

Grau en Matemàtiques

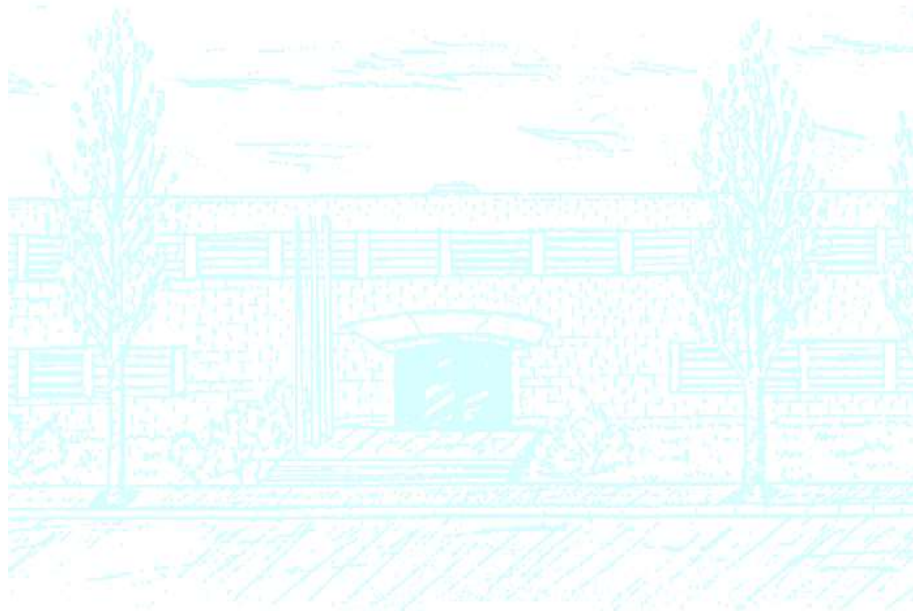
Títol: Estudi numèric de la complexitat de les equacions variacionals d'un sistema diferencial

Autor: Albert García Gutiérrez

Director: Jaume Soler

Departament: Departament d'Enginyeria Civil i Ambiental

Convocatòria: 2017-2018



Estudi numèric de la complexitat de les equacions variacionals
d'un sistema diferencial

Albert Garcia Gutierrez

4 de setembre de 2018

Abstract

En aquest projecte comparem l'actuació de diferents mètodes a l'hora de calcular la matriu de derivades respecte condicions inicials d'una solució d'un sistema diferencial. Primer, es fa un anàlisi numèrica teòrica del problema, presentant els diferents mètodes i la seva complexitat. Finalment, es fan comparacions dels mètodes en casos particulars: calculant una matriu de solució analítica coneguda i calculant una matriu després utilitzada en un exemple d'aplicació del mètode de Newton.

Paraules clau: Mètodes numèrics, Equacions variacionals, Derivada numèrica, Problema restringit de tres cossos.

M'agradaria agrair al meu tutor Jaume Soler la seva paciència i tot el temps que ha dedicat a fer possible aquest projecte.

Índex

Introducció	3
1 Equacions variacionals	5
1.1 Definicions i notació	5
1.2 Generalització a paràmetres	7
2 Derivació numèrica	9
2.1 Interpolació per polinomis	9
2.2 Fòrmules per a derivades numèriques	10
2.3 Error d'arrodoniment	12
3 Estimació teòrica de la complexitat	15
3.1 Número d'equacions	16
3.2 Pas i error	17
4 Comparació dels dos mètodes: solució analítica coneguda	19
4.1 Plantejament del problema	19
4.2 Resultats	21
5 Comparació dels dos mètodes: aplicació al mètode de Newton	25
5.1 Problema restringit de 3 cossos	25
5.2 Òrbites periòdiques	27
5.2.1 Cas $\mu = 0$ i període de Kepler	27
5.2.2 Cas $\mu \neq 0$	29
5.3 Resultats	29
Conclusió	31

Introducció

Conèixer les derivades respecte condicions inicials (o respecte paràmetres) d'una solució d'una equació diferencial ordinària té moltes aplicacions. Les més conegudes són segurament la teoria de perturbacions i el càlcul d'estabilitat. Suposem que tenim un sistema d'EDOs que depèn d'un paràmetre i que la solució per un valor del paràmetre concret (normalment zero) té una expressió senzilla. Si volem conèixer solucions per a paràmetres diferents, però propers a l'anterior, podem fer aproximacions de primer ordre on apareixeran matrius de derivades respecte paràmetres.

