



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Matemáticas

EL MÉTODO DE STÖRMER-VERLET. PROPIEDADES Y APLICACIONES

**Autor: Miguel del Río Cristóbal
Tutora: María Paz Calvo Cabrero
Año 2023**

Índice

1. Introducción	5
2. El método de Störmer-Verlet. Distintas formulaciones	7
2.1. Formulación de dos pasos	7
2.2. Formulación de un paso	8
2.3. Interpretación como un método de composición	12
2.4. Interpretación como un método de escisión	13
2.5. Interpretación como un integrador variacional	16
2.6. Generalización a sistemas diferenciales particionados	17
2.7. Ejemplo numérico: el problema de Kepler	19
3. Propiedades geométricas	23
3.1. Simetría y reversibilidad	23
3.2. Sistemas Hamiltonianos y simplecticidad	27
3.3. Conservación del volumen	37
3.4. Conservación de integrales primeras	39
4. Análisis regresivo de los errores	47

4.1. Construcción de la ecuación modificada	47
4.2. Ecuación modificada para el método de Störmer-Verlet	49
4.3. Propiedades de la ecuación diferencial modificada	50
4.4. Conservación de la energía	55
5. El método de Störmer-Verlet con paso variable	57
5.1. Método de Verlet adaptativo implícito	59
5.2. Método de Verlet adaptativo explícito	61
5.3. Experimentos numéricos	62
Referencias	69
A. Código de los métodos de la Sección 5	71
A.1. Método de Verlet de paso fijo (2.10)	71
A.2. Método de Verlet de paso fijo (2.11)	72
A.3. Método de Verlet adaptativo implícito	73
A.4. Método de Verlet adaptativo explícito	75

1. Introducción

En este trabajo se introduce y analiza el método de Störmer-Verlet [4], [5], un integrador numérico de ecuaciones diferenciales ordinarias ampliamente utilizado en diversas áreas de aplicación que van desde la Astronomía, donde es conocido como el método de Störmer, hasta la Dinámica Molecular, donde los especialistas se refieren a él como el método de Verlet.

En la Sección 2 se revisan distintas formulaciones del método, que permiten concluir que forma parte de diversas familias de integradores temporales que han ido apareciendo en la literatura.

En la Sección 3 se demuestran sus principales propiedades de conservación (reversibilidad, carácter simpléctico, conservación del volumen, ...), y se ilustran los resultados teóricos presentados mediante la integración numérica de algunos problemas concretos, para poner de manifiesto el interés de dichas propiedades de conservación.

La Sección 4 se dedica a la construcción de la ecuación modificada que satisfacen las soluciones numéricas calculadas con el método de Störmer-Verlet. Un análisis de las propiedades de conservación de la ecuación modificada permite concluir, mediante el análisis regresivo de los errores, el buen comportamiento a tiempos largos de las aproximaciones numéricas que proporciona dicho método.

Para finalizar el trabajo, en la Sección 5 se incluye el desarrollo de dos versiones de paso variable, una implícita y otra explícita, del método de Störmer-Verlet y se compara su comportamiento numérico frente a las implementaciones de paso fijo de dicho método, cuando se integra el problema de Kepler con distintas excentricidades.

En el Apéndice se incluyen los programas que se han implementado en Python para generar los resultados numéricos que se presentan en la Sección 5.

2. El método de Störmer-Verlet. Distintas formulaciones

Antes de revisar las distintas formulaciones del método de Störmer-Verlet, presentamos el tipo de ecuaciones que queremos resolver. Se trata de sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden con la siguiente forma

$$\ddot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{q}(t)), \quad t_0 \leq t \leq T, \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{q} : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$, $\mathbf{f} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ se suponen suficientemente regulares y el punto denota derivación respecto de t . Se suponen dadas condiciones iniciales

$$\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0 \in \mathbb{R}^d, \quad \dot{\mathbf{q}}(t_0) = \mathbf{v}_0 \in \mathbb{R}^d. \quad (2.2)$$

Nótese que la ecuación (2.1) representa las ecuaciones de Newton para sistemas mecánicos conservativos cuando la masa es 1, siendo la aceleración $\ddot{\mathbf{q}}$ y la fuerza $\mathbf{f}(\mathbf{q})$. Se observa que en (2.1), $\mathbf{f}(\mathbf{q})$ no depende de la velocidad $\dot{\mathbf{q}}$.

2.1. Formulación de dos pasos

Consideramos una longitud de paso h y una red uniforme de tiempos $t_n = t_0 + nh$, $0 \leq n \leq N$, siendo N un natural dado, y denotamos por \mathbf{q}_n la aproximación a $\mathbf{q}(t_n)$, solución exacta de (2.1) en tiempo t_n , para $0 \leq n \leq N$. En general $h = \frac{T-t_0}{N}$, con lo que $t_N = T$.

Si se impone la ecuación (2.1) en t_n , aproximando $\ddot{\mathbf{q}}(t_n)$ por diferencias centrales de segundo orden

$$\ddot{\mathbf{q}}(t_n) = \frac{\mathbf{q}(t_n + h) - 2\mathbf{q}(t_n) + \mathbf{q}(t_n - h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2),$$

y se reemplazan los valores de \mathbf{q} en $t_n - h$, t_n y $t_n + h$ por las correspondientes aproximaciones numéricas \mathbf{q}_{n-1} , \mathbf{q}_n y \mathbf{q}_{n+1} , tras multiplicar por h^2 , se obtiene la formulación de dos pasos del método de Störmer-Verlet

$$\mathbf{q}_{n+1} - 2\mathbf{q}_n + \mathbf{q}_{n-1} = h^2 \mathbf{f}(\mathbf{q}_n), \quad n = 1, 2, \dots, N - 1, \quad (2.3)$$

que permite determinar \mathbf{q}_{n+1} en función de los dos valores anteriores \mathbf{q}_n y \mathbf{q}_{n-1} . De las condiciones iniciales se conoce $\mathbf{q}(t_0)$, pero no $\mathbf{q}(t_1)$, por lo que para poder implementar (2.3) es preciso obtener una aproximación \mathbf{q}_1 a $\mathbf{q}(t_0 + h)$. Utilizando que $\mathbf{q}_0 = \mathbf{q}(t_0)$, $\mathbf{v}_0 = \dot{\mathbf{q}}(t_0)$ y $\ddot{\mathbf{q}}(t_0) = \mathbf{f}(\mathbf{q}_0)$, y teniendo en cuenta el desarrollo de Taylor de segundo orden de la solución exacta de (2.1)

$$\mathbf{q}(t_0 + h) = \mathbf{q}_0 + h\mathbf{v}_0 + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_0) + \mathcal{O}(h^3),$$

se puede tomar $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_0 + h\mathbf{v}_0 + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_0)$, como aproximación a $\mathbf{q}(t_1)$, para poder utilizar (2.3) con $n = 1$.

2.2. Formulación de un paso

Si introducimos la velocidad $\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{v}(t)$ como nueva variable independiente, podemos convertir (2.1) en un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden en el espacio de fases \mathbb{R}^{2d}

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{v}(t), \quad \dot{\mathbf{v}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{q}(t)), \quad t_0 \leq t \leq T, \quad (2.4)$$

donde $\mathbf{q}, \mathbf{v} : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$, $\mathbf{f} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, y se suponen conocidas condiciones iniciales $\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0 \in \mathbb{R}^d$, $\mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}_0 \in \mathbb{R}^d$.

Tomamos la misma red temporal que en la Sección 2.1 y, junto con las aproximaciones \mathbf{q}_n a $\mathbf{q}(t_n)$, introducimos para $0 \leq n \leq N$, aproximaciones \mathbf{v}_n a $\mathbf{v}(t_n)$, segunda componente de la solución exacta de (2.4) en el tiempo t_n , dadas por la aplicación de diferencias centrales para aproximar $\dot{\mathbf{q}}(t_n) = \mathbf{v}(t_n)$

$$\mathbf{v}_n = \frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_{n-1}}{2h}. \quad (2.5)$$

También, consideramos la red de tiempos intermedios $t_{n+\frac{1}{2}} = t_0 + (n + \frac{1}{2})h = t_n + \frac{h}{2}$, $0 \leq n \leq N - 1$, y denotamos por $\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}$ y $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$ las aproximaciones a $\mathbf{q}(t_{n+\frac{1}{2}})$ y $\mathbf{v}(t_{n+\frac{1}{2}})$, dadas, respectivamente, por

$$\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{q}_n + \mathbf{q}_{n+1}}{2}, \quad \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h}. \quad (2.6)$$

En el primer caso se hace un promedio de las aproximaciones a \mathbf{q} en los dos tiempos t_n y t_{n+1} , y en el segundo se aproxima de nuevo la derivada por diferencias centrales.

Si restamos $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$ menos \mathbf{v}_n , partiendo de las ecuaciones (2.5) y (2.6), operando y usando la expresión (2.3) obtenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{v}_n &= \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} \right) - \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_{n-1}}{2h} \right) \\ &= \frac{1}{2h} (2(\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n) - (\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_{n-1})) \\ &= \frac{1}{2h} (\mathbf{q}_{n+1} - 2\mathbf{q}_n + \mathbf{q}_{n-1}) \\ &= \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}_n). \end{aligned}$$

De esta manera obtenemos una expresión que permite determinar $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$ en función de \mathbf{v}_n y $\mathbf{f}(\mathbf{q}_n)$

$$\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_n + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}_n). \quad (2.7)$$

A partir de la segunda igualdad de (2.6), despejando \mathbf{q}_{n+1} en función de \mathbf{q}_n y $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$ se llega a

$$\mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{q}_n + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} \quad (2.8)$$

Por último, si en (2.5) reemplazamos n por $n+1$ para tener una expresión para \mathbf{v}_{n+1} , y restamos \mathbf{v}_{n+1} menos $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$, utilizando la segunda igualdad de

(2.6), tras operar y usando la expresión del método (2.3) para $n+1$ obtenemos

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_{n+1} - \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \left(\frac{\mathbf{q}_{n+2} - \mathbf{q}_n}{2h} \right) - \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} \right) \\
&= \frac{1}{2h} ((\mathbf{q}_{n+2} - \mathbf{q}_n) - 2(\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n)) \\
&= \frac{1}{2h} (\mathbf{q}_{n+2} - 2\mathbf{q}_{n+1} + \mathbf{q}_n) \\
&= \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}).
\end{aligned}$$

Podemos despejar entonces \mathbf{v}_{n+1} en función de $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$ y $\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1})$

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}). \quad (2.9)$$

Combinando las expresiones (2.7), (2.8) y (2.9) tenemos el método de un paso para el sistema diferencial (2.4)

$$\Phi_h^{(A)} : (\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_n) \rightarrow (\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}),$$

dado por

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}_n), \\
\mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \\
\mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}).
\end{aligned} \quad (2.10)$$

El valor de \mathbf{q}_1 proporcionado por (2.10) no es otro que el sugerido en la Sección 2.1, y para $n > 1$, los valores \mathbf{q}_n que se obtienen con (2.10) son los mismos que los obtenidos con (2.3).

Existe una versión dual de este método, obtenida de manera análoga a cómo se ha obtenido (2.10), que va generando aproximaciones a las dos componentes de la solución de (2.4) en los tiempos intermedios, y actualizando en cada paso en primer lugar las posiciones

$$\Phi_h^{(B)} : (\mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}) \rightarrow (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}).$$

Las expresiones para avanzar un paso de longitud h son

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_n &= \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} + h\mathbf{f}(\mathbf{q}_n), \\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}.\end{aligned}\tag{2.11}$$

Si se concatenan varios pasos de longitud h con el método (2.10), al calcular $\mathbf{v}_{n+\frac{3}{2}}$ se observa que

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+\frac{3}{2}} &= \mathbf{v}_{n+1} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}) \\ &= (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1})) + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}) \\ &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + h\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}),\end{aligned}$$

de modo que se puede reemplazar la última igualdad de (2.10) por $\mathbf{v}_{n+\frac{3}{2}} = \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + h\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1})$ y, por tanto, sólo es necesario actualizar las aproximaciones a \mathbf{q} en los tiempos enteros y las aproximaciones a \mathbf{v} en los tiempos intermedios. Aunque (2.10) parece sugerir que el método necesita dos evaluaciones de \mathbf{f} por cada paso, tras reemplazar la expresión que actualiza \mathbf{v}_{n+1} por la que calcula $\mathbf{v}_{n+\frac{3}{2}}$ vemos que una evaluación de \mathbf{f} por paso es suficiente.

De igual manera que para $\Phi_h^{(A)}$, tenemos que si se concatenan varios pasos con el método (2.11), al calcular \mathbf{q}_{n+1} se observa que

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} \\ &= (\mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} \\ &= \mathbf{q}_n + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}},\end{aligned}$$

de modo que se puede reemplazar la última igualdad de (2.11) por $\mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{q}_n + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$ y, por tanto, sólo es necesario actualizar las aproximaciones a \mathbf{q} en los tiempos enteros y las aproximaciones a \mathbf{v} en los tiempos intermedios. Lo que hemos podido comprobar es que, ambos sistemas (2.10) y (2.11), pueden simplificarse, dando lugar a un mismo método en el que los valores de \mathbf{q} se aproximan en la red de puntos natural y los valores de \mathbf{v} se aproximan

en la red de tiempos intermedios:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} + h\mathbf{f}(\mathbf{q}_n), \\ \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}.\end{aligned}\tag{2.12}$$

Esta formulación es la implementación más económica computacionalmente y es numéricamente más estable que la formulación como método de dos pasos (2.3).

2.3. Interpretación como un método de composición

Podemos ir más allá y separar la fórmula (2.10) en dos subpasos

$$\begin{aligned}(\mathbf{v}_n, \mathbf{q}_n) &\rightarrow (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}), \\ (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) &\rightarrow (\mathbf{v}_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}).\end{aligned}$$

El primero está dado por

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_n), \\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}},\end{aligned}\tag{2.13}$$

y el segundo por

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}).\end{aligned}\tag{2.14}$$

Esto permite escribir los métodos $\Phi_h^{(A)}$ y $\Phi_h^{(B)}$ como sendas composiciones

$$\begin{aligned}\Phi_h^{(A)} &= (2.14) \circ (2.13), \\ \Phi_h^{(B)} &= (2.13) \circ (2.14),\end{aligned}\tag{2.15}$$

donde \circ indica la concatenación de dos métodos básicos.

Definición 2.1. Dado un método Φ_h para la integración numérica de (2.4), el método adjunto Φ_h^* de Φ_h es la aplicación inversa del método original implementado con longitud de paso $-h$, esto es,

$$\Phi_h^* := \Phi_{-h}^{-1}. \quad (2.16)$$

En otras palabras, $\mathbf{q}_1 = \Phi_h^*(\mathbf{q}_0)$ está definida implícitamente por la relación $\Phi_{-h}(\mathbf{q}_1) = \mathbf{q}_0$.

Observamos que el adjunto del método (2.13) es, por tanto,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ \mathbf{q}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix} - \frac{h}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{q}) \\ \mathbf{v}^* \end{pmatrix}}_{\Phi_{-h}} \rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ \mathbf{q}^* \end{pmatrix} + \frac{h}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{q}) \\ \mathbf{v}^* \end{pmatrix}}_{\Phi_h^* = \Phi_{-h}^{-1}} \quad (2.17)$$

donde hay que realizar en primer lugar la actualización de la variable \mathbf{q} para que el método sea explícito. Vemos que el método (2.14) es la aplicación de (2.17) cuando se parte de $(\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})$ y concluimos que $\Phi_h^{(A)}$, dado por (2.10), es un método de composición que resulta de aplicar sucesivamente el método (2.13) seguido de su adjunto (el método (2.14)).

Si nos fijamos ahora en $\Phi_h^{(B)}$, dado por (2.11), podemos hacer un análisis parecido, donde los subpasos son ahora

$$(\mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}) \rightarrow (\mathbf{v}_n, \mathbf{q}_n) \rightarrow (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}).$$

El primer método que se aplica es (2.14) (reemplazando n por $n-1$), seguido de su adjunto, que no es otro que (2.13).

2.4. Interpretación como un método de escisión

Consideramos ahora el campo vectorial $(\mathbf{v}, \mathbf{f}(\mathbf{q}))$ de (2.4) escrito como la suma de los dos campos vectoriales $(\mathbf{v}, \mathbf{0})$ y $(\mathbf{0}, \mathbf{f}(\mathbf{q}))$. Los sistemas diferen-

ciales asociados a estos dos campos vectoriales son:

$$[1] : \begin{cases} \dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{v}(t), \\ \dot{\mathbf{v}}(t) = \mathbf{0}, \end{cases} \quad \text{y} \quad [2] : \begin{cases} \dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{0}, \\ \dot{\mathbf{v}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{q}(t)). \end{cases} \quad (2.18)$$

Los flujos exactos $\varphi_t^{[1]}$ y $\varphi_t^{[2]}$ de estos dos sistemas diferenciales son sencillos de calcular, pues ambos sistemas tienen derivada constante en el tiempo. En concreto, partiendo de condiciones iniciales $\mathbf{q}_0, \mathbf{v}_0$ se tiene

$$\varphi_t^{[1]} : \begin{cases} \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_0 + t \cdot \mathbf{v}_0, \\ \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_0, \end{cases} \quad \text{y} \quad \varphi_t^{[2]} : \begin{cases} \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_0, \\ \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_0 + t \cdot \mathbf{f}(\mathbf{q}_0). \end{cases} \quad (2.19)$$

Utilizando estas fórmulas se pueden reescribir los métodos (2.13) y (2.14) como la composición de dos flujos exactos

$$(2.13) = \varphi_{h/2}^{[1]} \circ \varphi_{h/2}^{[2]}, \quad (2.20)$$

$$(2.14) = \varphi_{h/2}^{[2]} \circ \varphi_{h/2}^{[1]}$$

y, en consecuencia, utilizando (2.20) y (2.15), las dos versiones del método de Störmer-Verlet se pueden formular como una composición de flujos exactos

$$\begin{aligned} \Phi_h^{(A)} &= \varphi_{h/2}^{[2]} \circ \varphi_h^{[1]} \circ \varphi_{h/2}^{[2]}, \\ \Phi_h^{(B)} &= \varphi_{h/2}^{[1]} \circ \varphi_h^{[2]} \circ \varphi_{h/2}^{[1]}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

A los métodos contruidos como composición de flujos exactos de los sistemas (2.18) se les conoce con el nombre de *métodos de escisión*, pues se basan en la idea de descomponer el campo vectorial original en la suma de varios campos diferenciales sencillos para los que se conoce su flujo exacto. Las composiciones simétricas que aparecen en (2.21), en las que uno de los flujos aparece en primer y tercer lugar avanzando la solución un paso de longitud $h/2$, mientras que el otro flujo aparece en el medio avanzando la solución un paso de longitud h , se conocen como métodos de escisión de Strang (ver [9], [7]).

