ si } i \in I_1 \cup I_2, j \notin I_2, r \geq 2. \end{aligned} \quad (143)$$

Así, un método que verifique dichas condiciones es tal que las semietapas P_i tales que $i \in I_1$ y las Q_i tales que $i \in I_2$ no afectan para nada a la aproximación (p_0, q_0) .

Teorema 2.5.9 *Todo método RK multiderivada particionado que verifique las condiciones de canonicidad (142) para sistemas separables es DJS-equivalente a un método RK multiderivada particionado con multiplicidad $m \leq 2$.*

Demostración:

1. Demostraremos primero que para cada $r \geq 3$, $1 \leq i \leq s$, $b_i^{(r)} = \bar{b}_i^{(r)} = 0$:

Supongamos que existen $i \in \{1, \dots, s\}$ y $r \geq 3$ tales que $b_i^{(r)} \neq 0$ o $\bar{b}_i^{(r)} \neq 0$. Sea m el mayor r que verifique dicha condición. Supongamos sin pérdida de

generalidad que $b_i^{(m)} \neq 0$. Si consideramos (142) para $r = m$, $l \geq 1$, y $j = i$, se tiene

$$\bar{a}_{ii}^{(l)} = \lambda \bar{b}_i^{(l)}, \text{ donde } \lambda = 1 - \frac{a_{ii}^{(m)}}{b_i^{(m)}}. \quad (144)$$

Primeramente demostraremos que $\bar{b}_i^{(m)} \neq 0$: Si $\bar{b}_i^{(m)} = 0$, tomando en (142) $r = 1$, $l = m - 1$, y $j = i$, teniendo en cuenta la igualdad (144) se puede escribir

$$\bar{b}_i^{(m-1)}((1 - \lambda)b_i^{(1)} - a_{ii}^{(1)}) = b_i^{(m)},$$

lo cual implica que $\bar{b}_i^{(m-1)} \neq 0$. Por otro lado, tomando en (142) $r = 2$, $l = m - 1$, y $j = i$, se tiene que

$$\bar{b}_i^{(m-1)}((1 - \lambda)b_i^{(2)} - a_{ii}^{(2)}) = 0,$$

lo que implica que $a_{ii}^{(2)} = (1 - \lambda)b_i^{(2)}$. Finalmente, aplicando (142) para $r = 2$, $l = m - 2$, $j = i$, se llega a que $b_i^{(m)} = 0$, lo cual es absurdo.

Para terminar con este punto, veremos que no puede ser $m \geq 3$: Si consideramos (142) para $l = m$, $r \geq 1$, y $j = i$, teniendo en cuenta (144) se obtiene

$$a_{ii}^{(r)} = (1 - \lambda)b_i^{(r)}.$$

A partir de dicha igualdad y de (144), tomando en (142) $i = j$ y $r, l \geq 1$ tales que $r + l = m$, se llega a que $rb_i^{(m)} + l\bar{b}_i^{(m)} = 0$, lo cual se contradice con la hipótesis de que $m \geq 3$ y $b_i^{(m)} \neq 0$.

2. Sean $I_1 = \{i / \bar{b}_i^{(1)} = \bar{b}_i^{(2)} = 0\}$, $I_2 = \{i / b_i^{(1)} = b_i^{(2)} = 0\}$, demostraremos que si $I_1 \cup I_2 \neq \emptyset$, se verifican las condiciones (143), es decir, el método es DJS-reducible:

Sea $i \in I_1$, considerando (142) para $j = i$, $l = 1$, y $r = 1$ por un lado y $r = 2$ por otro, se obtiene que

$$b_i^{(1)}\bar{a}_{ii}^{(1)} = b_i^{(2)}, \quad b_i^{(2)}\bar{a}_{ii}^{(1)} = 0,$$



lo que implica que $b_i^{(2)} = 0$. Análogamente se tiene que $i \in I_2$ implica que $\bar{b}_i^{(2)} = 0$.

Por tanto, en cuanto a la condición de DJS-reducibilidad (a) de (143), tenemos que

$$i \in I_1, j \notin I_2 \Rightarrow \bar{b}_i^{(1)} = \bar{b}_i^{(2)} = b_i^{(2)} = 0, \text{ y } b_j^{(1)} \neq 0 \text{ o } b_j^{(2)} \neq 0,$$

de donde se tiene, aplicando (142) para $l = 1, r = 1$ por una lado, y para $l = 1, r = 2$ por otro, que $b_i^{(1)} \bar{a}_{ji}^{(1)} = b_i^{(2)} \bar{a}_{ji}^{(1)} = 0$, y e ahí $\bar{a}_{ji}^{(1)} = 0$.