Aquesta matriu de derivades veurem que és solució d'un altre sistema diferencial, i per tant, si volguéssim calcular-la experimentalment podríem solucionar amb mètodes numèrics aquest nou problema. De totes maneres, hom es podria preguntar si no seria més senzill calcular els coeficients d'aquesta matriu fent derivades numèriques. L'objectiu d'aquest treball és, doncs, respondre a la pregunta de quin dels dos camins és més eficient a l'hora de calcular la matriu de derivades parcials respecte condicions inicials.

En el primer capítol, definirem amb més precisió què és aquesta matriu de derivades parcials i el sistema del qual és solució: les equacions variacionals.

En el segon, explicarem amb detall els mètodes de derivació numèrica, que estan íntimament relacionats amb l'aproximació de funcions per polinomis. A més, aprofundirem en el fet que la derivació numèrica està mal condicionada, ja que si fem servir valors aproximats podem expandir l'error a gran escala.

Al tercer capítol presentarem la complexitat que trobarem en la comparació d'aquests dos mètodes: el volum de treball que suposa aplicar cada mètode a un sistema i les dificultats que presenta fer derivació numèrica amb valors obtinguts mitjançant mètodes numèrics per a l'integració d'EDOs.

Al quart capítol presentarem els resultats obtinguts fent servir els diferents mètodes per calcular

una matriu de derivades parcials respecte condicions inicials amb expressió analítica coneguda. D'aquesta manera, podrem obtenir taules de temps i error fiables per a cada mètode, que permetran decidir quin és el més precís.

Al cinquè i últim capítol farem una altra comparació dels mètodes, però la matriu de derivades calculada s'utilitzarà per trobar zeros de funcions amb el mètode de Newton. L'objectiu d'aquest apartat no és doncs comparar la precisió amb què es calcula la matriu, sinó la velocitat en què el mètode de Newton convergeix amb matrius que poden ser més o menys precises.

A priori, tot sembla apuntar a que la derivació numèrica, tot i que senzilla d'implementar, no donarà resultats molt precisos. De totes maneres, la resolució de les equacions variacionals, que és un sistema de n^2 equacions quan el sistema original té n equacions, potser representa un cost computacional molt gran i no és un mètode viable.

Capítol 1

Equacions variacionals

1.1 Definicions i notació

Considerem un sistema d'equacions diferencials ordinàries (EDOs) n -dimensional:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x})$$

on $\mathbf{f} : \Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, Ω obert. Suposem \mathbf{f} contínua i localment Lipschitz. Donat que amb aquestes hipòtesis el problema de valor inicial (PVI)

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$$

només té un solució $\mathbf{x}(t)$ (veure [1]) i depèn de (t_0, \mathbf{x}_0) , notem aquesta dependència escrivint:

$$\mathbf{x}(t) := \phi(t; t_0, \mathbf{x}_0)$$

A més, si l'EDO és autònoma ($\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$), llavors $\phi(t; t_0, \mathbf{x}_0) = \phi(t - t_0; 0, \mathbf{x}_0)$ i podem definir $\varphi(t, \mathbf{x}_0) := \phi(t; 0, \mathbf{x}_0)$ el *flux de l'EDO*, que compleix:

- (i) $\varphi(0, \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0$
- (ii) $\varphi(t + s, \mathbf{x}_0) = \varphi(t, \varphi(s, \mathbf{x}_0))$
- (iii) $\varphi(t, \mathbf{x}_0) = \mathbf{x} \Leftrightarrow \varphi(-t, \mathbf{x}) = \mathbf{x}_0$

Considerant $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n)$ i $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, denotem:

$$D_t \mathbf{f} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t}$$

$$D_{\mathbf{x}}\mathbf{f} = \begin{bmatrix} D_{x_1}f_1 & D_{x_2}f_1 & \dots & D_{x_n}f_1 \\ D_{x_1}f_2 & D_{x_2}f_2 & \dots & D_{x_n}f_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ D_{x_1}f_n & D_{x_2}f_n & \dots & D_{x_n}f_n \end{bmatrix}$$

i podem estendre les notacions a ϕ per definir $D_t\phi$, $D_{t_0}\phi$ i $D_{\mathbf{x}_0}\phi$.