Con el fin de ilustrar la interpretación del método de Störmer-Verlet como un método de escisión escogemos la siguiente ecuación diferencial de segundo

orden en una dimensión

$$\ddot{q}(t) = f(q(t)), \text{ con } f(q(t)) = -\sin(q(t)) \quad (2.22)$$

y condiciones iniciales en $t = 0$, $(q_0, v_0) = (-1.9, 0.4)$. En la Figura 1 podemos ver la interpretación gráfica de (2.21), en la que se pueden observar las composiciones de tres flujos para ambas versiones del método. En color negro se ha representado la solución exacta en $[0, 1.5]$, en color rojo están los flujos que componen $\Phi_h^{(A)}$, y en color azul aparecen los flujos que dan lugar a $\Phi_h^{(B)}$.

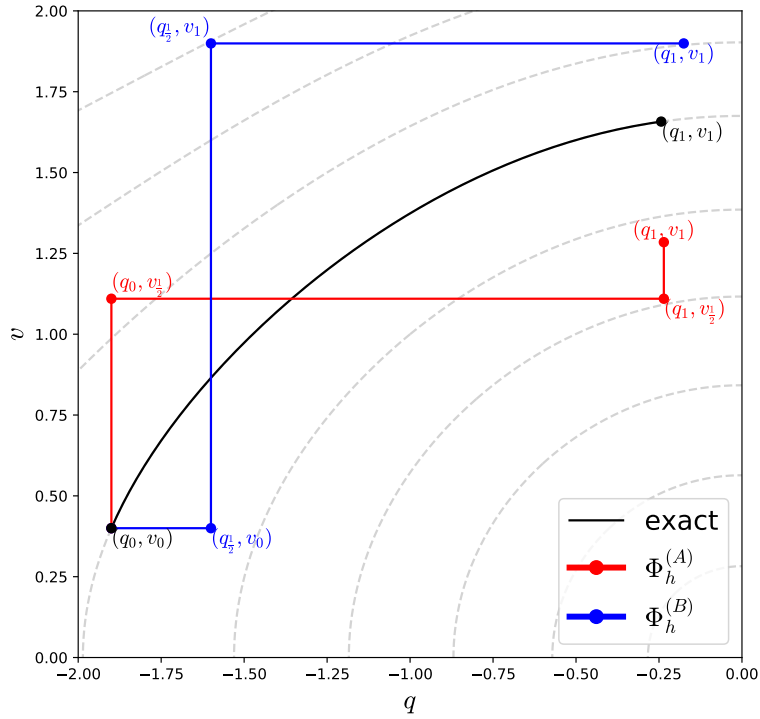


Figura 1: Ilustración de (2.21).

2.5. Interpretación como un integrador variacional

Otra forma de obtener el método de Störmer-Verlet consiste en discretizar el principio de Hamilton. El principio de Hamilton establece que el movimiento de un sistema mecánico entre dos posiciones cualesquiera $\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$ y $\mathbf{q}(t_N) = \mathbf{q}_N$ es tal que se minimiza la integral de acción

$$\int_{t_0}^{t_N} L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) dt, \quad (2.23)$$

donde $L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))$ es el Lagrangiano del sistema. Típicamente, la función Lagrangiana L es la diferencia entre la energía cinética y la energía potencial del sistema, es decir,

$$L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}(t)^T M \dot{\mathbf{q}}(t) - U(\mathbf{q}(t)), \quad (2.24)$$

donde M es una matriz de masas que debe ser simétrica y definida positiva. Cuando M no depende de q se tiene que

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = M \dot{\mathbf{q}}, \quad \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} = -\nabla U(\mathbf{q}) \quad (2.25)$$

y las ecuaciones de Euler-Lagrange del correspondiente problema variacional,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}, \quad (2.26)$$

se reducen al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden

$$M \ddot{\mathbf{q}}(t) = -\nabla U(\mathbf{q}(t)). \quad (2.27)$$

Notamos que (2.1) es un caso particular de (2.27) con matriz de masa igual a la identidad y $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -\nabla U(\mathbf{q})$. Aproximamos ahora $\mathbf{q}(t)$ por una función lineal a trozos, que interpola el integrando de (2.23) en la red de puntos (t_n, \mathbf{q}_n) para $n = 0, 1, \dots, N$ y la integral de acción por la regla de los trapecios y pedimos que los valores \mathbf{q}_n se obtengan minimizando la integral de acción aproximada. Es decir, en vez de minimizar (2.23), se minimiza

$$\sum_{n=0}^{N-1} S_h(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}), \quad (2.28)$$

donde

$$S_h(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) = \frac{h}{2}L\left(\mathbf{q}_n, \frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h}\right) + \frac{h}{2}L\left(\mathbf{q}_{n+1}, \frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h}\right). \quad (2.29)$$

Si para hallar el mínimo de (2.29) se pide que el gradiente con respecto de \mathbf{q}_n sea cero, se obtienen las ecuaciones discretas de Euler-Lagrange

$$\nabla_{\mathbf{Q}}S_h(\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_n) + \nabla_{\mathbf{q}}S_h(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) = 0, \quad (2.30)$$

para $n = 1, 2, \dots, N - 1$, donde $\nabla_{\mathbf{q}}$ denota el gradiente respecto de las d primeras variables independientes de $S_h(\mathbf{q}, \mathbf{Q})$ y $\nabla_{\mathbf{Q}}$ denota el gradiente respecto de las d últimas variables independientes de $S_h(\mathbf{q}, \mathbf{Q})$. En el caso de que la función Lagrangiana L venga dada por (2.24) las ecuaciones (2.30) se reducen a

$$M(\mathbf{q}_{n+1} - 2\mathbf{q}_n + \mathbf{q}_{n-1}) + h^2\nabla U(\mathbf{q}_n) = 0, \quad (2.31)$$

que es justo el método de Störmer-Verlet en su formulación de dos pasos (2.3), con $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -M^{-1}\nabla U(\mathbf{q})$.

2.6. Generalización a sistemas diferenciales particionados

En lugar del sistema diferencial de primer orden (2.4) podemos considerar sistemas diferenciales más generales

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t)), \quad \dot{\mathbf{v}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{q}(t), \mathbf{v}(t)), \quad t_0 \leq t \leq T, \quad (2.32)$$

donde $\mathbf{q}, \mathbf{v} : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$ y $\mathbf{f}, \mathbf{g} : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^d$. Se suponen de nuevo condiciones iniciales $\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0 \in \mathbb{R}^d$, $\mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}_0 \in \mathbb{R}^d$.

Con la misma red de puntos que la definida en la Sección 2.2, se pueden extender las fórmulas (2.13) y (2.14) para integrar el sistema diferencial (2.32)

del siguiente modo:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}),\end{aligned}\tag{2.33}$$

y

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}).\end{aligned}\tag{2.34}$$

En cada uno de estos dos algoritmos evaluamos las dos componentes de la derivada en el mismo punto, en el primer caso en $(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}})$ y en el segundo en $(\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}})$. El método de Störmer-Verlet se obtiene ahora mediante la composición simétrica de (2.33) y (2.34), como hemos hecho en la Sección 2.3

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\left(\mathbf{g}(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) + \mathbf{g}(\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}})\right), \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}).\end{aligned}\tag{2.35}$$

Para la versión dual, que avanza primero la variable \mathbf{q} y después la \mathbf{v} , se tienen las expresiones

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_n &= \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}) + \mathbf{f}(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}})\right), \\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}).\end{aligned}\tag{2.36}$$

La primera ecuación de (2.35) es implícita en $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$, la segunda es implícita en \mathbf{q}_{n+1} y, sólo la tercera es explícita. Por su parte, en (2.36) la primera ecuación es implícita en \mathbf{q}_n , la segunda lo es en $\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$, y la tercera es explícita. Es el precio que hay que pagar para poder integrar problemas más generales (2.32) en los que \mathbf{f} y \mathbf{g} dependen tanto de \mathbf{q} como de \mathbf{v} .

2.7. Ejemplo numérico: el problema de Kepler

Para ilustrar algunas de las propiedades del método de Störmer-Verlet escogemos el problema de Kepler como ejemplo de sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden del tipo (2.1) con dimensión $d = 2$, es decir, de la siguiente forma

$$\mathbf{q}(t) = \begin{pmatrix} q_1(t) \\ q_2(t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{q}(t)) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{q}(t)) \\ f_2(\mathbf{q}(t)) \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

en el que la definición de $\mathbf{f}(\mathbf{q}(t))$ es la siguiente:

$$f_i(\mathbf{q}(t)) = -\frac{q_i(t)}{(q_1(t)^2 + q_2(t)^2)^{3/2}}, \quad i = 1, 2. \quad (2.38)$$

Fijamos condiciones iniciales en $t_0 = 0$

$$\mathbf{q}(t_0) = \begin{pmatrix} 1 - e \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dot{\mathbf{q}}(t_0) = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{\frac{1+e}{1-e}} \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

donde $e = 0.6$. La solución de (2.37)-(2.38) con condiciones iniciales (2.39) es periódica con periodo 2π y eso va a permitir medir fácilmente errores en la solución numérica si el tiempo de integración es múltiplo entero del periodo.

Antes de medir errores, hemos realizado cuatro ejecuciones para mostrar en el plano de fases (q_1, q_2) las soluciones que genera el método de Störmer-Verlet. Concretamente, siguiendo [5], se han utilizado longitudes de paso $h = 0.1$ y $h = 0.05$, avanzando 58 y 300 pasos en el primer caso, y 116 y 600 pasos en el segundo. De este modo los tiempos finales de integración han sido $T = 5.8$ y $T = 30$, respectivamente.

También realizamos el mismo experimento utilizando para la integración del sistema de primer orden asociado a (2.4) el conocido como método de Runge de orden 2, que en este caso particular está dado por las siguientes

ecuaciones

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(\mathbf{q}_n), \\
 \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}\left(\mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_n\right), \\
 \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + h\left(\mathbf{v}_n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1\right), \\
 \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + h\mathbf{k}_2.
 \end{aligned}
 \tag{2.40}$$

En la Figura 2 se muestran los resultados para $T = 5.8$ (izquierda) y para

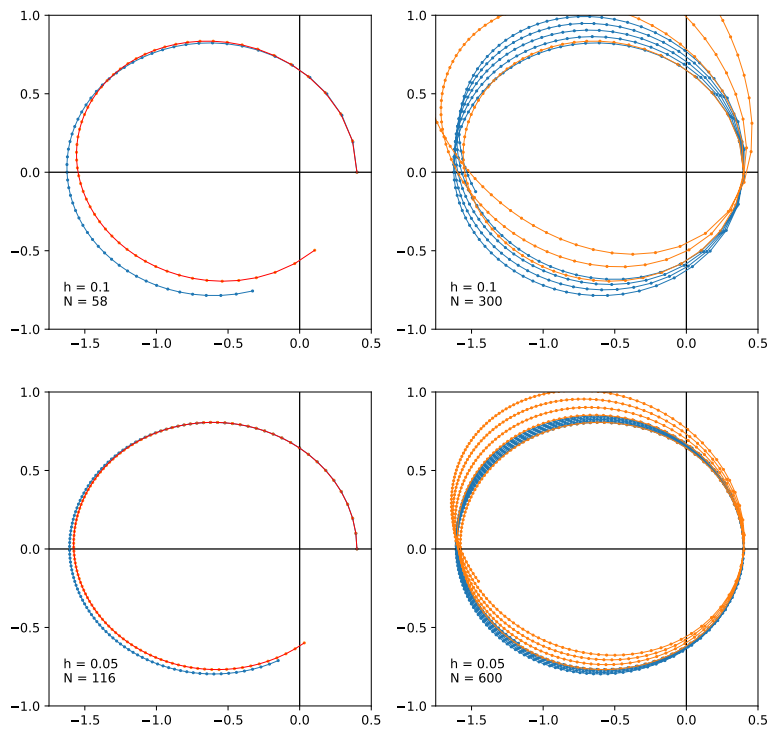


Figura 2: Integración del problema de Kepler con el método de Störmer-Verlet en azul y con el método de Runge de orden 2 en rojo

$T = 30$ (derecha). Se observa que en las gráficas de la izquierda no se ha completado el primer periodo ($5.8 < 2\pi$), mientras que en las gráficas de la derecha se han completado casi 5 vueltas ($8\pi < 30 < 10\pi$). Sin embargo,

aunque la solución exacta es periódica, las soluciones numéricas calculadas no lo son, y se van alejando de la órbita exacta a medida que se incrementa el tiempo de integración. Dicho alejamiento es claramente mayor para las soluciones generadas con el método de Runge (líneas rojas) que para las obtenidas con la misma longitud de paso con el método de Verlet (líneas azules).

Por otro lado, comparando cada gráfica de la parte superior con la correspondiente gráfica de la parte inferior se observa que al reducir la longitud de paso h de 0.1 a 0.05 se obtienen resultados más precisos pero aumenta el número de evaluaciones de la función f realizadas.

3. Propiedades geométricas

En esta sección veremos que el método de Störmer-Verler preserva las propiedades geométricas del flujo exacto de ciertas familias de ecuaciones diferenciales. Estas propiedades son reversibilidad, symplecticidad y conservación del volumen.

3.1. Simetría y reversibilidad

Definición 3.1. Sea ρ una transformación lineal invertible en el espacio de fase de un sistema diferencial $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y})$. El sistema diferencial y el campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{y})$ se denominan ρ -reversibles si

$$\rho \mathbf{F}(\mathbf{y}) = -\mathbf{F}(\rho \mathbf{y}), \text{ para todo } \mathbf{y}. \quad (3.1)$$

También escribiremos $\rho \circ \mathbf{F} = -\mathbf{F} \circ \rho$.

Teorema 3.1. El flujo exacto $\varphi_t(\mathbf{y})$ de un sistema diferencial ρ -reversible satisface

$$\rho \circ \varphi_t = \varphi_{-t} \circ \rho = \varphi_t^{-1} \circ \rho. \quad (3.2)$$

Demostración. La identidad de la derecha es consecuencia de la propiedad de grupo del flujo exacto, $\varphi_t \circ \varphi_s = \varphi_{t+s}$, que implica $\varphi_t \circ \varphi_{-t} = I$ y, por tanto, que $\varphi_{-t} = \varphi_t^{-1}$. La identidad de la izquierda se obtiene derivando en los dos primeros términos de (3.2) y usando (3.1)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\rho \circ \varphi_t)(\mathbf{y}) &= \rho \mathbf{F}(\varphi_t(\mathbf{y})) = -\mathbf{F}((\rho \circ \varphi_t)(\mathbf{y})), \\ \frac{d}{dt}(\varphi_{-t} \circ \rho)(\mathbf{y}) &= -\mathbf{F}((\varphi_{-t} \circ \rho)(\mathbf{y})), \end{aligned} \quad (3.3)$$

de donde se deduce que las dos expresiones $\rho \circ \varphi_t$ y $\varphi_{-t} \circ \rho$ son solución de la misma ecuación diferencial. Como ambos tienen la misma condición inicial, $(\rho \circ \varphi_0)(\mathbf{y}) = (\varphi_0 \circ \rho)(\mathbf{y}) = \rho \mathbf{y}$, se concluye la igualdad buscada. \square

Como primer ejemplo de sistema diferencial ρ -reversible podemos considerar el sistema (2.4), que tiene la propiedad de que invertir la dirección de la velocidad inicial no altera la trayectoria de la solución, sino que únicamente invierte el sentido de la misma. El flujo φ_t de (2.4) satisface que

$$\varphi_t(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{v}}) \text{ implica } \varphi_t(\hat{\mathbf{q}}, -\hat{\mathbf{v}}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v}), \quad (3.4)$$

es decir, es reversible respecto de la reflexión $\rho : (\mathbf{q}, \mathbf{v}) \rightarrow (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$.

Definición 3.2. *Un método numérico de un paso Φ_h se denomina ρ -reversible si*

$$\rho \circ \Phi_h = \Phi_h^{-1} \circ \rho. \quad (3.5)$$

Definición 3.3. *Un método numérico de un paso Φ_h se denomina simétrico o reversible respecto al tiempo, si satisface que*

$$\Phi_h \circ \Phi_{-h} = I, \text{ o equivalentemente } \Phi_h = \Phi_{-h}^{-1}, \quad (3.6)$$

donde I es el operador identidad.