De forma totalmente análoga se deduce la condición (b) de (143).

De (142) se deducen fácilmente las siguientes implicaciones:

$$\begin{aligned} b_j^{(r)} \neq 0, \bar{b}_i^{(l)} = 0, r \geq 1, l \geq 2 &\Rightarrow \bar{a}_{ji}^{(l)} = 0 \\ \bar{b}_j^{(r)} \neq 0, b_i^{(l)} = 0, r \geq 1, l \geq 2 &\Rightarrow a_{ji}^{(l)} = 0. \end{aligned} \quad (145)$$

Demostraremos sólo la condición (c) de (143), ya que la demostración de la condición (d) es totalmente análoga. Es claro por lo visto anteriormente que $i \in I_1 \cup I_2$ implica $b_i^{(r)} = \bar{b}_i^{(r)} = 0$ para $r \geq 2$, y, puesto que $j \notin I_1 \cup I_2$ implica que existen $r_1, r_2 \in \{1, 2\}$ con $b_i^{r_1} \neq 0$ y $\bar{b}_i^{r_2} \neq 0$, de la segunda de las implicaciones de (145) se tiene la condición (c) de (143).

3. Para demostrar que el método es DJS-equivalente a un método RK multiderivada particionado con multiplicidad ≤ 2 , nos queda probar las siguientes implicaciones:

$$(a) \ i \notin I_1 \Rightarrow a_{ij}^{(r)} = 0 \ \forall r \geq 3,$$

$$(b) \ i \notin I_2 \Rightarrow \bar{a}_{ij}^{(r)} = 0 \ \forall r \geq 3,$$

las cuales se demuestran fácilmente haciendo uso de las implicaciones (145) de forma análoga que en el apartado anterior.

□

Definición 2.5.6 Dado un método RK multiderivada particionado de la forma (141), sean $1 \leq i, j \leq s$. Decimos que las semietapas P_i y P_j (Q_i y Q_j) son equivalentes si,

para todo sistema separable con f suficientemente regular, para todo $h \in R$ suficientemente pequeño $P_i = P_j$ ($Q_i = Q_j$).

Tal como se muestra en [1] estudiando el caso particular de métodos RK particionados, las condiciones de canonicidad (142) de métodos RK multiderivada particionados para sistemas Hamiltonianos separables no son necesarias para métodos con semietapas equivalentes. Extendiendo las ideas desarrolladas en la Subsección 2.5.2 sobre etapas equivalentes, obtendremos una serie de caracterizaciones del concepto de semietapas equivalentes, que nos permitirán demostrar que las condiciones de canonicidad (142) son necesarias para métodos sin semietapas equivalentes. Además, veremos que todo método con semietapas equivalentes puede ser reducido a un método sin semietapas equivalentes que proporciona las mismas aproximaciones (p_1, q_1) que el método original.

Definición 2.5.7 Sea un método RK multiderivada particionado de la forma (141), y sean $Y_i(t)$ ($1 \leq i \leq s$) los coeficientes del desarrollo en P -serie de las etapas intermedias Y_i del método. Decimos que las semietapas P_i y P_j (Q_i y Q_j) son P -equivalentes si para todo $t \in TPS^1$ ($t \in TPS^2$) se verifica que $Y_i(t) = Y_j(t)$.

Los dos siguientes lemas son análogos al Lema 2.5.4 y al Lema 2.5.5 respectivamente, y pueden ser demostrados sin mayor dificultad siguiendo las líneas de las demostraciones de estos últimos:

Lema 2.5.10 Si el método RK multiderivada particionado (141) carece de semietapas P -equivalentes, entonces, para cada $m \in N$ se verifica las siguientes implicaciones

$$\sum_{i=1}^s \sum_{r=1}^m \lambda_{ir} Y_i^{(r)}(t) = 0 \quad \forall t \in TPS^1 \implies \lambda_{ir} = 0 \quad 1 \leq i \leq s, \quad 1 \leq r \leq m, \quad (146)$$

$$\sum_{i=1}^s \sum_{r=1}^m \lambda_{ir} Y_i^{(r)}(t) = 0 \quad \forall t \in TPS^2 \implies \lambda_{ir} = 0 \quad 1 \leq i \leq s, \quad 1 \leq r \leq m.$$