Suposem doncs que $D_{\mathbf{x}_0}\phi$ existeix i que podem permutar $\frac{d}{dt}$ i $D_{\mathbf{x}_0}$ en ϕ (això és així si \mathbf{f} és suficientment diferenciable, veure [1]). Derivem respecte \mathbf{x}_0 la identitat $\frac{d}{dt}\phi = \mathbf{f}(t, \phi)$ i obtenim:

$$\frac{d}{dt}D_{\mathbf{x}_0}\phi = D_{\mathbf{x}_0}\left(\frac{d}{dt}\phi\right) = D_{\mathbf{x}_0}\mathbf{f}(t, \phi) = D_{\mathbf{x}}\mathbf{f}(t, \phi) \cdot D_{\mathbf{x}_0}\phi$$

Si ara derivem $\phi(t_0; t_0, \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0$ també respecte \mathbf{x}_0 tenim:

$$D_{\mathbf{x}_0}\phi(t_0; t_0, \mathbf{x}_0) = \text{Id}_n$$

on Id_n és la matriu identitat de dimensió n .

Per tant, fixades unes condicions inicials (t_0, \mathbf{x}_0) i considerant $\mathbf{x}(t) = \phi(t; t_0, \mathbf{x}_0)$ la solució al PVI corresponent, podem definir:

$$Y(t) := D_{\mathbf{x}_0}\phi(t; t_0, \mathbf{x}_0)$$

$$A(t) := D_{\mathbf{x}}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t))$$

ambdues matrius $n \times n$. Lavors, $Y(t)$ és solució del PVI:

$$Y' = A(t) \cdot Y, \quad Y(t_0) = \text{Id}_n \tag{1.1}$$

A (1.1) l'anomenem *equacions variacionals* associades a l'EDO $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x})$ i a les condicions inicials (t_0, \mathbf{x}_0) . Per tant, veiem que la matriu de derivades parcials la podem calcular com a solució d'una EDO lineal homogènia amb condicions inicials no homogènies.

De fet, d'una manera molt similar a l'anterior, i a causa de la diferenciabilitat de ϕ respecte \mathbf{x}_0 , ϕ també és diferenciable respecte t_0 (veure [2]) i la derivada compleix:

$$D_{t_0}\phi(t; t_0, \mathbf{x}_0) = -D_{\mathbf{x}_0}\phi(t; t_0, \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{f}(t_0, \mathbf{x}_0)$$

Tot això es pot resumir al teorema següent:

Teorema: Si $\mathbf{f} \in C^r(\Omega)$ llavors $\phi \in C^r(D)$ on:

$$D := \{(t; t_0, \mathbf{x}_0) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n : (t_0, \mathbf{x}_0) \in \Omega, t \in I(t_0, \mathbf{x}_0)\}$$

i $I(t_0, \mathbf{x}_0)$ és l'interval maximal de definició de $\phi(t; t_0, \mathbf{x}_0)$.

1.2 Generalització a paràmetres

Considerem ara que $\mathbf{f} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ depèn també d'un vector de paràmetres $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$. Donat el lema següent (veure [2]):

Lema: *Un sistema d'EDOs n -dimensional dependent de m paràmetres el podem reescriure com un sistema d'EDOs $(n + m)$ -dimensional sense paràmetres equivalent.*

La diferenciabilitat de $\phi(t; t_0, \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\lambda}_0)$ respecte $\boldsymbol{\lambda}_0$ queda provada com a conseqüència del teorema anterior.

De tota manera, sembla més interessant trobar i definir les anomenades *equacions variacionals respecte paràmetres* (1.2). Per tant, anem a derivar respecte $\boldsymbol{\lambda}_0$ la identitat

$$\frac{d}{dt}\phi = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}_0)$$

i suposant que podem permutar $\frac{d}{dt}$ i $D_{\boldsymbol{\lambda}_0}$ obtenim:

$$\frac{d}{dt}D_{\boldsymbol{\lambda}_0}\phi = D_{\mathbf{x}}\mathbf{f}(t, \phi, \boldsymbol{\lambda}_0) \cdot D_{\boldsymbol{\lambda}_0}\phi + D_{\boldsymbol{\lambda}}\mathbf{f}(t, \phi, \boldsymbol{\lambda}_0)$$

on $D_{\boldsymbol{\lambda}_0}\phi$ és una matriu $n \times m$. Si ara derivem $\phi(t_0; t_0, \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\lambda}_0) = \mathbf{x}_0$ també respecte $\boldsymbol{\lambda}_0$ tenim:

$$D_{\boldsymbol{\lambda}_0}\phi(t_0; t_0, \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\lambda}_0) = 0_{n,m}$$

on $0_{n,m}$ és la matriu $n \times m$ amb tots els coeficients 0.