Teniendo en cuenta la Definición 2.1 que establece que $\Phi_{-h}^{-1} = \Phi_h^*$ y la condición (3.6), podemos concluir que un método Φ_h es simétrico si coincide con su adjunto ($\Phi_h = \Phi_h^*$).

Teorema 3.2. *El método de Störmer-Verlet aplicado a ecuaciones diferenciales de segundo orden de la forma (2.1) es simétrico y reversible, es decir, su formulación de un paso cumple (3.5) y (3.6) para $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$.*

Demostración. Para ver que el método de Störmer-Verlet es simétrico consideramos su formulación de un paso (2.10). Reemplazando h por $-h$ y cambiando n por $n + 1$ (es decir, reflejando el tiempo respecto al tiempo

central $t_{n+\frac{1}{2}}$) se obtiene

$$\begin{aligned}
[\Phi_{-h}^{(A)}]^{-1} &: (\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}) \rightarrow (\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_n), \\
\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n+1} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}), \\
\mathbf{q}_n &= \mathbf{q}_{n+1} + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \\
\mathbf{v}_n &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_n),
\end{aligned} \tag{3.7}$$

que da, de nuevo, el mismo método. De manera equivalente, si reemplazamos h por $-h$ y $n - \frac{1}{2}$ por $n + \frac{1}{2}$ obtenemos

$$\begin{aligned}
[\Phi_{-h}^{(B)}]^{-1} &: (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) \rightarrow (\mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}). \\
\mathbf{q}_n &= \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}, \\
\mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + h\mathbf{f}(\mathbf{q}_n), \\
\mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n-\frac{1}{2}},
\end{aligned} \tag{3.8}$$

que deja invariante el método (2.11). Alternativamente, se puede demostrar que el método de Störmer-Verlet es simétrico teniendo en cuenta que coincide con su adjunto al ser la concatenación de un método y de su adjunto, y utilizando que el adjunto del adjunto es el método original.

La relación (3.6) no se cumple, por ejemplo, para el método simpléctico de Euler, donde la reflexión respecto del tiempo transforma el método (2.33) en el método (2.34) y viceversa.

Veamos a continuación que la simetría respecto al tiempo del método de Störmer-Verlet implica también que el método es ρ -reversible para $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$.

Para ello tenemos que ver que el método de Störmer-Verlet de un paso satisface

$$\Phi_h(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{v}}) \text{ implica } \Phi_h(\hat{\mathbf{q}}, -\hat{\mathbf{v}}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v}), \tag{3.9}$$

para todos \mathbf{q} , \mathbf{v} y todo h , relación análoga a (3.4), satisfecha por el flujo exacto. Es claro que de la formulación (2.10) del método se deduce

$$\Phi_h(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{v}}) \text{ implica } \Phi_{-h}(\mathbf{q}, -\mathbf{v}) = (\hat{\mathbf{q}}, -\hat{\mathbf{v}}), \quad (3.10)$$

o, alternativamente, $(\mathbf{q}, -\mathbf{v}) = \Phi_{-h}^{-1}(\hat{\mathbf{q}}, -\hat{\mathbf{v}})$. La simetría (3.6) del método de Störmer-Verlet es, por lo tanto, equivalente a la reversibilidad (3.9). \square En algunas situaciones, el flujo es ρ -reversible con respecto a involuciones ρ

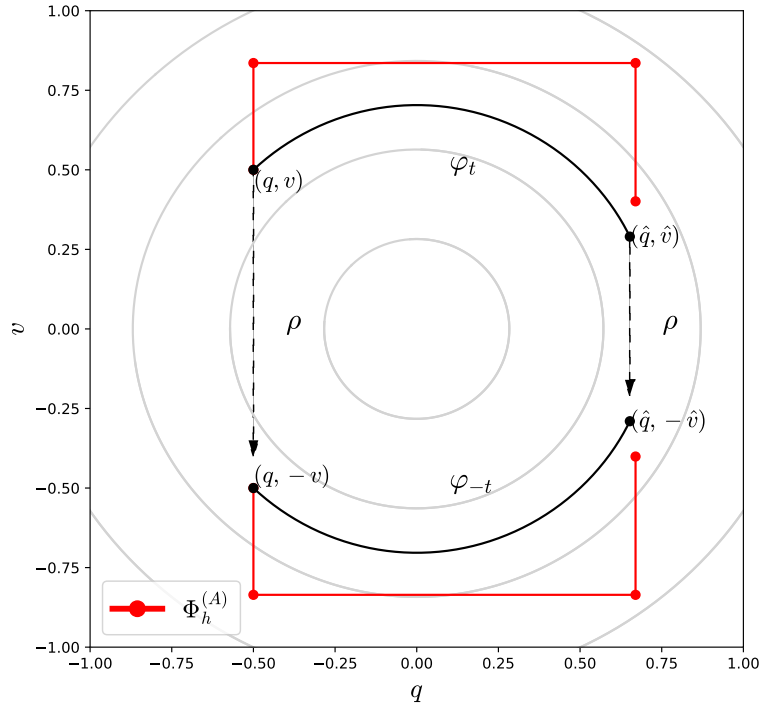


Figura 3: Ilustración de los Teoremas 3.1 y 3.2.

distintas de la estudiada hasta ahora $(\mathbf{q}, \mathbf{v}) \rightarrow (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$. Por ejemplo, el flujo del problema de Kepler (2.37)-(2.38) es también ρ -reversible respecto a la involución

$$\rho : (q_1, q_2, v_1, v_2) \rightarrow (q_1, -q_2, -v_1, v_2). \quad (3.11)$$

Con el mismo argumento utilizado en la demostración del Teorema 3.2 se prueba que el método de Störmer-Verlet es también ρ -reversible para ρ de la forma $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\rho_1(\mathbf{q}), \rho_2(\mathbf{v}))$, con ρ_1, ρ_2 transformaciones lineales invertibles.

Otro ejemplo de ρ -reversibilidad la proporciona el sistema particionado

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{v}), \quad \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}, \mathbf{v}), \quad (3.12)$$

donde $\mathbf{g}(\mathbf{q}, -\mathbf{v}) = -\mathbf{g}(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ y $\mathbf{f}(\mathbf{q}, -\mathbf{v}) = \mathbf{f}(\mathbf{q}, \mathbf{v})$, considerando la transformación ρ dada por $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$.

3.2. Sistemas Hamiltonianos y simplecticidad

Consideramos ahora sistemas diferenciales de tipo Hamiltoniano

$$\dot{\mathbf{p}} = -\nabla_{\mathbf{q}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad \dot{\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{p}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (3.13)$$

donde $H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ es una función escalar suficientemente regular de las variables (\mathbf{p}, \mathbf{q}) , y $\nabla_{\mathbf{q}}$ y $\nabla_{\mathbf{p}}$ denotan los gradientes respecto de las variables \mathbf{q} y \mathbf{p} , respectivamente. El entero d es el número de grados de libertad del sistema. Cuando la función Hamiltoniana es de la forma

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^T M^{-1}\mathbf{p} + U(\mathbf{q}), \quad (3.14)$$

con M una matriz de masas constante definida positiva y $U(\mathbf{q})$ un potencial, entonces el sistema (3.13) se convierte en un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden del tipo (2.4) en el que expresamos el momento $\mathbf{p} = M\mathbf{v}$ en términos de la velocidad y establecemos $f(\mathbf{q}) = -M^{-1}\nabla U(\mathbf{q})$. La igualdad (3.14) expresa la energía total H como la suma de la energía cinética y de la energía potencial del sistema.

Definición 3.4. Sea $A : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ una aplicación lineal (o una matriz $2d \times 2d$). Se dice que A es simpléctica si

$$A^T J A = J, \text{ con } J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

donde I denota la matriz identidad de tamaño $d \times d$.

La relación (3.15) es formalmente similar a la ortogonalidad (que se obtendría reemplazando J por la matriz identidad), pero no está relacionada con la conservación de distancias sino con la conservación de áreas. En el caso

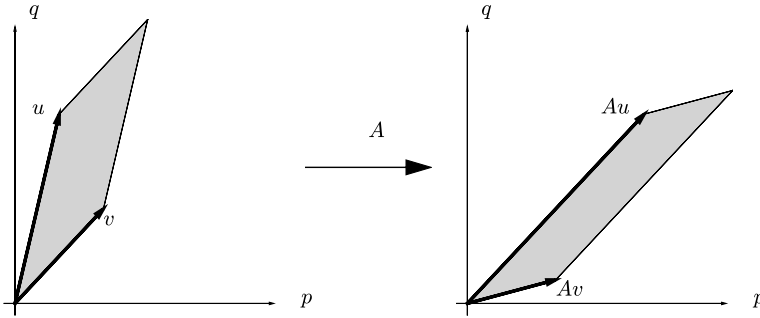


Figura 4: Simplecticidad de una aplicación lineal en \mathbb{R}^2 .

$d = 1$, si $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$, $\mathbf{u}^T J \mathbf{v}$ representa el área del paralelogramo de lados \mathbf{u} y \mathbf{v} , y el hecho de que la aplicación lineal A sea simpléctica implica que dicha transformación conserva el área, pues el área del paralelogramo de lados $A\mathbf{u}$ y $A\mathbf{v}$ es igual a

$$(A\mathbf{u})^T J (A\mathbf{v}) = \mathbf{u}^T A^T J A \mathbf{v} = \mathbf{u}^T J \mathbf{v}. \quad (3.16)$$

En la Figura 4 podemos ver un ejemplo que ilustra este hecho para la siguiente aplicación lineal A y vectores \mathbf{u} y \mathbf{v} siguientes

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 1.25 \end{pmatrix}, \mathbf{u} = [1, 4]^T, \mathbf{v} = [2, 2]^T. \quad (3.17)$$

Tras introducir la matriz J , el sistema Hamiltoniano (3.13) se puede escribir de forma más compacta como

$$\mathbf{y} = J^{-1}\nabla H(\mathbf{y}), \quad (3.18)$$

siendo $\mathbf{y} = [\mathbf{p}^T, \mathbf{q}^T]^T$ y $\nabla = [\nabla_{\mathbf{p}}^T, \nabla_{\mathbf{q}}^T]^T$.

Definición 3.5. Sea $\mathbf{g} : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ una aplicación diferenciable. Se dice que \mathbf{g} es una transformación simpléctica si la matriz jacobiana $\mathbf{g}' = \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial(\mathbf{p}, \mathbf{q})}$ es una matriz simpléctica para todo (\mathbf{p}, \mathbf{q}) , es decir, si

$$\mathbf{g}'(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \mathbf{g}'(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J. \quad (3.19)$$

Teorema 3.3. Sea $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ una función dos veces diferenciable. Entonces el flujo φ_t del sistema Hamiltoniano (3.13) es una transformación simpléctica, es decir, $\varphi'_t(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ satisface (3.19).

Demostración. Es conocido que $\varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = \frac{\partial \varphi_t}{\partial(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)}$ (la derivada del flujo respecto de la condición inicial) es solución de la ecuación variacional asociada a (3.18), es decir, que

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \varphi_t}{\partial(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)} = J^{-1} \nabla^2 H(\varphi_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)) \frac{\partial \varphi_t}{\partial(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)}, \quad (3.20)$$

donde $\nabla^2 H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ denota la matriz Hessiana de $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ (que es simétrica). Queremos probar que

$$\varphi'_t(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \varphi'_t(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J, \quad (3.21)$$

y sabemos que en $t = 0$ esta igualdad se satisface pues φ_0 es el operador identidad. Veamos entonces que la derivada respecto de t del lado izquierdo de (3.21) es nula para todo t :

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} (\varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)^T J \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)) \\ &= \left(\frac{d}{dt} \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \right)^T J \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) + \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)^T J \left(\frac{d}{dt} \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \right) \\ &= \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)^T \nabla^2 H(\varphi_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)) J^{-T} J \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \\ & \quad + \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)^T \nabla^2 H(\varphi_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)) \varphi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = 0, \end{aligned} \quad (3.22)$$

ya que $J^T = -J$ y por tanto $J^{-T}J = -I$.

Como se ha mencionado antes, para $d = 1$ el hecho de que φ_t sea simpléctico significa que el flujo conserva el área de un conjunto acotado de valores iniciales en el plano (\mathbf{p}, \mathbf{q}) . Para sistemas con dimensiones mayores, la simplécticidad (3.21) significa que preserva la suma de las áreas orientadas de las proyecciones de $\varphi_t(D)$ en cada plano de coordenadas (p_i, q_i) , $1 \leq i \leq d$, para cualquier conjunto bidimensional acotado de condiciones iniciales D .

Definición 3.6. *Un método numérico de un paso Φ_h se denomina simpléctico si, cuando se utiliza para integrar sistemas Hamiltonianos (3.13), el Jacobiano del flujo numérico*

$$\Phi_h : (\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) \rightarrow (\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) \quad (3.23)$$

satisface la condición (3.19), esto es, si

$$\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J, \quad (3.24)$$

para todo (\mathbf{p}, \mathbf{q}) y todo h .

El método de Störmer-Verlet (2.35) aplicado a un sistema Hamiltoniano (3.13) se escribe

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{p}_n - \frac{h}{2} \nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n), \\ \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2} \left(\nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) + \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) \right), \\ \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} \nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}), \end{aligned} \quad (3.25)$$

y para (2.36) la formulación es similar

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_n &= \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{p}_{n-\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n), \\ \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{p}_{n-\frac{1}{2}} - \frac{h}{2} \left(\nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{p}_{n-\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) + \nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) \right), \\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2} \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n). \end{aligned} \quad (3.26)$$

En el caso particular del Hamiltoniano (3.14), el método de Störmer-Verlet se reduce a aplicar (2.10) con

$$\mathbf{f}(\mathbf{q}) = -M^{-1}\nabla U(\mathbf{q}), \text{ estableciendo } \mathbf{p}_n = M\mathbf{v}_n. \quad (3.27)$$

Teorema 3.4. *El método de Störmer-Verlet aplicado a sistemas Hamiltonianos (3.13) es simpléctico.*

Siguiendo [5] presentamos cuatro pruebas diferentes de este resultado. Todas ellas corresponden a diferentes interpretaciones del método: como método de composición, como método de escisión, como integrador variacional y usando funciones generatrices. Cada una de estas interpretaciones se presta a generalizaciones a otros integradores simplécticos, de orden mayor y/o para sistemas Hamiltonianos con restricciones. La segunda prueba solo es válida para sistemas Hamiltonianos de la forma (3.14) y la tercera demostración, aunque es válida para sistemas Hamiltonianos más generales, la presentamos, por simplicidad, para Hamiltonianos separables.

Demostración 1. La primera prueba usa la interpretación del método de Störmer-Verlet como la composición del método simpléctico de Euler

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{p}_n - \frac{h}{2}\nabla_q H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n), \\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\nabla_p H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n), \end{aligned} \quad (3.28)$$

y de su adjunto

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\nabla_p H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}), \\ \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2}\nabla_q H(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Simplemente es necesario comprobar que cada uno de los dos métodos que intervienen en la composición es simpléctico. Probemos en primer lugar que (3.28) satisface la condición de simplecticidad

$$\left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})}{\partial(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n)} \right)^T J \left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})}{\partial(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n)} \right) = J. \quad (3.30)$$

Si en (3.28) diferenciamos respecto de \mathbf{p}_n y \mathbf{q}_n tenemos

$$\begin{pmatrix} I + hH_{\mathbf{qp}}^T & 0 \\ -hH_{\mathbf{pp}} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) \\ \partial(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & -hH_{\mathbf{qq}} \\ 0 & I + hH_{\mathbf{qp}} \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

es decir, la matriz jacobiana verifica

$$\begin{pmatrix} I + hH_{\mathbf{qp}}^T & 0 \\ -hH_{\mathbf{pp}} & I \end{pmatrix} \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} I & -hH_{\mathbf{qq}} \\ 0 & I + hH_{\mathbf{qp}} \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

donde todas las submatrices del Hessiano se evalúan en $(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n)$. Denotamos

$$\begin{cases} A = I + hH_{\mathbf{qp}}^T & \rightarrow A^T = I + hH_{\mathbf{pq}}, \\ B = hH_{\mathbf{pp}} & \rightarrow B^T = hH_{\mathbf{pp}}^T = B, \\ C = hH_{\mathbf{qq}} & \rightarrow C^T = hH_{\mathbf{qq}}^T = C. \end{cases} \quad (3.33)$$

Entonces tenemos

$$\begin{aligned} \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \begin{pmatrix} A & 0 \\ -B & I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I & -C \\ 0 & A^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ BA^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -C \\ 0 & A^T \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A^{-1} & -A^{-1}C \\ BA^{-1} & -BA^{-1}C + A^T \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T &= \begin{pmatrix} A^{-T} & A^{-T}B^T \\ -C^T A^{-T} & -C^T A^{-T}B^T + A \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A^{-T} & A^{-T}B \\ -CA^{-T} & -CA^{-T}B + A \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \\
&= \begin{pmatrix} A^{-T} A^{-T} B & \\ -CA^{-T} & -CA^{-T} B + A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{-1} & -A^{-1} C \\ BA^{-1} & -BA^{-1} C + A^T \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} A^{-T} & A^{-T} B \\ -CA^{-T} & -CA^{-T} B + A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} BA^{-1} & -BA^{-1} C + A^T \\ -A^{-1} & A^{-1} C \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \theta \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{cases} \alpha = \cancel{A^{-T} B A^{-1}} - \cancel{A^{-T} B A^{-1}} = 0, \\ \beta = \cancel{A^{-T} B A^{-1} C} + A^{-T} A^T - \cancel{A^{-T} B A^{-1} C} = I, \\ \gamma = \cancel{-CA^{-T} B A^{-1}} + \cancel{CA^{-T} B A^{-1}} - A A^{-1} = -I, \\ \theta = \cancel{CA^{-T} B A^{-1}} - \cancel{CA^{-T} A^T} - \cancel{CA^{-T} B A^{-1}} + \cancel{CA^{-T} A^T} = 0. \end{cases} \quad (3.35)$$