Lema 2.5.11 Sea el método RK multiderivada particionado (45), y sean $i \neq j$ ($1 \leq i, j \leq s$), las siguientes afirmaciones son equivalentes:

1. Las semietapas P_i y P_j (Q_i y Q_j) son equivalentes.

2. Las semietapas P_i y P_j (Q_i y Q_j) son P -equivalentes.
3. Existen dos particiones $\{I_1, \dots, I_M\}$, $\{J_1, \dots, J_N\}$ de $\{1, \dots, s\}$ con $i, j \in I_1$ ($i, j \in J_1$) tales que

(a) Si $1 \leq L \leq N$, $1 \leq l, l' \leq s$, y l, l' pertenecen al mismo subconjunto de la partición $\{I_1, \dots, I_M\}$, entonces se verifica

$$\sum_{k \in J_L} a_{lk}^{(1)} = \sum_{k \in J_L} a_{l'k}^{(1)},$$

(b) Si $1 \leq L \leq M$, $1 \leq l, l' \leq s$, y l, l' pertenecen al mismo subconjunto de la partición $\{J_1, \dots, J_N\}$, entonces se verifica

$$\sum_{k \in I_L} \bar{a}_{lk}^{(1)} = \sum_{k \in I_L} \bar{a}_{l'k}^{(1)},$$

(c) Sean $1 \leq L \leq N$, $1 \leq K \leq M$, $\tau \geq 2$, $1 \leq l, l' \leq s$,

- Si l, l' pertenecen al mismo subconjunto de la partición $\{I_1, \dots, I_M\}$, entonces se verifica

$$\sum_{k \in I_L \cap J_K} a_{lk}^{(\tau)} = \sum_{k \in I_L \cap J_K} a_{l'k}^{(\tau)},$$

- Si l, l' pertenecen al mismo subconjunto de la partición $\{J_1, \dots, J_N\}$, entonces se verifica

$$\sum_{k \in I_L \cap J_K} \bar{a}_{lk}^{(\tau)} = \sum_{k \in I_L \cap J_K} \bar{a}_{l'k}^{(\tau)}.$$

De la tercera caracterización de semietapas equivalentes de este lema se puede deducir que todo método con etapas equivalentes puede ser reducido a un método que carece de etapas equivalentes y para h suficientemente pequeño proporciona los mismos resultados numéricos que el método original.

De la segunda caracterización se deduce que si el método (141) no tiene semietapas equivalentes, entonces para todo $m \in N$ se verifica la implicación (146) del Lema 2.5.10.

Teorema 2.5.12 *Todo método RK multiderivada particionado (141) simpléctico y sin semietapas equivalentes, es DJS-equivalente a un método (141) con multiplicidad $m \leq 2$. Si además el método es explícito, entonces es DJS-equivalente a un método RK particionado.*

Demostración: Es claro, teniendo en cuenta los Teoremas 2.5.9 y 2.5.8, que basta con demostrar que las condiciones (135) son necesarias para que el método sea canónico.

Sean $y_1(t)$ los coeficientes del desarrollo en P-serie del método (141). Si dicho método es canónico, debe cumplir las condiciones de canonicidad de P-series para sistemas Hamiltonianos separables (110) del Teorema 2.3.1. Sean $Y_i(t)$ los coeficientes del desarrollo en P-serie de las etapas intermedias Y_i : de la demostración del Teorema 2.5.6, se tiene que

$$y_1(t \cdot z) + y_1(z \cdot t) - y_1(t)y_1(z) = \sum_{i,j=1}^s \sum_{r,l \geq 1} m_{ij}^{(r,l)} Y_i^{(r)}(t) Y_j^{(l)}(z),$$

donde

$$m_{ij}^{(r,l)} = \bar{b}_i^{(r)} a_{ij}^{(l)} + b_j^{(l)} \bar{a}_{ji}^{(r)} - \bar{b}_i^{(r)} b_j^{(l)} + \delta_{ij} \frac{r b_i^{(r+l)} + l \bar{b}_i^{(r+l)}}{r+l}.$$

Por tanto, para que el método (142) sea simpléctico, es condición necesaria que para cada $t \in TPS^1, z \in TPS^2$ se verifique

$$\sum_{i,j=1}^s \sum_{r,l=1}^m m_{ij}^{(r,l)} Y_i^{(r)}(t) Y_j^{(l)}(z) = 0. \quad (147)$$