Per tant, fixades unes condicions inicials $(t_0, \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\lambda}_0)$ i considerant $\mathbf{x}(t) = \phi(t; t_0, \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\lambda}_0)$ la solució al PVI corresponent, definim:

$$\Lambda(t) := D_{\boldsymbol{\lambda}_0}\phi(t; t_0, \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\lambda}_0)$$

$$A(t) := D_{\mathbf{x}}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \boldsymbol{\lambda}_0)$$

$$b(t) := D_{\boldsymbol{\lambda}}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \boldsymbol{\lambda}_0)$$

matrius $n \times m$, $n \times n$ i $n \times m$ respectivament. Aleshores, $\Lambda(t)$ és solució del PVI:

$$\Lambda' = A(t) \cdot \Lambda + b(t), \quad \Lambda(t_0) = 0_{n,m} \tag{1.2}$$

És a dir, la matriu de derivades parcials respecte paràmetres sobre la solució $\mathbf{x}(t)$ la podem obtenir resolent un sistema d'EDOs lineal no homogeni amb condicions inicials homogènies.

Capítol 2

Derivació numèrica

Donada una funció definida en un interval tancat, existeix un polinomi arbitràriament tant a prop com vulguem a cada punt (veure [4]). Donat que la integració i derivació de polinomis és una feina bastant senzilla, no és d'estranyar que per a derivar una funció en un punt fem ús de polinomis interpoladors.

2.1 Interpolació per polinomis

Considerem que tenim una funció $f(x)$ i que coneixem el seu valor en $n + 1$ punts arbitraris diferents ($f(x_i) = f_i$ per $i = 0, 1, \dots, n$). Volem trobar un polinomi que approximi f a tot x i que sigui exacte en els x_i .

Denotem per Π_n el conjunt de polinomis de grau igual o menor que n :

$$P(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

Aleshores, donats x_0, x_1, \dots, x_n punts arbitraris diferents, definim els *polinomis de Lagrange* dels punts $\{x_i\}_{i=0}^n$ com:

$$L_i(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} = \frac{\omega(x)}{(x - x_i)\omega'(x_i)}$$

on $\omega(x) := \prod_{i=0}^n (x - x_i)$.

Observem que $L_i \in \Pi_n$ per tot i i que compleixen la propietat

$$L_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } i = j \\ 0, & \text{if } i \neq j \end{cases}$$

Amb aquesta definició, podem enunciar el teorema següent.

Teorema: Donats $n + 1$ punts $\{(x_i, f_i)\}_{i=0}^n$ tals que $x_i \neq x_j$ si $i \neq j$, existeix un únic polinomi $P \in \Pi_n$ tal que:

$$P(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

De fet, aquest polinomi s'obté amb la fórmula d'interpolació de Lagrange (veure [3]):

$$P(x) = \sum_{i=0}^n f_i L_i(x) = \sum_{i=0}^n f_i \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k}$$

Però P no deixa de ser una aproximació i l'error comès $P(x) - f(x)$ pot arribar a ser molt gran per certes funcions f , i especialment si estem lluny del punt central de l'interval on interpolem. De tota manera, si f és prou suau, podem arribar a acotar l'error. Per exemple:

Teorema: Si la funció f és $n + 1$ cops derivable, aleshores per a tot valor \bar{x} existeix un número $\xi \in I[x_0, \dots, x_n, \bar{x}]$ tal que:

$$f(\bar{x}) - P(\bar{x}) = \frac{\omega(\bar{x})f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

on $I[x_0, \dots, x_n, \bar{x}]$ és el menor interval que conté \bar{x} i tots els x_i , i $\omega(x)$ és el polinomi definit anteriorment.

Amb tot això, podem expressar la funció f com:

$$f(x) = P(x) + \frac{\omega(x)f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \quad (2.1)$$

on $\xi(x)$ denota la dependència de ξ respecte x .

2.2 Fòrmules per a derivades numèriques

Per obtenir fòrmules de derivació generals, considerem que tenim $q + 1$ punts diferents $\{x_i\}_{i=0}^q$ d'un interval I i que la nostra funció es $q + 1$ cops derivable $f \in \mathcal{C}^{q+1}(I)$. Com teniem a (2.1):

$$f(x) = \sum_{k=0}^q f(x_k)L_k(x) + \frac{\omega(x)}{(q+1)!}f^{(q+1)}(\xi(x))$$

amb $\xi(x) \in I$. Si derivem aquesta expressió obtenim:

$$f'(x) = \sum_{k=0}^q f(x_k)L'_k(x) + \frac{\omega'(x)}{(q+1)!}f^{(q+1)}(\xi(x)) + \frac{\omega(x)}{(q+1)!}D_x[f^{(q+1)}(\xi(x))]$$