Es decir,

$$\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} = J. \quad (3.36)$$

De manera análoga se comprueba que (3.29) también es simpléctico. Por ser composición de dos métodos simplécticos tenemos que (3.25) es también simpléctico. \square

Demostración 2. La segunda demostración es la más elegante, pero solo sirve para casos en los que el Hamiltoniano es separable, es decir, de la forma

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{q}). \quad (3.37)$$

Se basa en la interpretación del método de Störmer-Verlet como método de escisión. Como en (2.21),

$$\Phi_h^{(A)} = \varphi_{h/2}^U \circ \varphi_h^T \circ \varphi_{h/2}^U, \quad (3.38)$$

donde φ_t^U y φ_t^T son los flujos exactos de los sistemas Hamiltonianos con funciones Hamiltonianas $T(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^T M^{-1}\mathbf{p}$ y $U(\mathbf{q})$ respectivamente, es decir, los sistemas Hamiltonianos $\dot{\mathbf{p}} = 0, \dot{\mathbf{q}} = M^{-1}\mathbf{p}$ y $\dot{\mathbf{p}} = -\nabla U(\mathbf{q}), \dot{\mathbf{q}} = 0$, correspondientes a la separación del Hamiltoniano (3.14) en energía cinética y energía potencial. Como los flujos de sistemas Hamiltonianos son simplécticos, su composición (3.38) también lo es. La variante $\Phi_h^{(B)}$ del método (2.21) tiene el flujo de T y de U intercambiados en (3.38) y, por tanto es igualmente simpléctico por ser composición de dos flujos exactos de sistemas Hamiltonianos, que son simplécticos. \square

Demostración 3. La tercera demostración usa la interpretación del método de Störmer-Verlet como un integrador variacional según se vio en la Sección 2.5. Si usamos (2.5) y la primera línea de (2.10), tenemos para $S_h(\mathbf{q}, \mathbf{Q})$ de (2.29), en el caso del Lagrangiano (2.24) que se corresponde con el Hamiltoniano (3.14),

$$\begin{aligned} S_h(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) &= \frac{h}{2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} \right)^T M \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} \right) - U(\mathbf{q}_n) \right] \\ &\quad + \frac{h}{2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} \right)^T M \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} \right) - U(\mathbf{q}_{n+1}) \right] \\ &= \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} \right)^T M \left(\frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} \right) - [U(\mathbf{q}_n) + U(\mathbf{q}_{n+1})]. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Derivando respecto de \mathbf{q}_n se tiene que

$$-\nabla_{\mathbf{q}} S_h(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) = M \frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} + \frac{h}{2} \nabla U(\mathbf{q}_n) = M \mathbf{v}_n = \mathbf{p}_n \quad (3.40)$$

y de manera similar

$$\nabla_{\mathbf{Q}} S_h(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) = M \frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h} + \frac{h}{2} \nabla U(\mathbf{q}_{n+1}) = M \mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{p}_{n+1}, \quad (3.41)$$

donde, como en la Sección 2.5, $\nabla_{\mathbf{q}}$ denota el gradiente respecto de las d primeras variables independientes de $S_h(\mathbf{q}, \mathbf{Q})$ y $\nabla_{\mathbf{Q}}$ denota el gradiente respecto de las d últimas variables independientes de $S_h(\mathbf{q}, \mathbf{Q})$.

Dados $(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n)$, la ecuación (3.40) determina \mathbf{q}_{n+1} y la ecuación (3.41) determina \mathbf{p}_{n+1} . La aplicación $\Phi_h : (\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) \rightarrow (\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1})$ que avanza un paso con el método de Störmer-Verlet es por lo tanto generada por la función escalar S_h mediante las dos ecuaciones anteriores. El resultado deseado se obtiene entonces del hecho de que una función $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\mathbf{P}, \mathbf{Q})$ generada por las ecuaciones

$$\begin{aligned} -\nabla_{\mathbf{q}}S(\mathbf{q}, \mathbf{Q}) &= \mathbf{p}, \\ \nabla_{\mathbf{Q}}S(\mathbf{q}, \mathbf{Q}) &= \mathbf{P}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

es simpléctica para cualquier función S . Para verlo, comprobamos directamente que se satisface la condición de simplecticidad. Diferenciando las ecuaciones (3.42) obtenemos las siguientes relaciones entre las matrices de derivadas parciales $\mathbf{P}_{\mathbf{p}}, \mathbf{P}_{\mathbf{q}}, \mathbf{Q}_{\mathbf{p}}, \mathbf{Q}_{\mathbf{q}}$:

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{q}\mathbf{q}} + S_{\mathbf{q}\mathbf{Q}}\mathbf{Q}_{\mathbf{q}} &= 0, & S_{\mathbf{q}\mathbf{Q}}\mathbf{Q}_{\mathbf{p}} &= -I, \\ S_{\mathbf{q}\mathbf{Q}} + S_{\mathbf{Q}\mathbf{Q}}\mathbf{Q}_{\mathbf{q}} &= \mathbf{P}_{\mathbf{q}}, & S_{\mathbf{Q}\mathbf{Q}}\mathbf{Q}_{\mathbf{p}} &= \mathbf{P}_{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Estas ecuaciones nos llevan a

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P}_{\mathbf{p}} & \mathbf{P}_{\mathbf{q}} \\ \mathbf{Q}_{\mathbf{p}} & \mathbf{Q}_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{\mathbf{p}} & \mathbf{P}_{\mathbf{q}} \\ \mathbf{Q}_{\mathbf{p}} & \mathbf{Q}_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

que es la condición de simplecticidad. Con esto completamos la tercera demostración del carácter simpléctico del método de Störmer-Verlet. \square

Demostración 4. La cuarta demostración se basa en considerar que el método de Störmer-Verlet puede ser generado mediante las relaciones

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_1 &= \mathbf{p}_0 - \nabla_{\mathbf{q}}\hat{S}_h(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_0), \\ \mathbf{q}_1 &= \mathbf{q}_0 + \nabla_{\mathbf{p}}\hat{S}_h(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_0), \end{aligned} \quad (3.45)$$

siendo \hat{S}_h la función generatriz dada por

$$\begin{aligned} \hat{S}_h(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_0) &= \frac{h}{2}(H(\mathbf{p}_{1/2}, \mathbf{q}_0) + H(\mathbf{p}_{1/2}, \mathbf{q}_1)) \\ &\quad - \frac{h^2}{4}\nabla_{\mathbf{q}}H(\mathbf{p}_{1/2}, \mathbf{q}_0)^T(\nabla_{\mathbf{p}}H(\mathbf{p}_{1/2}, \mathbf{q}_0) + \nabla_{\mathbf{p}}H(\mathbf{p}_{1/2}, \mathbf{q}_1)), \end{aligned} \quad (3.46)$$

donde \mathbf{q}_1 y $\mathbf{p}_{1/2}$ están definidas por las fórmulas del método de Störmer-Verlet y ahora son consideradas como funciones de $(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_0)$.

Notamos que (3.45) es análogo a (3.28), reemplazando $\frac{h}{2}H$ por \widehat{S}_h y siguiendo los mismos pasos que en la primera demostración se sigue que (3.45) define una transformación simpléctica. \square

En la Figura 5 integramos con el método de Störmer-Verlet el problema del péndulo (2.22), partiendo de un conjunto de condiciones iniciales dispuestas en un círculo. Observamos como el círculo $D = \{(q, v) \in \mathbb{R}^2; (q + 1.9)^2 + (v - 0.4)^2 \leq 0.05\}$ y su transformado, $\Phi_{Nh}(D)$, tras la aplicación de N pasos

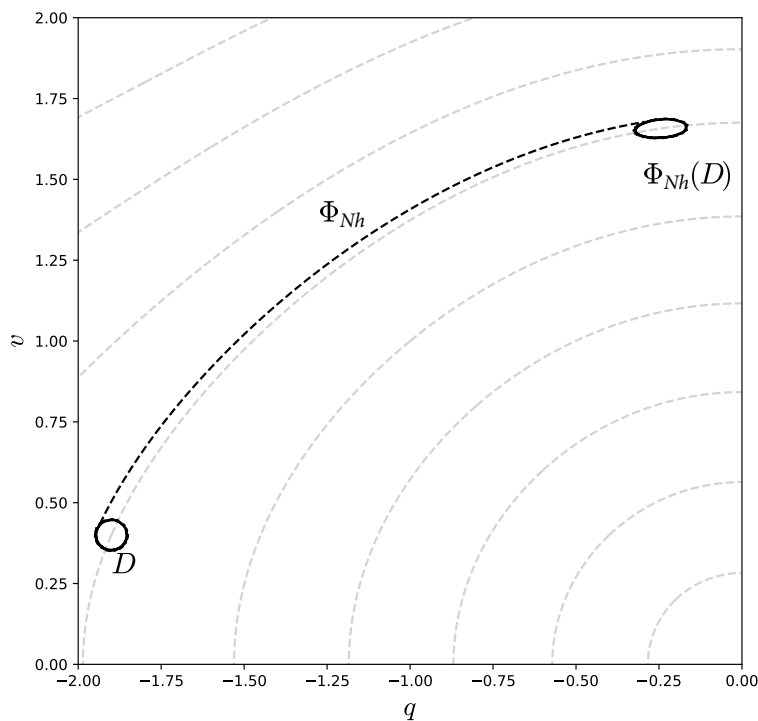


Figura 5: Simplecticidad del método de Störmer-Verlet para un Hamiltoniano separable.

con el método Φ_h para que $Nh = 1.5$, tienen el mismo área pero no igual forma, lo que ilustra el carácter simpléctico del método.

3.3. Conservación del volumen

El flujo φ_t de un sistema de ecuaciones diferenciales $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y})$, cuyo campo vectorial tiene divergencia nula ($\text{div}\mathbf{F}(\mathbf{y}) = 0$ para todo \mathbf{y}) satisface que $\det(\varphi_t'(\mathbf{y})) = 1$ para todo \mathbf{y} . Por lo tanto, preserva el volumen en el espacio de fase, es decir, para todo conjunto abierto y acotado Ω , y para todo t para el que existe $\varphi_t(\mathbf{y})$ para todo $\mathbf{y} \in \Omega$, se tiene

$$\text{vol}(\varphi_t(\Omega)) = \text{vol}(\Omega). \quad (3.47)$$

El campo vectorial $(\mathbf{v}, \mathbf{f}(\mathbf{q}))$ de la ecuación diferencial de segundo orden (2.1), escrito como sistema de primer orden (2.4), tiene divergencia nula, y lo mismo es cierto para un campo vectorial Hamiltoniano general

$$(-\nabla_{\mathbf{q}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \nabla_{\mathbf{p}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q})), \quad (3.48)$$

con función Hamiltoniana dos veces diferenciable

Teorema 3.5. *El método de Störmer-Verlet preserva el volumen, es decir,*

$$\text{vol}(\Phi_h(\Omega)) = \text{vol}(\Omega), \quad (3.49)$$

en las dos situaciones siguientes:

- a. cuando se aplica a sistemas Hamiltonianos (3.13)*
- b. en el caso de sistemas diferenciales particionados de la forma*

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{g}(\mathbf{v}), \quad \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad (3.50)$$

con \mathbf{f} y \mathbf{g} arbitrarias.

Demostración.

- a. Para el método (3.25) aplicado al sistema Hamiltoniano (3.13), la conservación del volumen se obtiene de su propiedad de simplecticidad (3.24), pues tomando determinantes en dicha igualdad se tiene que $\det(\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})) = 1$ para todo (\mathbf{p}, \mathbf{q}) .
- b. Para ecuaciones diferenciales particionadas de la forma (3.50), el método (2.35) puede ser considerado como un metodo de escisión (2.21), donde $\varphi_t^{[1]}$ y $\varphi_t^{[2]}$ son los flujos exactos de $\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{g}(\mathbf{v}), \dot{\mathbf{v}} = 0$ y $\dot{\mathbf{q}} = 0, \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{q})$, respectivamente. Como los campos vectoriales de estos flujos tienen divergencia nula, el flujo exacto de cada uno de ellos preserva el volumen y, por tanto, la composición de los dos flujos exactos también conserva el volumen.

Esta misma idea permite extender el método de Störmer-Verlet a otros integradores que conservan el volumen cuando se utilizan para integrar sistemas de tres ecuaciones de la forma

$$\begin{aligned} \dot{x} &= a(y, z), \\ \dot{y} &= b(x, z), \\ \dot{z} &= c(x, y), \end{aligned} \tag{3.51}$$

para los cuales los bloques diagonales de la matriz Jacobiana son nulos. Se puede construir un método numérico que avance un paso de longitud h mediante la composición simétrica de flujos exactos siguiente

$$\varphi_{h/2}^{[1]} \circ \varphi_{h/2}^{[2]} \circ \varphi_h^{[3]} \circ \varphi_{h/2}^{[2]} \circ \varphi_{h/2}^{[1]}, \tag{3.52}$$

donde $\varphi_t^{[1]}$ es el flujo exacto de $\dot{x} = a(y, z), \dot{y} = 0, \dot{z} = 0$, $\varphi_t^{[2]}$ es el flujo exacto de $\dot{x} = 0, \dot{y} = b(x, z), \dot{z} = 0$ y $\varphi_t^{[3]}$ es el flujo exacto de $\dot{x} = 0, \dot{y} = 0, \dot{z} = c(x, y)$. Los tres flujos exactos conservan el volumen y, por tanto, su

composición (3.52) también. Las ecuaciones del método resultante serían

$$\begin{aligned}
x_{n+\frac{1}{2}} &= x_n + \frac{h}{2}a(y_n, z_n), \\
y_{n+\frac{1}{2}} &= y_n + \frac{h}{2}b(x_{n+\frac{1}{2}}, z_n), \\
z_{n+1} &= z_n + hc(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}), \\
y_{n+1} &= y_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}b(x_{n+\frac{1}{2}}, z_{n+1}), \\
x_{n+1} &= x_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}a(y_{n+1}, z_{n+1}).
\end{aligned} \tag{3.53}$$

3.4. Conservación de integrales primeras

Definición 3.7. *Una función $I(\mathbf{y})$ no constante es una integral primera (o cantidad conservada, o constante del movimiento, o invariante) de un sistema diferencial $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y})$ si $I(\mathbf{y}(t))$ es constante a lo largo de cada solución o, equivalentemente, si*

$$[\nabla I(\mathbf{y})]^T \mathbf{F}(\mathbf{y}) = 0 \text{ para todo } \mathbf{y}. \tag{3.54}$$

La condición (3.54) afirma que el gradiente $\nabla I(\mathbf{y})$ es ortogonal al campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{y})$ en cada punto del espacio de fase.

En el caso de un sistema Hamiltoniano (3.13) con función Hamiltoniana $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, se tiene $\nabla H = ([\nabla_{\mathbf{p}}H]^T, [\nabla_{\mathbf{q}}H]^T)^T$ y $\mathbf{F} = ([-\nabla_{\mathbf{q}}H]^T, [\nabla_{\mathbf{p}}H]^T)^T$. Por tanto,

$$\nabla_{\mathbf{p}}H^T(-\nabla_{\mathbf{q}}H) + \nabla_{\mathbf{q}}H^T\nabla_{\mathbf{p}}H = 0, \tag{3.55}$$

es decir, la energía total H es una integral primera. En general, la energía total H no es constante a lo largo de las soluciones numéricas calculadas con el método de Störmer-Verlet, pero veremos más adelante que H se conserva hasta términos del orden $\mathcal{O}(h^2)$ a lo largo de intervalos de tiempo largos.

Ejemplo 3.1. El problema de Kepler (2.37)-(2.38) considerado al final de la Sección 2 es un sistema Hamiltoniano con dos grados de libertad y función

Hamiltoniana

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}, \quad (3.56)$$

que como se acaba de ver es una integral primera del sistema. Veremos a continuación que además del Hamiltoniano, este sistema tiene otras cantidades conservadas. Una de ellas es el momento angular $L(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = q_1 p_2 - q_2 p_1$, y también son integrales primeras del sistema las componentes no nulas del vector de Runge-Lenz-Pauli

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ q_1 p_2 - q_2 p_1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.57)$$

La Figura 6 muestra como evolucionan a lo largo de las soluciones numéricas calculadas con el método de Störmer-Verlet las cantidades H , L y A_2 . El método preserva el momento angular, salvo errores de redondeo, (línea verde) y solo se ven pequeños errores en el Hamiltoniano a lo largo de la solución numérica, pero sin que se observe un crecimiento de éstos con el tiempo (línea azul). Sin embargo, sí que aparecen desviaciones que crecen linealmente con el tiempo de integración en el vector de Runge-Lenz-Pauli (línea roja). En contraste, para los métodos Runge-Kutta explícitos, no se preserva ninguna de las integrales primeras y hay una desviación de la constante para todas ellas.