Si consideramos para cada $t \in TPS$ vectores $Y(t)$ de R^{sm} de componentes $Y_i^{(r)}(t)$, $i = 1, \dots, s, r = 1, \dots, m$, del Lema 2.5.10 se deduce, que si el método (141) no tiene semietapas equivalentes, tanto $\{Y(t) / t \in TPS^1\}$ como $\{Y(t) / t \in TPS^2\}$ son sistemas generadores de R^{sm} . Por tanto, de la condición (147) se concluye que la aplicación bilineal definida sobre R^{sm} por los coeficientes $m_{ij}^{(r,l)}$ es nula, y por tanto $m_{ij}^{(r,l)} = 0$ para $1 \leq i, j \leq s, 1 \leq r, l \leq m$. \square

Referencias

- [1] L. Abia & J. M. Sanz-Serna, *Partitioned Runge-Kutta methods for separable Hamiltonian problems*, Math. Comput. (?).
- [2] V. I. Arnold, *Mathematical methods of classical mechanics*, Second ed., Springer-Verlag, New York, 1989.
- [3] J. C. Butcher, *Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes*, J. Austral. Math. Soc., **3**, 185 - 201.
- [4] J. C. Butcher, *The numerical analysis of ordinary differential equations*, John Wiley, Chichester, U.K., 1987.
- [5] M. P. Calvo & J. M. Sanz-Serna, *Order conditions for canonical Runge-Kutta-Nyström methods*, BIT 32 (1992), 131-142
- [6] M. P. Calvo, *Métodos Runge-Kutta-Nyström simplécticos*, Tesis Doctoral (1992), Universidad de Valladolid.
- [7] M. P. Calvo, J. M. Sanz-Serna: *Canonical B-series* (1993).
- [8] D. E. Knuth, *Fundamental algorithms*, Second ed., Addison-Wesley, Reading, MA, 1973.
- [9] R. I. McLachlan & P. Atela (1992), *The accuracy of symplectic integrators*, Non-linearity **5**, 541-562.
- [10] S. Miesbach and H. J. Pesch (1992), *Symplectic phase flow approximation for the numerical integration of canonical systems*, Numer. Math **61**, 501-521.

- [11] Hairer, E., Murua, A., Sanz-Serna, J. M.: *The non-existence of symplectic multi-derivative Runge-Kutta methods*. BIT 34 (1994), 80-87.
- [12] Hairer, E., Nørset, S.P., Wanner, G.: *Solving ordinary differential equations I*, Second Edition, Springer-Verlag.
- [13] Hairer, E., Wanner, G.: *Solving ordinary differential equations II*. Springer-Verlag (1991).
- [14] Hairer, E., Wanner, G.: *Multistep- multistage- multiderivative methods for ordinary differential equations*. Computing 11, 287-303 (1973)
- [15] Hairer, E., Wanner, G.: *On the Butcher group and general multi-value methods*. Computing 13, 1-15 (1974)
- [16] Hairer, E.: *A theory for Nystrom methods*. Numer. Math., 383-400 (1976)
- [17] Hairer, E.: *Order Conditions for Numerical Methods for Partitioned Ordinary Differential Equations*. Numer. Math. 36, 431-45 (1981)
- [18] Hairer, E.: *Backward Analysis of Numerical Integrators and symplectic Methods* SCADE 93 (1993).
- [19] K. H. Kastlunger & G. Wanner : *Runge Kutta Processes with Multiple Nodes* Computing 9, 9-24 (1972).
- [20] K. H. Kastlunger & G. Wanner : *On Turan Type Implicit Runge-Kutta Methods* Computing 9, 9-24 (1972).
- [21] F. Lasagni: *Canonical Runge-Kutta methods*, ZAMP 39, 952-953.
- [22] K. Feng, H. M. Wu, M. Z. Qin and D. L Wang (1989), *Construction of canonical difference schemes for Hamiltonian formalism via generating functions*, J. Comput. Math. 7, 71-96.
- [23] J. M. Sanz-Serna & L. Abia, *Order Conditions for Canonical Runge-Kutta Schemes*, SIAM J. Numer. Anal. 28 (1991) 1081-1096

- [24] J. M. Sanz-Serna, *Symplectic Integrators for Hamiltonian Problems: an Overview*, Acta Numerica 1 (1992) 243-286.
- [25] J. M. Sanz-Serna and M. P. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman and Hall, London ().
- [26] Y. B. Suris: *Canonical transformations generated by methods of Runge-Kutta type for the numerical integration of the system $x'' = -\partial U/\partial x$* , Zh. Vychisl. Mat. i Mat. Fiz. **29**, 202-221 (en-ruso) 1989.