Però és difícil acotar l'error a causa del terme $D_x[f^{(q+1)}(\xi(x))]$. De tota manera, com que $\omega(x_i) = 0$ per $i = 0, 1, \dots, q$, en els punts x_i l'expressió queda molt més senzilla:

$$f'(x_i) = \sum_{k=0}^q f(x_k)L'_k(x_i) + \frac{f^{(q+1)}(\xi(x_i))}{(q+1)!} \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^q (x_i - x_k)$$

que ens dóna la *fòrmula amb $(q+1)$ -punts* per aproximar $f'(x_i)$:

$$f'(x_i) \approx \sum_{k=0}^q f(x_k)L'_k(x_i) \tag{2.2}$$

i té un error controlat ja que $f^{(q+1)}$ està acotada a l'interval $I[x_0, \dots, x_q]$. Quan, a més, tenim que els punts són equiespaiats ($x_j = x_0 + jh$, per $j = 1, \dots, q$) les fòrmules d'aproximació són de la forma (veure [7]):

$$f'(x_i) \approx \frac{1}{h} \sum_{k=0}^q a_k f(x_k)$$

amb $a_k \in \mathbb{R}$ i $\sum_{k=0}^q a_k = 0$. Els a_k es calculen a partir de les expansions de Taylor dels $f(x_0 + jh)$ (veure [7]). Tenint en compte un altre cop que $f^{(q+1)}$ està acotada a I , l'error és:

$$f'(x_i) - \frac{1}{h} \sum_{k=0}^q a_k f(x_k) = \bar{C}h^q \frac{f^{(q+1)}(\xi(x))}{(q+1)!} = Ch^q$$

Per tant, utilitzant $q+1$ punts equiespaiats en la derivació, podem obtenir fòrmules d'ordre q .

Presentem a continuació les fòrmules de derivació més comunes, que són també les fòrmules utilitzades en la part experimental d'aquest treball.

Comencem per la fòrmula més intuïtiva. Si considerem la definició de derivada de f respecte x_0 :

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

obtenim per $0 < h \ll 1$ la *fòrmula de derivació endavant*¹:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

d'ordre 1. Agafant la fòrmula general (2.2) amb $q = 2$ ($x_0 = \bar{x}$, $x_1 = \bar{x} - h$ i $x_2 = \bar{x} + h$) obtenim la *fòrmula de diferències centrades*:

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{2h}(f(x_0 + h) - f(x_0 - h))$$

¹De fet, també podríem considerar $h < 0$ i obtindriem la fòrmula de derivació endarrere, però no la utilitzarem en aquest treball.

d'ordre 2. Observem que aquesta fórmula, tot i que hauria d'utilitzar $q+1$ punts, només n'utilitza q . Això es pot fer generalment per a q parells i fent la derivada al punt del mig. En particular, considerant $q = 4$ a (2.2) obtenim la *fòrmula de 5-punts per a punts de l'interior*:

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{12h}(f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h))$$

d'ordre 4.

2.3 Error d'arrodoniment

És important remarcar que fent h petita no sempre obtenim millors resultats. Per il·lustrar-ho, considerem la fórmula de diferències centrades:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$

En evaluar la funció f , en realitat cometem un error e i utilitzem valors aproximats \bar{f}_i : $f(x_0 - h) = \bar{f}_1 + e_1$ i $f(x_0 + h) = \bar{f}_2 + e_2$. Per tant, l'error global de l'aproximació de la derivada:

$$f'(x_0) - \frac{f_2 - f_1}{2h} = \frac{e_2 - e_1}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi(x_0))$$

depèn tant de l'error d'arrodoniment (primer terme) com del de truncament (segon terme).

Si suposem que els errors e_i estan acotats per algun valor $\varepsilon > 0$ i que la tercera derivada està acotada per $M > 0$, aleshores:

$$\left| f'(x_0) - \frac{f_2 - f_1}{2h} \right| \leq \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6} M$$

Tenim doncs, que per reduir l'error de truncament $\frac{h^2}{6}M$ hem de reduir la h , però això fa incrementar l'error d'arrodoniment $\frac{\varepsilon}{h}$. La h òptima que redueix aquest error és $h^* = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M}}$, però a la pràctica no sabem les cotes ε i M , i no és possible calcular-la.

Exemple:

Considerem que volem aproximar la derivada de $f(x) = \log(1+x)$ a $x = 1$. La solució analítica és $f'(x) = \frac{1}{1+x}$ i $f'(1) = 0.5$. Fent servir la fórmula de diferències centrades

$$f'(1) \approx \frac{\log(1+x+h) - \log(1+x-h)}{2h}$$

amb diferents h obtenim els resultats de la taula 2.1.