Ejemplo 3.2. El movimiento de un sistema de N partículas que interactúan dos a dos, con fuerzas potenciales que dependen de las distancias entre las partículas, se formula como un sistema Hamiltoniano con $6N$ grados de libertad y energía total

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \mathbf{p}_i^T \mathbf{p}_i + \sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{i-1} V_{ij}(\|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|). \quad (3.58)$$

Aquí $\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^3$ representan la posición y el momento de la partícula i -ésima de masa m_i y $V_{ij}(r) (i > j)$ es el potencial de interacción entre las partículas

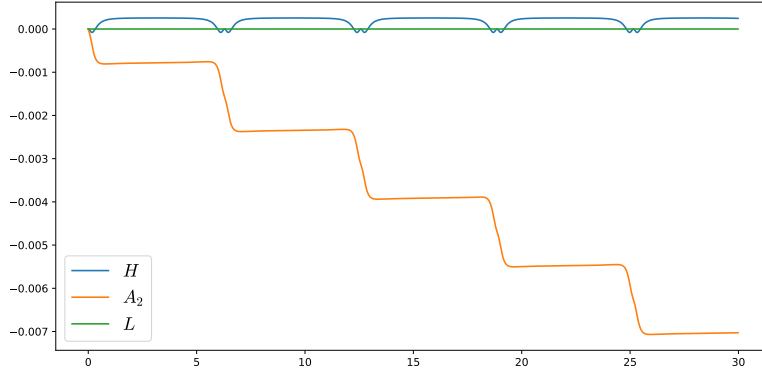


Figura 6: El Hamiltoniano, el momento angular y la segunda componente del vector de Runge-Lenz-Pauli a lo largo de la solución numérica calculada con el método de Störmer-Verlet con paso $h = 0.02$.

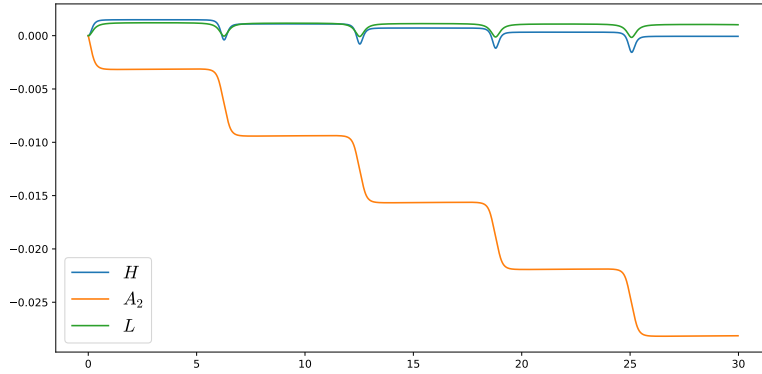


Figura 7: El Hamiltoniano, el momento angular y la segunda componente del vector de Runge-Lenz-Pauli a lo largo de la solución numérica calculada con el método de Runge de orden 2 con paso $h = 0.02$.

i -ésima y j -ésima. Las ecuaciones del movimiento son

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = \sum_{j=1}^N \nu_{ij}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j), \quad (3.59)$$

donde, para $i > j$, $\nu_{ij} = \nu_{ji} = -V'_{ij}(r_{ij})/r_{ij}$ con $r_{ij} = \|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|$, y donde ν_{ii} tie-

ne valor arbitrario, por ejemplo, $\nu_{ii} = 0$. La conservación del momento lineal total $P(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i$ y del momento angular total $L(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \times \mathbf{p}_i$ es consecuencia de la relación de simetría $\nu_{ij} = \nu_{ji}$, como se puede ver a continuación:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \nu_{ij} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) = 0, \\ \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N (\mathbf{q}_i \times \mathbf{p}_i) &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} (\mathbf{p}_i \times \mathbf{p}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\mathbf{q}_i \times \nu_{ij} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)) = 0. \end{aligned} \quad (3.60)$$

La conservación exacta de las integrales primeras lineales, como el momento lineal total, es común a la mayor parte de los integradores numéricos.

Teorema 3.6. *El método de Störmer-Verlet preserva las integrales primeras lineales.*

Demostración. Sea $I(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{b}^T \mathbf{q} + \mathbf{c}^T \mathbf{v}$ una integral primera lineal. La condición (3.54) en el caso particular de sistemas de la forma (2.4) implica que $\mathbf{b}^T \mathbf{v} + \mathbf{c}^T \mathbf{f}(\mathbf{q}) = 0$ para todos \mathbf{q}, \mathbf{v} . Entonces, tenemos que necesariamente $\mathbf{c}^T \mathbf{f}(\mathbf{q}) = 0$ para todo \mathbf{q} , y $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, es decir, $I(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{c}^T \mathbf{v}$. Si multiplicamos las ecuaciones primera y tercera de (2.10) por \mathbf{c}^T por la izquierda y utilizamos que $\mathbf{c}^T \mathbf{f}(\mathbf{q}) = 0$ tenemos que $\mathbf{c}^T \mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{c}^T \mathbf{v}_n$ y, por tanto, $I(\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}) = I(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_n)$. \square

Las integrales primeras cuadráticas, en general, no son preservadas por el método de Störmer-Verlet, como muestra el siguiente ejemplo.

Ejemplo 3.3. Consideramos el oscilador armónico, que tiene Hamiltoniano

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

($p, q \in \mathbb{R}$ y $\omega \in \mathbb{R}$ es la frecuencia del oscilador). Aplicando el método de Störmer-Verlet para su integración tenemos que

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ \omega q_{n+1} \end{pmatrix} = A(h\omega) \begin{pmatrix} p_n \\ \omega q_n \end{pmatrix}, \quad (3.61)$$

con matriz de propagación

$$A(h\omega) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{h^2\omega^2}{2} & -\frac{h\omega}{2} \left(1 - \frac{h^2\omega^2}{4}\right) \\ \frac{h\omega}{2} & 1 - \frac{h^2\omega^2}{2} \end{pmatrix}. \quad (3.62)$$

Se comprueba fácilmente que $A(h\omega)$ no es una matriz ortogonal, y por tanto, $H(p, q) = \|(p, \omega q)^T\|_2$ no se preserva a lo largo de las soluciones numéricas. Sin embargo, el polinomio característico de $A(h\omega)$ es $\lambda^2 - (2 - h^2\omega^2)\lambda + 1$, por lo que sus autovalores tienen módulo 1 si, y solo si, $|h\omega| \leq 2$. Sea V la matriz de autovectores de $A(h\omega)$, que para valores pequeños de $h\omega$ es próxima a la identidad. Tenemos que, como $AV = VD$ y $V^{-1}A^{-1} = D^{-1}V^{-1}$ (A es realmente $A(h\omega)$),

$$V^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_n \\ \omega \mathbf{q}_n \end{pmatrix} = V^{-1}A^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_{n+1} \\ \omega \mathbf{q}_{n+1} \end{pmatrix} = D^{-1}V^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_{n+1} \\ \omega \mathbf{q}_{n+1} \end{pmatrix}. \quad (3.63)$$

Se concluye que $V^{-1}(\mathbf{p}_n, \omega \mathbf{q}_n)^T$ y $V^{-1}(\mathbf{p}_{n+1}, \omega \mathbf{q}_{n+1})^T$ tienen la misma norma euclídea, pues D es diagonal con elementos diagonales de módulo 1 y es, por tanto, una matriz ortogonal. Es decir, el método de Störmer-Verlet no conserva $\|(\mathbf{p}, \omega \mathbf{q})^T\|_2$, pero sí preserva $\|V^{-1}(\mathbf{p}, \omega \mathbf{q})^T\|_2$.

Aunque el método de Störmer-Verlet no preserva el Hamiltoniano, preserva una importante subclase de integrales primeras cuadráticas y, en particular, el momento angular total de sistemas de N cuerpos.

Teorema 3.7. *El método de Störmer-Verlet preserva las integrales primeras cuadráticas de la forma $I(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{v}^T(C\mathbf{q} + \mathbf{c})$ (o $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T(B\mathbf{q} + \mathbf{b})$ en el caso Hamiltoniano), donde C (respectivamente B) es una matriz cuadrada constante y \mathbf{c} (respectivamente \mathbf{b}) es un vector constante.*

Demostración. Si $I(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ es conservada por el flujo exacto, por (3.54) tenemos que $\mathbf{f}(\mathbf{q})^T(C\mathbf{q} + \mathbf{c}) + \mathbf{v}^T C \mathbf{v} = 0$ para todos \mathbf{q}, \mathbf{v} . Escribiendo el método de Störmer-Verlet como la composición de los dos métodos simplécticos de

Euler (2.13) y (2.14), obtenemos para la primera mitad del paso

$$\begin{aligned}
I(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) &= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^T (C\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{c}) \\
&= (\mathbf{v}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_n))^T (C(\mathbf{q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) + \mathbf{c}) \\
&= \mathbf{v}_n^T (C\mathbf{q}_n + \mathbf{c}) \\
&\quad + \frac{h}{2} \left[\mathbf{f}(\mathbf{q}_n)^T (C\mathbf{q}_n + \mathbf{c}) + \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^T C\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} \right],
\end{aligned} \tag{3.64}$$

donde vemos que el término de la segunda línea de la última igualdad es nulo y concluimos que $I(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) = I(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_n)$.

Para la segunda mitad del paso, tenemos de forma análoga

$$\begin{aligned}
I(\mathbf{q}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}) &= \mathbf{v}_{n+1}^T (C\mathbf{q}_{n+1} + \mathbf{c}) \\
&= (\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}))^T (C(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) + \mathbf{c}) \\
&= \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^T (C\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{c}) \\
&\quad + \frac{h}{2} \left[\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1})^T (C\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{c}) + \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^T C\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} \right] \\
&= I(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}).
\end{aligned} \tag{3.65}$$

En conclusión, $I(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) = I(\mathbf{q}_n, \mathbf{v}_n)$. \square

El Teorema 3.7 proporciona una demostración adicional del carácter simpléctico del método de Störmer-Verlet. Consideramos el sistema Hamiltoniano

$$\dot{\mathbf{p}} = -\nabla U(\mathbf{q}), \quad \dot{\mathbf{q}} = M^{-1}\mathbf{p} \tag{3.66}$$

junto con su ecuación variacional

$$\dot{Y} = \begin{pmatrix} 0 & -\nabla^2 U(\mathbf{q}) \\ M^{-1} & 0 \end{pmatrix} Y, \quad \text{con } Y = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_p & \mathbf{P}_q \\ \mathbf{Q}_p & \mathbf{Q}_q \end{pmatrix}. \tag{3.67}$$

La derivada del flujo es entonces $\varphi'_t(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = Y(t)$, correspondiente a las condiciones iniciales de \mathbf{p}, \mathbf{q} e $Y(0) = I$. La derivada $\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ de las soluciones

numéricas con respecto a los valores iniciales es igual a Y_1 obtenido aplicando el método al sistema combinado de sistemas Hamiltonianos junto con su ecuación variacional, particionada en $(\mathbf{p}, \mathbf{P}_p, \mathbf{P}_q)$ y $(\mathbf{q}, \mathbf{Q}_p, \mathbf{Q}_q)$. Simplecticidad significa que las componentes de $Y^T J Y$ son integrales primeras. Puesto que son del tipo cuadrático mixto considerado anteriormente, el Teorema 3.7 muestra que son preservadas por el método de Störmer-Verlet, es decir, $Y_1^T J Y_1 = Y_0^T J Y_0$, que es justo la condición de simplecticidad $\Phi_h'^T J \Phi_h' = J$.

4. Análisis regresivo de los errores

El análisis teórico del buen comportamiento a tiempos largos de los integradores geométricos se basa principalmente en interpretar las aproximaciones numéricas generadas como la solución exacta de un problema modificado, lo que se conoce como *análisis regresivo* de los errores. Explicaremos las ideas principales y las ilustraremos para el método de Störmer-Verlet.

4.1. Construcción de la ecuación modificada

La idea del análisis regresivo de los errores es válida para todo tipo de ecuaciones diferenciales ordinarias cuando se integran con métodos numéricos de un paso generales.

Por tanto, consideramos el sistema diferencial de primer orden

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}), \quad (4.1)$$

y un método numérico de un paso $\mathbf{y}_{n+1} = \Phi_h(\mathbf{y}_n)$. La idea del análisis regresivo consiste en buscar una ecuación diferencial modificada

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{F}_3(\mathbf{y}) + \cdots, \quad (4.2)$$

tal que el flujo exacto de (4.2) tras h unidades, $\tilde{\varphi}_h(\mathbf{y})$, sea igual al flujo numérico $\Phi_h(\mathbf{y})$. Desafortunadamente, no se puede esperar que la serie que aparece en (4.2) converja, en general, y el enunciado preciso tiene que formularse como sigue a continuación.

Teorema 4.1. *Consideramos un sistema diferencial de primer orden (4.1) con un campo vectorial infinitamente diferenciable $\mathbf{F}(\mathbf{y})$, y suponemos que el método numérico admite un desarrollo en serie de Taylor de la forma*

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = \mathbf{y} + h\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{D}_2(\mathbf{y}) + h^3\mathbf{D}_3(\mathbf{y}) + \cdots \quad (4.3)$$

con $\mathbf{D}_j(\mathbf{y})$ suficientemente regulares. Entonces para cada $N \geq 1$, existen campos vectoriales $\mathbf{F}_j(\mathbf{y})$, $1 \leq j \leq N$, únicos, tales que

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}_{N,h}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{N+1}), \quad (4.4)$$

donde $\tilde{\varphi}_{N,h}$ es el flujo exacto del sistema diferencial modificado

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \cdots + h^{N-1}\mathbf{F}_N(\mathbf{y}). \quad (4.5)$$

Demostración. Dejando de lado cuestiones de convergencia, desarrollamos el flujo exacto de (4.2) en serie de Taylor (usaremos la notación $\tilde{\mathbf{y}}(t) = \tilde{\varphi}_t(\mathbf{y})$ y, en consecuencia, $\tilde{\mathbf{y}}(0) = \mathbf{y}$)

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_h(\mathbf{y}) &= \mathbf{y} + h\dot{\tilde{\mathbf{y}}}(0) + \frac{h^2}{2!}\ddot{\tilde{\mathbf{y}}}(0) + \frac{h^3}{3!}\tilde{\mathbf{y}}^{(3)}(0) + \cdots \\ &= \mathbf{y} + h(\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{F}_3(\mathbf{y}) + \cdots) \\ &\quad + \frac{h^2}{2}(\mathbf{F}'(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}'_2(\mathbf{y}) + \cdots)(\mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \cdots) + \cdots, \end{aligned} \quad (4.6)$$

donde el punto denota derivación respecto de la variable independiente t y la prima indica derivación respecto de \mathbf{y} . La comparación de potencias iguales de h en las expresiones (4.6) y (4.3) nos lleva a relaciones recurrentes para obtener las funciones $\mathbf{F}_j(\mathbf{y})$, esto es,

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_2(\mathbf{y}) &= \mathbf{D}_2(\mathbf{y}) - \frac{1}{2}\mathbf{F}'\mathbf{F}(\mathbf{y}), \\ \mathbf{F}_3(\mathbf{y}) &= \mathbf{D}_3(\mathbf{y}) - \frac{1}{3!}(\mathbf{F}''(\mathbf{F}, \mathbf{F})(\mathbf{y}) + \mathbf{F}'\mathbf{F}'\mathbf{F}(\mathbf{y})) - \frac{1}{2!}(\mathbf{F}'\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + \mathbf{F}'_2\mathbf{F}(\mathbf{y})), \\ \cdots &= \cdots, \end{aligned} \quad (4.7)$$

que definen unívocamente las funciones $\mathbf{F}_j(\mathbf{y})$ de una manera constructiva a partir del desarrollo de Taylor del método numérico. \square

4.2. Ecuación modificada para el método de Störmer-Verlet

Poniendo $\mathbf{y} = (\mathbf{q}, \mathbf{v})^T$ y $\mathbf{F}(\mathbf{y}) = (\mathbf{v}, \mathbf{f}(\mathbf{q}))^T$, la ecuación diferencial (2.4) es de la forma (4.1). Para el método de Störmer-Verlet (2.10) tenemos que

$$\Phi_h^{(A)}(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \begin{pmatrix} \mathbf{q} + h\mathbf{v} + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}) \\ \mathbf{v} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}) + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q} + h\mathbf{v} + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q})) \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Desarrollando esta función en serie de Taylor obtenemos (4.3) con

$$\mathbf{D}_2(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{q}) \\ \mathbf{f}'(\mathbf{q})\mathbf{v} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_3(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{f}'(\mathbf{q})\mathbf{f}(\mathbf{q}) + \mathbf{f}''(\mathbf{q})(\mathbf{v}, \mathbf{v}) \end{pmatrix}, \dots \quad (4.9)$$

y las funciones $\mathbf{F}_j(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ se pueden calcular como en la demostración del Teorema 4.1. Como el método de Störmer-Verlet es de segundo orden, la función $\mathbf{D}_2(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ tiene que coincidir con el coeficiente de h^2 de la solución exacta y tenemos que $\mathbf{F}_2(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}$. De igualar los términos en h^3 tenemos que

$$\mathbf{F}_3(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} -2\mathbf{f}'(\mathbf{q})\mathbf{v} \\ \mathbf{f}'(\mathbf{q})\mathbf{f}(\mathbf{q}) + \mathbf{f}''(\mathbf{q})(\mathbf{v}, \mathbf{v}) \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

y al igualar los términos en h^4 obtenemos que $\mathbf{F}_4(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}$. Este hecho es debido a la simetría del método numérico, como veremos en la próxima subsección. Para valores impares mayores de j , las funciones $\mathbf{F}_j(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ se vuelven más complicadas y en el desarrollo aparecen derivadas de orden más alto de $\mathbf{f}(\mathbf{q})$. La fórmula explícita de $\mathbf{F}_3(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ también nos muestra que la ecuación diferencial modificada (4.2) no responde al formato de segundo orden de la ecuación original (2.4).

Unos cálculos equivalentes para la versión (2.11) del método de Störmer-Verlet nos da

$$\mathbf{F}_3(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \frac{1}{24} \begin{pmatrix} -\mathbf{f}'(\mathbf{q})\mathbf{v} \\ -4\mathbf{f}'(\mathbf{q})\mathbf{f}(\mathbf{q}) - \mathbf{f}''(\mathbf{q})(\mathbf{v}, \mathbf{v}) \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

y $\mathbf{F}_2(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{F}_4(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}$.

4.3. Propiedades de la ecuación diferencial modificada

De la definición de la ecuación modificada se sigue que para métodos de orden r , esto es, los que satisfacen $\Phi_h(\mathbf{y}) = \varphi_h(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{r+1})$, tenemos que

$$\mathbf{F}_j(\mathbf{y}) = 0 \text{ para } j = 2, \dots, r. \quad (4.12)$$

Más aún, si el término dominante del error de truncación local es $\mathbf{E}_{r+1}(\mathbf{y})$, esto es, $\Phi_h(\mathbf{y}) = \varphi_h(\mathbf{y}) + h^{r+1}\mathbf{E}_{r+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{r+2})$, entonces

$$\mathbf{F}_{r+1}(\mathbf{y}) = \mathbf{E}_{r+1}(\mathbf{y}). \quad (4.13)$$

Por el Teorema 3.2 sabemos que el método de Störmer-Verlet es simétrico. Para esos métodos la ecuación modificada tiene un desarrollo en potencias pares de h , esto es,

$$\mathbf{F}_{2j}(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \text{ para } j = 1, 2, \dots \quad (4.14)$$

Esto se puede demostrar como sigue: para reflejar la dependencia de h del campo vectorial (4.2), denotamos con $\tilde{\varphi}_{t,h}(\mathbf{y})$ el flujo exacto de (4.2). El análisis regresivo de errores nos dice que $\Phi_h(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}_{h,h}(\mathbf{y})$. Por lo tanto, tenemos que $\Phi_{-h}(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}_{-h,-h}(\mathbf{y})$ y por la propiedad de grupo del flujo exacto, $\Phi_{-h}^{-1}(\mathbf{y}) = (\tilde{\varphi}_{-h,-h}(\mathbf{y}))^{-1} = \tilde{\varphi}_{h,-h}(\mathbf{y})$. La condición de simetría (3.6) implica que $\tilde{\varphi}_{t,h}(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}_{t,-h}(\mathbf{y})$ para $t = h$, y los cálculos de (4.6) muestran que esto solo es posible si se da (4.14).

A continuación vamos a ver que las propiedades geométricas del método de Störmer-Verlet se ponen de manifiesto en la ecuación modificada. Revisaremos las cuatro propiedades vistas en la Sección 3.

Teorema 4.2. *Si se aplica el método de Störmer-Verlet (2.10) a una ecuación diferencial (2.4) que es reversible respecto de la reflexión $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = (\mathbf{q}, -\mathbf{v})$, entonces cada truncación de la ecuación diferencial modificada es reversible respecto de la misma reflexión.*

Demostración. Sea $\mathbf{F}_j(\mathbf{y})$ el término que acompaña a h^{j-1} en la ecuación modificada (4.2) del método de Störmer-Verlet Φ_h . Realizaremos la demostración por inducción sobre j . Suponemos que para $j = 1, \dots, N$, el campo vectorial $\mathbf{F}_j(\mathbf{y})$ es ρ -reversible, es decir,

$$\rho \circ \mathbf{F}_j = -\mathbf{F}_j \circ \rho. \quad (4.15)$$

Demostremos ahora que la misma relación se cumple para $j = N + 1$. Por hipótesis, la truncación de la ecuación modificada

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}) + h\mathbf{F}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{F}_3(\mathbf{y}) + \dots + h^{N-1}\mathbf{F}_N(\mathbf{y}), \quad (4.16)$$

es ρ -reversible y por el Teorema 3.1, su flujo exacto $\tilde{\varphi}_{N,t}$ es ρ -reversible, es decir, $\rho \circ \tilde{\varphi}_{N,t} = \tilde{\varphi}_{N,t}^{-1} \circ \rho$. Por construcción de la propia ecuación modificada, tenemos que

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}_{N,h}(\mathbf{y}) + h^{N+1}\mathbf{F}_{N+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{N+2}). \quad (4.17)$$

Como $\tilde{\varphi}_{N,h}(\mathbf{y}) = \mathbf{y} + \mathcal{O}(h)$, esto implica que

$$\Phi_h^{-1}(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}_{N,h}^{-1}(\mathbf{y}) - h^{N+1}\mathbf{F}_{N+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{N+2}). \quad (4.18)$$

Tanto Φ_h como $\tilde{\varphi}_{N,h}$ son ρ -reversibles y, por tanto, tenemos que $\rho \circ \mathbf{F}_{N+1} = -\mathbf{F}_{N+1} \circ \rho$, como queríamos probar. \square

Teorema 4.3. *Si se aplica el método de Störmer-Verlet (3.25) a un sistema Hamiltoniano (3.13), entonces cada truncación de la ecuación modificada es también un sistema Hamiltoniano.*

Demostración. Esta demostración se basa también en el principio de inducción y, por simplicidad, supondremos que el Hamiltoniano $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ está definido en un dominio simplemente conexo. Introduciendo, como en la Subsección 3.2, $\mathbf{y} = [\mathbf{p}^T, \mathbf{q}^T]^T$, el sistema Hamiltoniano (3.13) se escribe de forma más compacta como $\dot{\mathbf{y}} = J^{-1}\nabla H(\mathbf{y})$ con J como en (3.15). Demostraremos

que todas las funciones \mathbf{F}_j que aparecen en la ecuación modificada pueden escribirse como

$$\mathbf{F}_j(\mathbf{y}) = J^{-1}\nabla H_j(\mathbf{y}), \quad (4.19)$$

para cierta función H_j . Sabemos que esto se cumple para $N = 1$, puesto que $\mathbf{F}_1(\mathbf{y}) = \mathbf{F}(\mathbf{y}) = J^{-1}\nabla H(\mathbf{y})$. Ahora vamos a probar, por inducción, que si (4.19) se cumple para $j = 1, 2, \dots, N$, entonces existe un Hamiltoniano $H_{N+1}(\mathbf{y})$ tal que $\mathbf{F}_{N+1}(\mathbf{y}) = J^{-1}\nabla H_{N+1}(\mathbf{y})$. La idea es considerar la ecuación modificada truncada (4.5), que es entonces un sistema Hamiltoniano con función Hamiltoniana $H(\mathbf{y}) + hH_2(\mathbf{y}) + \dots + h^{N-1}H_N(\mathbf{y})$. Su flujo $\tilde{\varphi}_{N,h}(\mathbf{y})$, comparado con el de (4.2) y, por lo tanto, con el flujo numérico del método de Störmer-Verlet tras un paso, Φ_h , satisface

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}_{N,h}(\mathbf{y}) + h^{N+1}\mathbf{F}_{N+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{N+2}), \quad (4.20)$$

y también

$$\Phi'_h(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}'_{N,h}(\mathbf{y}) + h^{N+1}\mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{N+2}). \quad (4.21)$$

Por el Teorema 3.4 y por hipótesis de inducción, Φ_h y $\tilde{\varphi}_{N,h}$ son transformaciones simplécticas. Esto, junto con que $\tilde{\varphi}'_{N,h}(\mathbf{y}) = I + \mathcal{O}(h)$, implica que

$$J = \Phi'_h(\mathbf{y})^T J \Phi'_h(\mathbf{y}) = J + h^{N+1} (\mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y})^T J + J \mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y})) + \mathcal{O}(h^{N+2}).$$

Lo anterior implica que $\mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y})^T J + J \mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y}) = 0$ y, entonces, $(J \mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y}))^T = \mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y})^T J^T = -\mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y})^T J = J \mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y})$. Por lo tanto, la matriz $J \mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y})$ tiene que ser simétrica, y al ser el dominio simplemente conexo, la función $J \mathbf{F}'_{N+1}(\mathbf{y})$ es el gradiente de alguna función escalar $H_{N+1}(\mathbf{y})$, lo que prueba (4.19) para $j = N + 1$. \square

Para dominios generales, el resultado también es cierto, pero la demostración requiere el uso de funciones generatrices.

Teorema 4.4. *Si se aplica el método de Störmer-Verlet (2.35) para la integración numérica de un sistema de divergencia nula de la forma (3.50), entonces cada truncación de la ecuación diferencial modificada es de divergencia nula.*

Teorema 4.5. *Si se aplica el método de Störmer-Verlet (2.35) a una ecuación diferencial con una integral primera de la forma $I(\mathbf{q}, \mathbf{v}) = \mathbf{v}^T(C\mathbf{q} + \mathbf{c})$, entonces cada truncación de la ecuación diferencial modificada tiene $I(\mathbf{q}, \mathbf{v})$ como integral primera*

La demostración del Teorema 4.4 se puede encontrar en el Teorema 4.6 de [3]. La demostración del Teorema 4.5 se puede realizar a partir del Teorema 4.1 de [3] y con el resultado del Teorema 3.7. Ambas se realizan por inducción.

Para ilustrar el papel de las ecuaciones modificadas, vamos a considerar como caso particular la ecuación del péndulo, para la cual $f(q) = -\sin(q)$. De esta manera tenemos que $\mathbf{F}(q, v) = (v, -\sin(q))$ y en la ecuación modificada del método de Störmer-Verlet, siguiendo (4.10),

$$\mathbf{F}_3(q, v) = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} -2 \cdot \cos(q)v \\ \sin(q) \cos(q) + \sin(q)v^2 \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

En la Figura 8 se muestra:

- a. El flujo exacto de la ecuación del péndulo, en línea continua negra.
- b. La solución numérica de la ecuación del péndulo, calculada con el método de Störmer-Verlet con $h = 0.65$, en círculos negros.
- c. El flujo exacto de la ecuación diferencial modificada (truncada después del término $\mathcal{O}(h^2)$) correspondiente a la versión (2.10) del método de Störmer-Verlet, en línea discontinua roja.

Tanto las soluciones de la ecuación exacta como de la ecuación modificada son periódicas, y la aproximación numérica se encuentra más cerca de las curvas de nivel correspondientes a la ecuación modificada, que de las curvas de nivel de la ecuación original. Esto se explica por el hecho de que para $f(q) = -\nabla U(q)$ los campos vectoriales (4.10) y (4.11) son Hamiltonianos

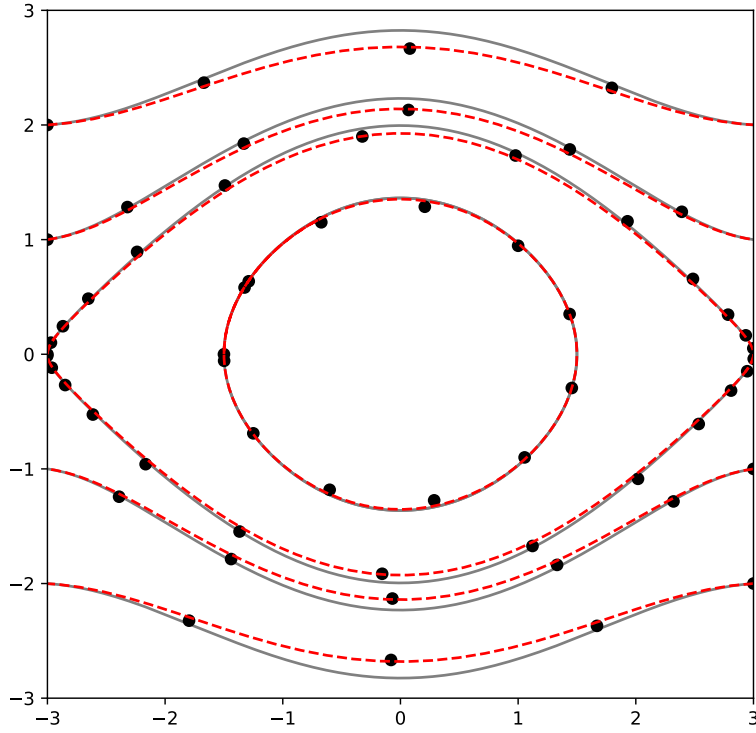


Figura 8: Las líneas continuas grises muestran la solución exacta, la línea discontinua roja la solución exacta de la ecuación modificada, y los puntos negros las soluciones obtenidas con el método numérico.

con funciones Hamiltonianas

$$\begin{aligned}
 H_3(p, q) &= \frac{1}{12} \nabla^2 U(q)(p, p) + \frac{1}{24} \nabla U(q)^T \nabla U(q) \text{ y} \\
 H_3(p, q) &= -\frac{1}{24} \nabla^2 U(q)(p, p) - \frac{1}{6} \nabla U(q)^T \nabla U(q),
 \end{aligned}
 \tag{4.23}$$

respectivamente. En el caso del péndulo $U(q) = -\cos(q)$. Observamos una coincidencia sorprendentemente buena entre la solución numérica y el flujo exacto de la ecuación modificada dado que casi conserva la energía \tilde{H} (hasta los términos $\mathcal{O}(h^2)$ incluidos), cuyas curvas de nivel se dibujan en la Figura

8. Para este ejemplo tenemos:

$$\begin{aligned}\tilde{H}(p, q) &= H(p, q) + h^2 H_3(p, q) \\ &= \frac{1}{2}p^2 - \cos(q) + h^2 \left(\frac{1}{12} \cos(q)p^2 + \frac{1}{24} \sin^2(q) \right).\end{aligned}\quad (4.24)$$

4.4. Conservación de la energía

Hemos visto en el Ejemplo 3.3 que la energía total $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ de un sistema Hamiltoniano no se preserva exactamente mediante el método de Störmer-Verlet, aunque en este ejemplo, sí que se conserva aproximadamente. También en el caso del problema de Kepler, la Figura 6 indica que, aunque el método de Störmer-Verlet no conserva exactamente el Hamiltoniano (3.56), no se producen grandes desviaciones en la energía.

En el siguiente teorema se demuestra que para sistemas Hamiltonianos generales, si se utiliza el método de Störmer-Verlet, el Hamiltoniano se conserva aproximadamente durante largos intervalos de tiempos.

Teorema 4.6. *Se considera un sistema Hamiltoniano (3.13) con función Hamiltoniana (3.14). La energía total a lo largo de una solución numérica $(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n)$ generada con el método de Störmer-Verlet satisface*

$$|H(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) - H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)| \leq Ch^2 + C_N h^N t_n, \text{ para } 0 \leq t_n = nh \leq h^{-N}, \quad (4.25)$$

para cualquier natural N . Las constantes C y C_N son independientes de t y de h , y C_N depende de las cotas de las derivadas de H hasta orden $N+1$ en una región que contenga los valores de las aproximaciones numéricas $(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n)$.

Demostración. Esta demostración se basa en el carácter simpléctico del método de Störmer-Verlet y en el uso del análisis regresivo de los errores. Por el Teorema 4.2, sabemos que la ecuación diferencial modificada, truncada

después de N términos, es también Hamiltoniana, con un Hamiltoniano \tilde{H} que en un entorno de la solución numérica dista del Hamiltoniano original H en términos $\mathcal{O}(h^2)$, es decir,

$$|H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - \tilde{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})| \leq Ch^2.$$

Consideramos ahora \tilde{H} a lo largo de la solución numérica. Escribimos la variación de \tilde{H} entre la condición inicial y la aproximación numérica en tiempo t_n como una suma telescópica

$$\tilde{H}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) - \tilde{H}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = \sum_{j=0}^{n-1} \left(\tilde{H}(\mathbf{p}_{j+1}, \mathbf{q}_{j+1}) - \tilde{H}(\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j) \right). \quad (4.26)$$

Por construcción de la ecuación modificada, tenemos que $(\mathbf{p}_{j+1}, \mathbf{q}_{j+1}) = \tilde{\varphi}_h(\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j) + \mathcal{O}(h^{N+1})$, donde $\tilde{\varphi}_h$ denota el flujo exacto del sistema Hamiltoniano modificado. El flujo $\tilde{\varphi}_h$ preserva el Hamiltoniano modificado, y, por tanto,

$$\tilde{H}(\mathbf{p}_{j+1}, \mathbf{q}_{j+1}) - \tilde{H}(\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j) = \tilde{H}(\mathbf{p}_{j+1}, \mathbf{q}_{j+1}) - \tilde{H}(\tilde{\varphi}_h(\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j)) = \mathcal{O}(h^{N+1}).$$

Insertando esta estimación en la suma de (4.26) y tomando valor absoluto obtenemos la siguiente acotación

$$\begin{aligned} |\tilde{H}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) - \tilde{H}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)| &= \left| \sum_{j=0}^{n-1} \left(\tilde{H}(\mathbf{p}_{j+1}, \mathbf{q}_{j+1}) - \tilde{H}(\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j) \right) \right| \\ &\leq \sum_{j=0}^{n-1} |\tilde{H}(\mathbf{p}_{j+1}, \mathbf{q}_{j+1}) - \tilde{H}(\tilde{\varphi}_h(\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j))| \\ &\leq \sum_{j=0}^{n-1} C_N h^{N+1} = C_N \cdot h^N \cdot nh = C_N h^N t_n. \end{aligned}$$

Para el Hamiltoniano exacto H tenemos

$$\begin{aligned} |H(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) - H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)| &= |H(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) - \tilde{H}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) + \tilde{H}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) - H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)| \\ &\leq |H(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) - \tilde{H}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n)| + |\tilde{H}(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n) - H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)| \\ &\leq Ch^2 + C_N h^N t_n, \end{aligned}$$

puesto que $H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = \tilde{H}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$. \square

5. El método de Störmer-Verlet con paso variable

El uso de integradores numéricos de paso variable para sistemas de ecuaciones diferenciales es recomendable para avanzar con paso pequeño cuando la solución exacta cambia rápidamente, y con paso grande cuando cambia lentamente. En general, el uso de paso variable incrementa la eficiencia de los integradores temporales. Sin embargo, es conocido, que la forma de utilizar pasos variables en los integradores convencionales no es directamente aplicable a los integradores geométricos, pues se pierden las buenas propiedades que tienen cuando se implementan con paso fijo [8].