Taula 2.1: Aproximacions de la derivada de $f(x) = \log(1 + x)$ a $x = 1$ mitjançant diferències centrades.

h	$f'(1) \approx$	Error
1e-01	0.500417	-4.17e-04
1e-02	0.500004	-4.17e-06
1e-03	0.500000	-4.17e-08
1e-04	0.500000	-4.17e-10
1e-05	0.500000	-8.83e-12
1e-06	0.500000	-1.44e-11
1e-07	0.500000	2.63e-10
1e-08	0.500000	3.04e-09
1e-09	0.500000	-4.14e-08
1e-10	0.500000	-4.14e-08

Observem que l'error mínim l'obtenim amb $h = 10^{-5}$. Per h més grans l'error en la derivació és més gran, i per h més petites és l'error d'arrodoniment el que domina i ens dona una mala aproximació.

Capítol 3

Estimació teòrica de la complexitat

El problema que se'ns presenta és simple, donada la solució general $\phi(t; t_0, \mathbf{x}_0)$ d'una EDO $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x})$, volem calcular la derivada de ϕ respecte les condicions inicials \mathbf{x}_0 a temps $t = t^*$. Experimentalment, podem trobar aquesta matriu de dues maneres. La primera és utilitzar mètodes numèrics per a resoldre el PVI de les equacions variacionals (1.1):

$$Y' = A(t) \cdot Y, \quad Y(t_0) = Id_n$$

I la segona és fer servir derivades numèriques. És a dir, cada coeficient de la matriu es calcularia mitjançant una derivada numèrica d'ordre q amb fórmula general:

$$\frac{\partial \phi^i}{\partial x_0^j}(t^*; t_0, \mathbf{x}_0) = \frac{1}{H} \sum_{k=0}^q a_k \phi^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j) \quad (3.1)$$

on $\mathbf{u}_j = (u_j^1, u_j^2, \dots, u_j^n) \in \mathbb{R}^n$ és un vector tal que $u_j^k = \delta_{jk}$, essent δ_{jk} la delta de Kronecker.

Cal observar que per calcular les diferents ϕ^i utilitzades en la derivació, cal resoldre diverses vegades el sistema d'EDOs per a diferents valors inicials. Això implica haver de controlar dos errors (i escollir dos passos) a la vegada: els errors en ϕ , controlats pel pas h utilitzat a la integració de l'EDO, i l'error propi de la derivació, que controlem amb el pas H .

3.1 Número d'equacions

Integració de les equacions variacionals

Hem de resoldre el sistema:

$$\left. \begin{array}{l} Y'(t) = A(t) \cdot Y(t) \\ Y(t_0) = Id_n \end{array} \right\} n^2 \text{ equacions}$$

Però $A(t)$ depèn de la posició i del temps. Per tant, hem de resoldre l'EDO original a la vegada:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \end{array} \right\} n \text{ equacions}$$

I en total tenim $n^2 + n$ equacions a resoldre.

Derivació numèrica

Suposem que utilitzem un mètode d'ordre q per fer la derivada numèrica. Cada columna de la matriu que volem calcular és $\frac{\partial \phi}{\partial x_0^j}(t^*; t_0, \mathbf{x}_0)$. Recordant (3.1), tenim:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_0^j}(t^*; t_0, \mathbf{x}_0) = \frac{1}{H} \sum_{k=0}^q a_k \phi(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j)$$

Per tant, per cada columna j de la matriu necessitem trobar primer $\phi(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j)$ per $k = 0, \dots, q$. Observem que la solució $\phi(t^*; t_0, \mathbf{x}_0)$, corresponent a $k = 0$, apareix per tota j i calculant-la només un cop és suficient. Per tant, tenim que hem de resoldre:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \end{array} \right\} n \text{ equacions}$$

i per cada columna $j = 1, \dots, n$:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j \end{array} \right\} n \text{ equacions per cada } k = 1, \dots, q$$

En total tenim $qn^2 + n$ equacions a resoldre.

De tota manera, com ja hem introduït abans, per q parells podem centrar els punts de tal manera que el cas $k = 0$ no sigui necessari en la fórmula, deixant les equacions a resoldre en qn^2 .

3.2 Pas i error

Suposem que utilitzem un mètode Runge-Kutta (RK) per a la integració de les EDOs. Sigui h el pas fet servir en el RK i H el pas en la derivació numèrica.