Una estrategia utilizada en la literatura para evitar este problema se basa en la idea de considerar la transformación temporal

$$\frac{dt}{d\tau} = g(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (5.1)$$

y en escribir el sistema de ecuaciones diferenciales (3.13) en términos de la nueva variable independiente τ

$$\frac{d\mathbf{p}}{d\tau} = -g(\mathbf{p}, \mathbf{q})\nabla_{\mathbf{q}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad \frac{d\mathbf{q}}{d\tau} = g(\mathbf{p}, \mathbf{q})\nabla_{\mathbf{p}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (5.2)$$

Integrando el sistema de ecuaciones diferenciales (5.2) con paso fijo h se generan soluciones numéricas de paso variable del problema original (3.13). La función g deberá ser grande cuando en la integración de (3.13) se pueden dar pasos grandes, y deberá ser pequeña donde la solución de (3.13) varíe más rápidamente. Si la transformación (5.1) es tal que el sistema (5.2) es reversible, entonces los resultados teóricos conocidos para integradores reversibles de paso fijo [2] se pueden aplicar a (5.2) y se mantienen las propiedades favorables de la solución numérica vista como una aproximación de paso variable a la solución de (3.13).

El problema de los integradores simplécticos con paso variable estándar

es el posible mal comportamiento de los errores para intervalos de integración largos. En particular, el método dado por (5.1) y (5.2) no se comporta bien porque, en general, los sistemas obtenidos tras el cambio de escala temporal no son Hamiltonianos. Una solución a este problema, sugerida por Hairer y Reich, es utilizar las transformaciones de Poincaré. La idea es la siguiente: si $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ son las condiciones iniciales para (3.13) y H_0 es el valor de la función Hamiltoniana en $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$, uno integra con un método simpléctico y longitud de paso fija h el sistema Hamiltoniano con función Hamiltoniana $g(\mathbf{p}, \mathbf{q})(H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - H_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}))$, es decir,

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{p}}{d\tau} &= -g(\mathbf{p}, \mathbf{q})\nabla_{\mathbf{q}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - (H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - H_0)\nabla_{\mathbf{q}}g(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \\ \frac{d\mathbf{q}}{d\tau} &= g(\mathbf{p}, \mathbf{q})\nabla_{\mathbf{p}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - (H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + H_0)\nabla_{\mathbf{p}}g(\mathbf{p}, \mathbf{q}).\end{aligned}\tag{5.3}$$

Nótese que para que (5.3) esté bien definido hace falta que la función g de (5.1) sea diferenciable, y que la diferencia entre (5.3) y el sistema reparametrizado (5.2) es solo una perturbación que se anula a lo largo de la solución exacta de (3.13) con condición inicial $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$, pero que hace que (5.3) sea Hamiltoniano.

Teniendo en cuenta estas ideas, a continuación vamos a construir implementaciones de paso variable del método de Verlet para integrar (3.13), en el caso de que el Hamiltoniano sea de la forma (3.14), con $M = I$ (la matriz identidad). En este trabajo sólo vamos a considerar un par de métodos contruidos utilizando el carácter reversible de (5.1)-(5.2), aunque en [1] se incluyen también métodos basados en el carácter simpléctico de (5.3). Igualmente, entre las diversas elecciones posibles para la transformación temporal (5.1) que aparecen en [1], vamos a considerar aquí únicamente la parametrización dada por la longitud del arco, es decir,

$$g(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\|\mathbf{p}\|^2 + \|\nabla U(\mathbf{q})\|^2)^{-1/2}.\tag{5.4}$$

5.1. Método de Verlet adaptativo implícito

En [6] se propone una generalización del método de Störmer-Verlet usando el método Runge-Kutta particionado de segundo orden Lobatto IIIA-B para el sistema (5.1)-(5.2). Las ecuaciones de dicho método son [1]

$$\begin{aligned}
 \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{p}_n - \frac{h}{2}g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n)\nabla U(\mathbf{q}_n), \\
 \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2} \left(g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) + g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) \right) \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \\
 \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2}g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1})\nabla U(\mathbf{q}_{n+1}), \\
 t_{n+1} &= t_n + \frac{h}{2} \left(g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) + g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) \right),
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

que se corresponden con la aplicación de (2.35) al sistema diferencial (5.2) cuando H está dada por (3.14). Esta discretización es reversible y preserva el momento angular. A continuación, analizamos cómo resolver cada una de las ecuaciones de (5.5). Si la función (5.1) depende de \mathbf{p} , entonces la primera ecuación es implícita en $\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}$ y definimos la siguiente iteración para resolverla:

$$\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu+1]} = \mathbf{p}_n - \frac{h}{2}g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}, \mathbf{q}_n)\nabla U(\mathbf{q}_n), \quad \nu = 0, 1, \dots \tag{5.6}$$

Escogemos en cada paso como primer iterante $\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[0]} = \mathbf{p}_n$, y detenemos la iteración cuando el cambio relativo es menor que una determinada tolerancia Tol previamente fijada, es decir, si

$$\frac{\|\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu+1]} - \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}\|}{\|\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu+1]}\|} < \text{Tol}. \tag{5.7}$$

Si la función g en (5.1) depende de \mathbf{p} únicamente a través de su norma, entonces (5.6) puede expresarse como una iteración escalar. Por ejemplo, si tomamos la parametrización g dada en (5.4), calculamos los valores $\beta^{[\nu]} = \|\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}\|^2$ del iterante ν -ésimo, y para $\beta^{[\nu+1]}$ se tiene, usando (5.6), la siguiente

expresión

$$\begin{aligned} \beta^{[\nu+1]} &= \|\mathbf{p}_n\|^2 \\ &+ \left(\frac{h}{2} g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}, \mathbf{q}_n) \right)^2 \|\nabla U(\mathbf{q}_n)\|^2 \\ &- h g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}, \mathbf{q}_n) \mathbf{p}_n^T \nabla U(\mathbf{q}_n), \quad \nu = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (5.8)$$

Como

$$g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}, \mathbf{q}_n) = (\beta^{[\nu]} + \|\nabla U(\mathbf{q}_n)\|^2)^{-1/2}, \quad (5.9)$$

(5.8) proporciona $\beta^{[\nu+1]}$ a partir de $\beta^{[\nu]}$, sin que sea necesario construir $\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}$. Además, (5.7) se puede escribir como

$$\frac{(h/2) \|\nabla U(\mathbf{q}_n)\| |g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}, \mathbf{q}_n) - g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu-1]}, \mathbf{q}_n)|}{\sqrt{\beta^{[\nu+1]}}} < \text{Tol}, \quad (5.10)$$

con el convenio de que $g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}^{[-1]}, \mathbf{q}_n) = 0$, y se utiliza (5.9) para evaluar g . Cuando la condición (5.10) se cumpla, fijamos

$$g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) = (\beta^{[\nu]} + \|\nabla U(\mathbf{q})\|^2)^{-1/2} \quad (5.11)$$

y obtenemos $\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}$ sustituyendo (5.11) en la primera ecuación de (5.5). Otra situación interesante es cuando (5.1) depende únicamente de \mathbf{q} , en cuyo caso la primera ecuación de (5.5) es explícita.

La segunda ecuación de (5.5) es implícita en \mathbf{q}_{n+1} y la resolvemos mediante la siguiente iteración

$$\mathbf{q}_{n+1}^{[\nu+1]} = \mathbf{q}_n + \frac{h}{2} \left(g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) + g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}^{[\nu]}) \right) \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \quad \nu = 0, 1, \dots, \quad (5.12)$$

escogiendo como primer iterante $\mathbf{q}_{n+1}^{[0]} = \mathbf{q}_n$. Nuevamente, la iteración se detiene cuando

$$\frac{\|\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu+1]} - \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}\|}{\|\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu+1]}\|} < \text{Tol}, \quad (5.13)$$

que puede ser escrito como

$$\frac{(h/2)\|\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}\|\left|g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}) - g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu-1]})\right|}{\|\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu+1]}\|} < \text{Tol}, \quad (5.14)$$

tomando para $\nu = 0$, $g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[-1]}) = -g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n)$. Cuando (5.14) se satisface, fijamos $g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}) = g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]})$ y $\mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{[\nu]}$.

Por último, la tercera ecuación de (5.5) es explícita, y la actualización del tiempo t_{n+1} también.

5.2. Método de Verlet adaptativo explícito

En [1] se implementa un método completamente explícito introduciendo una nueva variable ρ , que representa el recíproco de la función g que define la transformación temporal (5.1), es decir, $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{g(\mathbf{p}, \mathbf{q})}$. Esta nueva variable se calcula con una fórmula simétrica. Las ecuaciones del método resultante son

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{q}_n + \frac{h}{2\rho_n} \mathbf{p}_n, \\ \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{p}_n - \frac{h}{2\rho_n} \nabla U(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \rho_n + \rho_{n+1} &= \frac{2}{g(\mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}})}, \\ \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_{n+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2\rho_{n+1}} \nabla U(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2\rho_{n+1}} \mathbf{p}_{n+1}, \\ t_{n+1} &= t_n + \frac{h}{2} \left(\frac{1}{\rho_n} + \frac{1}{\rho_{n+1}} \right). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Este método también es reversible y preserva el momento angular. Para el primer paso, tomamos $\rho_0 = \frac{1}{g(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)}$. Si la función de escala utilizada en

(5.1) solo depende de \mathbf{q} , entonces las ecuaciones segunda y cuarta de (5.15) pueden reescribirse en una única ecuación

$$\mathbf{p}_{n+1} = \mathbf{p}_n - \frac{h}{2} \left(\frac{1}{\rho_n} + \frac{1}{\rho_{n+1}} \right) \nabla U(\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}). \quad (5.16)$$

5.3. Experimentos numéricos

Comparamos las dos versiones del método de Störmer-Verlet (2.10) y (2.11), el método adaptativo implícito (5.5) y el método adaptativo explícito (5.15), para la integración del problema de Kepler (2.37)-(2.38) con condiciones iniciales (2.39), descrito en la Subsección 2.7. Las ejecuciones las realizamos con diferentes excentricidades, $e = 0.65, 0.9, 0.99$, puesto que es bien conocido que cuanto más se acerca la excentricidad a 1, más necesario es utilizar pasos variables para realizar una integración eficiente. Para comparar la eficiencia de los distintos métodos se ha calculado el error de la aproximación numérica en $T = 2\pi$ (utilizando la norma euclídea de \mathbb{R}^4), y se han medido el tiempo de CPU necesario y el número de evaluaciones de la función \mathbf{f} realizadas para obtener dicha aproximación. La ejecución de los algoritmos se ha hecho con Python sobre una máquina Linux con 8 CPUs, 128 GB de memoria RAM y un procesador Intel de 3^a generación con 3,4 GHz de velocidad. En los métodos adaptativos, la aproximación numérica en $T = 2\pi$ se obtiene mediante interpolación polinómica de Hermite, utilizando las aproximaciones numéricas en los dos tiempos consecutivos t_{N-1} y t_N que satisfacen $t_{N-1} \leq 2\pi \leq t_N$. Para el método adaptativo implícito hemos utilizado una tolerancia para detener las iteraciones de punto fijo de 10^{-5} .

Para excentricidad $e = 0.65$ se han escogido longitudes de paso h iguales a 16×10^{-3} , 8×10^{-3} , 4×10^{-3} y 2×10^{-3} . Si nos fijamos en la gráfica de la izquierda de la Figura 9, donde mostramos el error frente al número de evaluaciones de \mathbf{f} , observamos que el método más eficiente es el adaptativo explícito (EAV), seguido de las dos versiones de paso fijo del método de

Störmer-Verlet (2.10) y (2.11) y, finalmente, el menos eficiente es el método adaptativo implícito (IAV). Sin embargo, si analizamos el error frente al tiempo de CPU requerido por los métodos, observamos que la eficiencia del método adaptativo implícito es comparable a la del método de Störmer-Verlet de paso fijo (2.11). Este cambio de eficiencia en función de cómo la midamos es debido a que en este problema el coste computacional de evaluar la función \mathbf{f} es relativamente pequeño frente al coste computacional del resto de las operaciones requeridas por el método completo. Observamos también en ambas gráficas que todos los métodos considerados tienen orden de convergencia 2, como cabía esperar del análisis teórico realizado (las pendientes de todas las líneas representadas es aproximadamente -2).

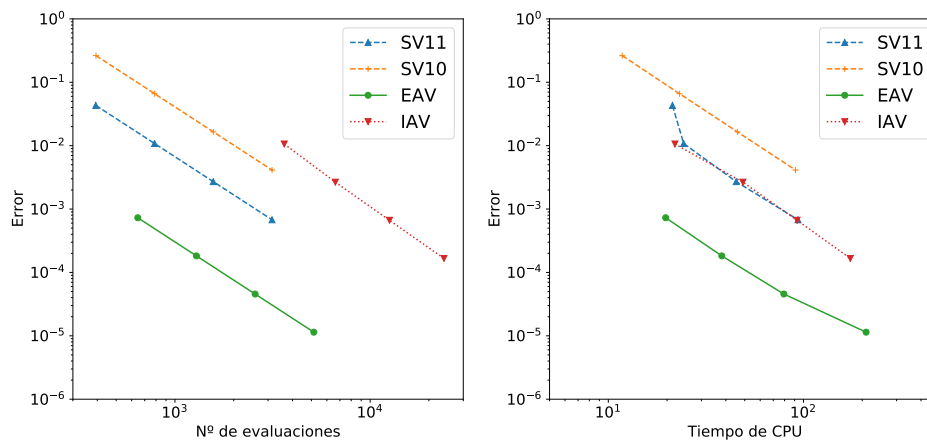


Figura 9: Error frente al número de evaluaciones de función (izquierda) y frente al tiempo de CPU (derecha) para los cuatro métodos y $e = 0.65$.

Para excentricidad $e = 0.9$ se han seleccionado longitudes de paso h diferentes en función del tipo de método, para que los resultados se puedan comparar más fácilmente. Para los métodos de paso fijo se han escogido longitudes de paso h iguales a 8×10^{-4} , 4×10^{-4} , 2×10^{-4} y 1×10^{-4} y para los métodos adaptativos, menos sensibles al cambio de excentricidad, se han fijado longitudes de paso h iguales a 16×10^{-4} , 8×10^{-4} , 4×10^{-4} y 2×10^{-4} . De

los resultados de la Figura 10 extraemos conclusiones similares a las del caso de excentricidad $e = 0.65$, en lo que se refiere al orden de los cuatro métodos considerados, pero se observan algunas diferencias. La primera es que cuando se analiza el error frente al número de evaluaciones de función comprobamos que el método adaptativo implícito es más eficiente que el método de Störmer-Verlet (2.10) y que existe menos desventaja cuando se compara con el método de Störmer-Verlet (2.11). La otra es que en la comparación del error frente al tiempo de CPU comprobamos que para $e = 0.9$ los dos métodos adaptativos son igual de eficientes. Aunque las longitudes de paso h utilizadas para $e = 0.9$ son más pequeñas que para $e = 0.65$, los errores que se obtienen son un poco más grandes, porque el problema es bastante más difícil de integrar.

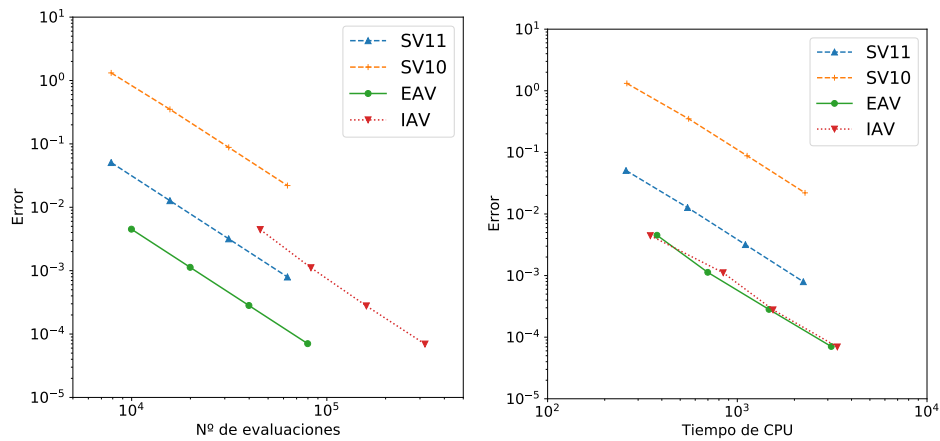


Figura 10: Error frente al número de evaluaciones de función (izquierda) y frente al tiempo de CPU (derecha) para los cuatro métodos y $e = 0.9$.

Para excentricidad $e = 0.99$ se han escogido longitudes de paso h iguales a 16×10^{-4} , 8×10^{-4} , 4×10^{-4} , 2×10^{-4} y 1×10^{-4} . En este caso solo hemos comparado los métodos de paso variable, descartando los métodos de paso fijo debido a que necesitarían longitudes de paso extremadamente pequeñas para obtener errores por debajo de la unidad. Podemos ver los resultados en la Figura 11. Si se compara el error frente al número de evaluaciones (izquierda)

se observa que el método adaptativo explícito es más eficiente que el implícito, necesitando un menor número de evaluaciones de la función \mathbf{f} para obtener errores similares. Sin embargo, volvemos a comprobar que, dado que el coste computacional de evaluar la función \mathbf{f} es relativamente pequeño frente al coste computacional del método completo, la eficiencia de ambos métodos adaptativos cuando se compara el error frente al tiempo de CPU (derecha) es prácticamente idéntica. También observamos que se sigue manteniendo la convergencia cuadrática de los dos métodos. Al estar utilizando las mismas longitudes de paso que para $e = 0.9$, aunque el comportamiento relativo de ambos métodos es muy parecido, los errores que se obtienen son bastante mayores cuando $e = 0.99$.

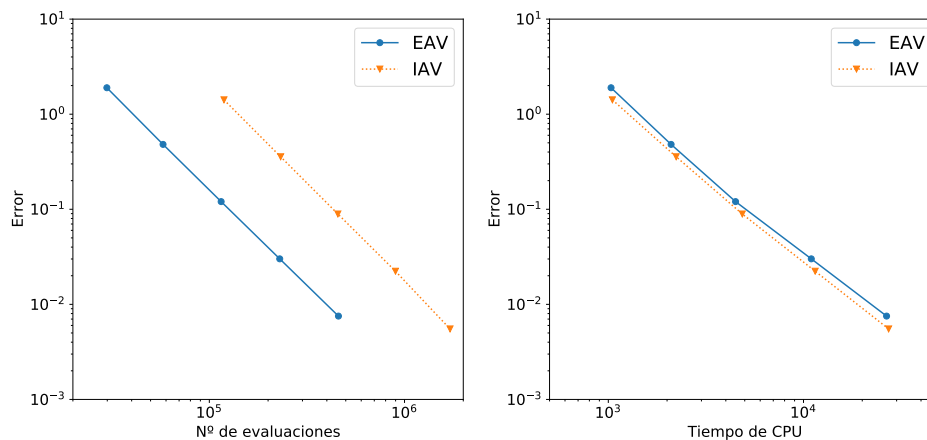


Figura 11: Error frente al número de evaluaciones de función (izquierda) y frente al tiempo de CPU (derecha) para los métodos de paso variable y $e = 0.99$.

Comparando las dos gráficas de la izquierda de las Figuras 10 y 11 observamos que para un mismo valor de h el número de evaluaciones utilizadas por EAV e IAV es mayor para $e = 0.99$ que para $e = 0.9$. Esto es debido a que aunque la longitud de paso utilizada en la variable τ es la misma, la

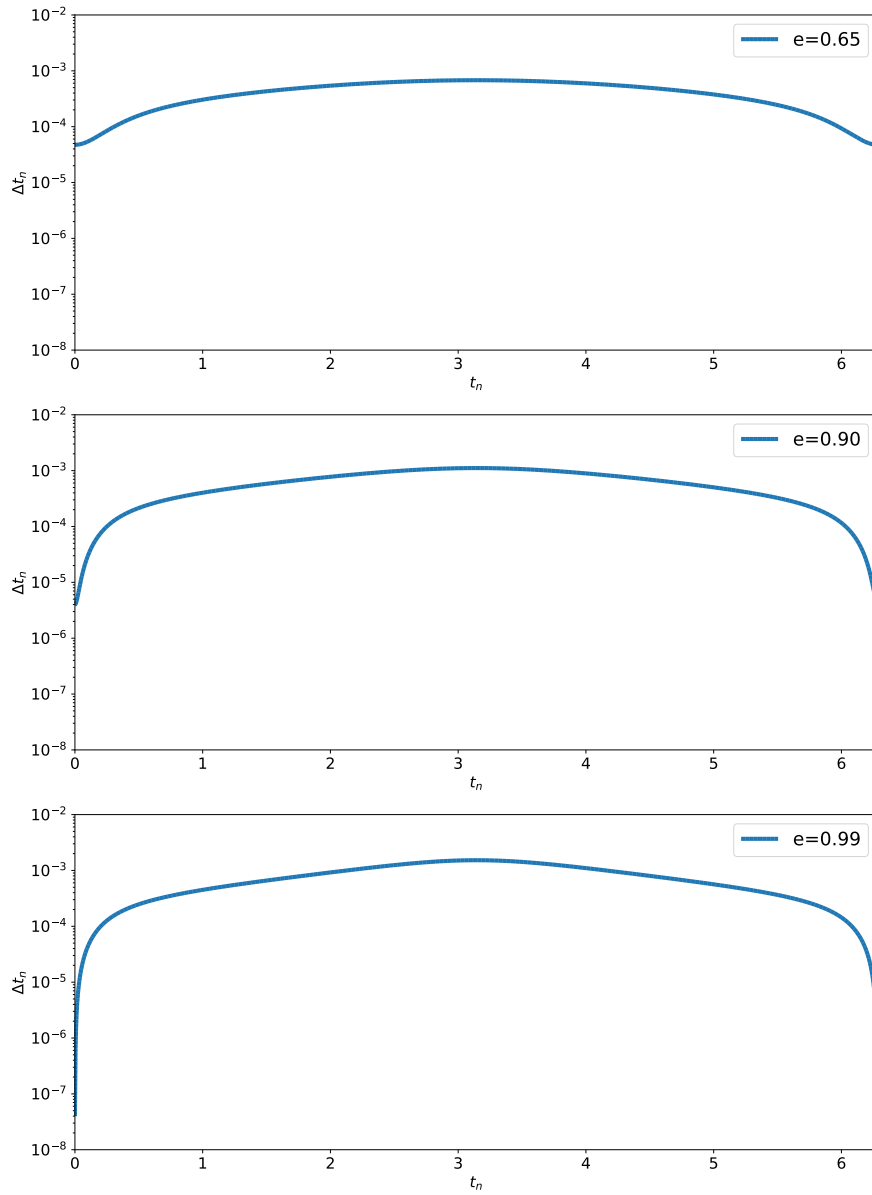


Figura 12: Evolución de Δt_n frente al tiempo t_n para el método de Verlet adaptativo explícito con $h = 4 \times 10^{-4}$, para cada una de las tres excentricidades consideradas. .

función de escalado g en (5.1) toma valores distintos para cada excentricidad y el número de pasos que hay que dar para cubrir el intervalo $[0, 2\pi]$ en la variable t es mayor a medida que la excentricidad se acerca a 1. En la Figura 12 hemos representado los valores de $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ frente al tiempo t_n para el método de Verlet adaptativo explícito con $h = 4 \times 10^{-4}$ (los resultados son casi idénticos para el método adaptativo implícito) y cada una de las excentricidades estudiadas $e = 0.65, 0.9, 0.99$, para visualizar el tamaño de las diferentes longitudes de paso utilizadas en la variable original t . En la Tabla 1 hemos incluido los valores máximo y mínimo de Δt_n para cada una de las tres excentricidades. Tanto en la Figura 12 como en la Tabla 1 obse-

e	0.65	0.9	0.99
mín(Δt_n)	4.74×10^{-5}	4.00×10^{-6}	4.00×10^{-8}
máx(Δt_n)	6.79×10^{-4}	1.11×10^{-3}	1.53×10^{-3}

Tabla 1: Valores mínimos y máximos de Δt_n para el método de Verlet adaptativo explícito, $h = 4 \times 10^{-4}$ y las 3 excentricidades estudiadas.

vamos que cuanto mayor es la excentricidad e , el método requiere el uso de longitudes de paso menores en la variable original. Vemos que para $e = 0.65$ el mínimo Δt_n utilizado es del orden de 10^{-5} , en el caso de $e = 0.9$ es del orden de 10^{-6} y en el caso de $e = 0.99$ es del orden de 10^{-8} . Por otro lado, los valores máximos de Δt_n crecen ligeramente al aumentar la excentricidad, por lo que el cociente entre el máximo Δt_n y el mínimo Δt_n es mayor cuando la excentricidad es más alta. Esto quiere decir que cuando e es muy próxima a 1, hay zonas muy difíciles de integrar que requieren pasos en t muy pequeños (cerca de 0 y de 2π), pero al mismo tiempo hay otras zonas en las que la solución varía muy lentamente y se pueden usar pasos mucho mayores (cerca de π), como se aprecia en la Figura 12.

Referencias

- [1] M.P. Calvo, M.A. López-Marcos y J.M. Sanz-Serna. “Variable step implementation of geometric integrators”. En: *Appl. Numer. Math.* **28** (1998), págs. 1-16.
- [2] B. Cano y J.M. Sanz-Serna. “Error growth in the numerical integration of periodic orbits, with application to Hamiltonian and reversible systems”. En: *SIAM J. Numer. Anal.* **34** (1997), págs. 1391-1417.
- [3] O. González, D.J. Higham y A.M. Stuart. “Qualitative properties of modified equations”. En: *IMA J. Numer. Anal.* **19** (1999), págs. 169-190.
- [4] E. Hairer, Ch. Lubich y G. Wanner. *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer, 2006.
- [5] E. Hairer, Ch. Lubich y G. Wanner. “Geometric numerical integration illustrated by the Störmer-Verlet method”. En: *Acta Numerica* **12** (2003), págs. 399-450.
- [6] W. Huang y B. Leimkuhler. “The adaptive Verlet method”. En: *SIAM J. Sci. Comput.* **18** (1997), págs. 239-256.
- [7] R.I. McLachlan y G.R.W. Quispel. “Splitting methods”. En: *Acta Numerica* **11** (2002), págs. 341-434.
- [8] J.M. Sanz-Serna y M.P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Problems*. Chapman & Hall, 1994.
- [9] G. Strang. “On the Construction and Comparison of Difference Schemes”. En: *SIAM J. Numer. Anal.* **5** (1968), págs. 506-517.

A. Código de los métodos de la Sección 5

En este Apéndice incluimos las funciones empleadas para los experimentos numéricos de la Subsección 5.3 utilizando lenguaje Python.

A.1. Método de Verlet de paso fijo (2.10)

```
def solveSV10(q0, v0, h, N, UU, f, T, e):
    t = Series([0])
    q = Series([q0])
    v = Series([v0])

    n_f = 0
    f_0 = f(q.iloc[-1])
    n_f = n_f + 1
    h2 = h/2
    for i in range(N):
        q_0 = q.iloc[-1]
        v_0 = v.iloc[-1]

        v_12 = v_0 + h2*f_0
        q_1 = q_0 + h*v_12
        f_1 = f(q_1)
        v_1 = v_12 + h2*f_1
        f_0 = f_1
        n_f = n_f + 1
        t_1 = t_1 + h

        q = q.append(Series([q_1]))
        v = v.append(Series([v_1]))
        t = t.append(Series([t_1]))

    q.iloc[-1] = inter_Her(t1 = t.iloc[-2], t2 = t.iloc[-1],
                          q1 = q.iloc[-2], q2 = q.iloc[-1],
```

```

        v1 = v.iloc[-2], v2 = v.iloc[-1],
        t = T)
v.iloc[-1] = inter_Her(t1 = t.iloc[-2], t2 = t.iloc[-1],
        q1 = v.iloc[-2], q2 = v.iloc[-1],
        v1 = f(q.iloc[-2]), v2 = f(q.iloc[-1]),
        t = T)

t.iloc[-1] = T
return q, v, t, n_f

```

A.2. Método de Verlet de paso fijo (2.11)

```

def solveSV11(q0, v0, h, N, UU, f, T, e):
    t = Series([0])
    q = Series([q0])
    v = Series([v0])

    n_f = 0
    h2 = h/2
    for i in range(N):
        q_0 = q.iloc[-1]
        v_0 = v.iloc[-1]

        q_12 = q_0 + h2*v_0
        v_1 = v_0 + h*f(q_12)
        n_f = n_f + 1
        q_1 = q_12 + h2*v_1
        t_1 = t_1 + h

        q = q.append(Series([q_1]))
        v = v.append(Series([v_1]))
        t = t.append(Series([t_1]))
    q.iloc[-1] = inter_Her(t1 = t.iloc[-2], t2 = t.iloc[-1],
        q1 = q.iloc[-2], q2 = q.iloc[-1],
        v1 = v.iloc[-2], v2 = v.iloc[-1],
        t = T)

```



```

v.iloc[-1] = inter_Her(t1 = t.iloc[-2], t2 = t.iloc[-1],
                      q1 = v.iloc[-2], q2 = v.iloc[-1],
                      v1 = f(q.iloc[-2]), v2 = f(q.iloc[-1]),
                      t = T)

t.iloc[-1] = T
return q, v, t, n_f

```

A.3. Método de Verlet adaptativo implícito

```

def solveIAV(q0, v0, h, N, UU, f, T, e):

    max_iter = 100
    tol = 10**(-10)

    t = Series([0])
    q = Series([q0])
    v = Series([v0])

    n_f = 0

    UU0 = UU(q.iloc[-1], f)
    UU0_2 = sq(UU0)
    UU0_n = sqrt(UU0_2)
    n_f = n_f + 1

    while T > t.iloc[-1]:

        q_0 = q.iloc[-1]
        v_0 = v.iloc[-1]

        calc = tol + 1
        n_iter = 0
        g__1 = 0
        beta = sq(q_0)

```

```

while calc >= tol and n_iter < max_iter:
    g_beta = (beta + UU0_2)**(-1/2)
    beta = sq(v_0) + (h/2*g_beta)**2*UU0_2-h*g_beta*(v_0 @ UU0)
    calc = (h/2)*UU0_n*abs(g_beta-g_1)/(sqrt(beta))
    g_1 = g_beta
    n_iter = n_iter + 1

v_12 = v_0 - h/2*(beta+UU0_2)**(-1/2)*UU0
v_12_2 = sq(v_12)
v_12_n = sqrt(v_12_2)

calc = tol + 1
n_iter = 0
q_1 = q_0
g_0 = (v_12_2+UU0_2)**(-1/2)
g_old = -g_0
while calc >= tol and n_iter < max_iter:
    q_old = q_1
    UU1_2 = sq(UU(q_1, f))
    n_f = n_f + 1
    g_new = (v_12_2+UU1_2)**(-1/2)
    q_1 = q_0+h/2*(g_0+g_new)*v_12
    calc = (h/2*v_12_n*abs(g_new-g_old))/sqrt(sq(q_1))
    g_old = g_new
    n_iter = n_iter + 1

UU1 = UU(q_1, f)
n_f = n_f + 1

UU1_2 = sq(UU1)
g_eval = (v_12_2+UU1_2)**(-1/2)
v_1 = v_12 - h/2*g_eval*UU1

t_0 = t_0 + h/2*(g_0+g_eval)

UU0 = UU1
UU0_2 = UU1_2
UU0_n = sqrt(UU0_2)

```

```

q = q.append(Series([q_1]))
v = v.append(Series([v_1]))
t = t.append(Series([t_0]))

q.iloc[-1] = inter_Her(t1 = t.iloc[-2], t2 = t.iloc[-1],
                      q1 = q.iloc[-2], q2 = q.iloc[-1],
                      v1 = v.iloc[-2], v2 = v.iloc[-1],
                      t = T)
v.iloc[-1] = inter_Her(t1 = t.iloc[-2], t2 = t.iloc[-1],
                      q1 = v.iloc[-2], q2 = v.iloc[-1],
                      v1 = f(q.iloc[-2]), v2 = f(q.iloc[-1]),
                      t = T)

t.iloc[-1] = T
return q, v, t, n_f

```

A.4. Método de Verlet adaptativo explícito

```

def solveEAV(q0, v0, h, N, UU, f, T, e):
    t = Series([0])
    q = Series([q0])
    v = Series([v0])

    n_f = 0

    ro_0 = 1/g(v0, q0, UU, f)
    n_f = n_f + 1

    while T > t.iloc[-1]:
        q_0 = q.iloc[-1]
        v_0 = v.iloc[-1]
        h2 = h/2
        h2ro0 = h2/ro_0
        q_12 = q_0 + h2ro0*v_0
        UU12 = UU(q_12, f)

```

```

n_f = n_f + 1
v_12 = v_0 - h2ro0*UU12
ro_1 = 2/((sq(v_12) + sq(UU12))**(-1/2)) - ro_0
h2r1 = h2/ro_1
v_1 = v_12 - h2r1*UU12
q_1 = q_12 + v_1*h2r1
t_0 = t_0 + h2ro0 + h2r1
ro_0 = ro_1

q = q.append(Series([q_1]))
v = v.append(Series([v_1]))
t = t.append(Series([t_0]))
q.iloc[-1] = inter_Her(t1 = t.iloc[-2], t2 = t.iloc[-1],
                      q1 = q.iloc[-2], q2 = q.iloc[-1],
                      v1 = v.iloc[-2], v2 = v.iloc[-1],
                      t = T)
v.iloc[-1] = inter_Her(t1 = t.iloc[-2], t2 = t.iloc[-1],
                      q1 = v.iloc[-2], q2 = v.iloc[-1],
                      v1 = f(q.iloc[-2]), v2 = f(q.iloc[-1]),
                      t = T)

t.iloc[-1] = T
return q, v, t, n_f

```