Volem calcular $\frac{\partial \phi^i}{\partial x_0^j}(t^*; t_0, \mathbf{x}_0)$ mitjançant la derivació numèrica:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi^i}{\partial x_0^j}(t^*; t_0, \mathbf{x}_0) &= \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\phi^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + H\mathbf{u}_j) - \phi^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0)}{H} \\ &= \frac{1}{H} \sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k \phi^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j) + CH^q \end{aligned} \quad (3.2)$$

amb $\sum_{k=0}^q a_k = 0$, $q_1 + q_2 = q$ i on $\mathbf{u}_j = (u_j^1, u_j^2, \dots, u_j^n) \in \mathbb{R}^n$ és un vector tal que $u_j^k = \delta_{jk}$, essent δ_{jk} la delta de Kronecker.

Però, com ja hem dit anteriorment, els ϕ^i utilitzats no són exactes, sinó que obtenim valors aproximats η^i mitjançant la integració numèrica de diferents sistemes d'EDO. Donat que el conjunt de mètodes RK són consistents i de pas constant, si suposem que fem servir un RK d'ordre p tenim la següent expressió asimptòtica per a l'error global de truncament (veure [6]):

$$\eta^i(t) - \phi^i(t) = e_p^i(t)h^p + E^i(t, h)h^{p+1} \quad (3.3)$$

on $e_p^i(t)$ és diferenciable i compleix $e_p^i(t_0) = 0$ i $E^i(t, h)$ acotada sobre compactes.

Si substituïm (3.3) a (3.2):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi^i}{\partial x_0^j}(t^*; t_0, \mathbf{x}_0) &= \frac{1}{H} \left[\sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k \eta^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j) \right] \\ &\quad - \frac{1}{H} \left[\sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k h^p e_p^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j) + h^{p+1} E^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j) \right] \\ &\quad + CH^q \end{aligned}$$

on el primer terme és el valor que realment calculem, el segon és l'error en la integració numèrica i el tercer l'error degut a la derivada numèrica.

Si fem l'expansió dels termes amb e_p^i respecte H :

$$\begin{aligned}
\sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k h^p e_p^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0 + kH\mathbf{u}_j) &= \sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k e_p^i(t^*; t_0, \mathbf{x}_0) + \sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k kH \frac{\partial e_p^i}{\partial \mathbf{x}_0}(t^*; t_0, \mathbf{x}_0) + O(H^2) \\
&= e_p^i \sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k + \sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k kH \frac{\partial e_p^i}{\partial \mathbf{x}_0} + O(H^2) \\
&= \sum_{k=-q_1}^{q_2} a_k kH \frac{\partial e_p^i}{\partial \mathbf{x}_0} + O(H^2)
\end{aligned}$$

Si suposem que treballem en un espai compacte aquest últim terme el podem acotar i, a més, E^i també està acotat (com hem dit a (3.3)). Així, l'error global ens quedaria:

$$\frac{1}{H}(C_1 H h^p + C_2 h^{p+1}) + C_3 h^q \tag{3.4}$$

amb $C_j \in \mathbb{R}$.

Agafant $H = h$, veiem que l'error queda $Ch^p + C_3 h^q$. Per tant, hem d'agafar $p = q$ si volem mantenir l'ordre q del mètode de derivació.

Capítol 4

Comparació dels dos mètodes: solució analítica coneguda

4.1 Plantejament del problema

Considerem el sistema:

$$\begin{cases} \dot{x} = -y + kx(x^2 + y^2 - 1) \\ \dot{y} = x + ky(x^2 + y^2 - 1) \end{cases} \quad (4.1)$$

amb $k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Fent el canvi a polars $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$ i suposant $r \neq 0$ (per $r = 0$, $x = y = 0 \Rightarrow \dot{x} = \dot{y} = 0$ i és punt d'equilibri) ens queda:

$$\begin{cases} \dot{r} = kr(r^2 - 1) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases}$$

És un sistema desacoblat i de variables separables, i la seva solució analítica és:

$$r(t) = \begin{cases} 1, & \text{si } r_0 = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{1 + (\frac{1}{r_0^2} - 1)e^{2kt}}}, & \text{si } r_0 \neq 1 \end{cases}, \quad \theta(t) = \theta_0 + t$$

Veiem doncs que $r \equiv 0$ i $r \equiv 1$ són les úniques solucions amb radi constant. Per veure l'estabilitat considerem:

$$r'(t) = \frac{k(1 - \frac{1}{r_0^2})e^{2kt}}{(1 + (\frac{1}{r_0^2} - 1)e^{2kt})^{3/2}}$$

Tenim que per $k > 0$, $r'(t) < 0$ si $0 < r_0 < 1$ i $r'(t) > 0$ si $r_0 > 1$, és a dir, l'origen és estable i $r \equiv 1$ inestable. Mentres que per $k < 0$ tenim el contrari, com es mostra a la Figura 4.1.

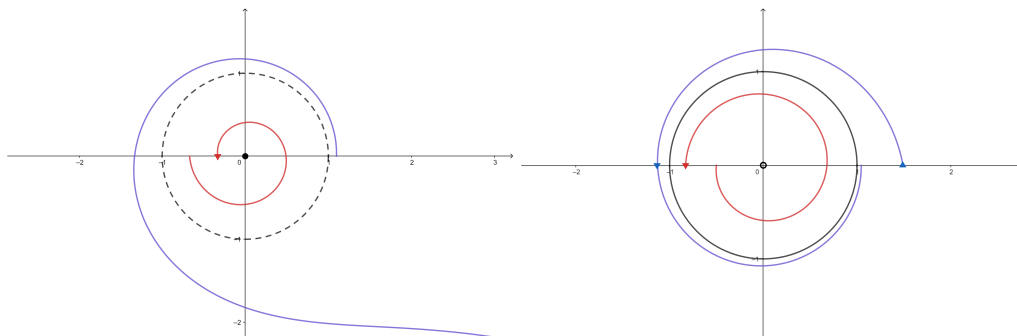


Figura 4.1: Esquema qualitatiu del sistema. A l'esquerra per $k > 0$ i a la dreta per $k < 0$.

Observem que per $r_0 > 1$ i $k > 0$ les solucions tendeixen a infinit. De fet, $r(t)$ deixa d'estar definida quan $1 + (\frac{1}{r_0^2} - 1)e^{2kt} = 0$, i per tant, hi ha un temps límit que és $t_\infty(r_0, k) = \frac{1}{2k} \log(\frac{r_0^2}{r_0^2 - 1})$. Si considerem $k < 0$ però, les solucions estan definides $\forall t > 0$ (tenim un temps límit $t_\infty < 0$ negatiu, és a dir, la solució prové de l'infinit en temps finit).

Si ara desfem el canvi a polars (però fent ús de la solució coneguda), tenim que la solució analítica del sistema (4.1) és:

Si $x_0 = y_0 = 0$: $x(t) = y(t) = 0$

Si $x_0^2 + y_0^2 = 1$:

$$\begin{cases} x(t) = x_0 \cos t - y_0 \sin t \\ y(t) = y_0 \cos t + x_0 \sin t \end{cases}$$

Si $x_0^2 + y_0^2 \neq 0, 1$:

$$\begin{cases} x(t) = \frac{x_0 \cos t - y_0 \sin t}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2} \sqrt{1 + (\frac{1}{x_0^2 + y_0^2} - 1) e^{2kt}}} \\ y(t) = \frac{y_0 \cos t + x_0 \sin t}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2} \sqrt{1 + (\frac{1}{x_0^2 + y_0^2} - 1) e^{2kt}}} \end{cases}$$

La matriu de derivades parcials respecte condicions inicials es pot calcular directament d'aquestes fórmules. No les explicitem aquí però les donem per conegudes a la resta del capítol.

4.2 Resultats

L'objectiu d'aquesta secció és trobar la matriu de derivades parcials respecte condicions inicials del sistema més general:

$$\begin{cases} \dot{x} = -y + kx(x^2 + y^2 - 1) \\ \dot{y} = x + ky(x^2 + y^2 - 1) \\ \dot{u} = -v + mu(u^2 + v^2 - 1) \\ \dot{v} = u + mv(u^2 + v^2 - 1) \end{cases} \quad (4.2)$$

amb certes condicions inicials (x_0, y_0, u_0, v_0) i per un cert temps $t = t^*$, variant els paràmetres k i m comparant l'actuació del mètodes: Integració de les equacions variacionals amb Runge-Kutta d'ordre 4 (d'ara en endavant Mètode 1), derivació amb diferències endavant (Mètode 2), derivació amb diferències centrades (Mètode 3) i derivació amb 5 punts (Mètode 4).

Cas $k > 0$ i $m > 0$

Recordem que amb aquests paràmetres tenim que als dos sistemes la solució de radi 1 és inestable, i per tant, hi haurà un temps límit. Fixem però, les condicions inicials $(x_0, y_0, u_0, v_0) = (1, 1, -0.5, -0.5)$ i obtenim les taules de errors següents:

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.025$	$h = 0.0125$	$h = 0.0063$
Mètode 1	1.43e-02	1.69e-03	1.47e-04	5.60e-06	4.43e-07
Mètode 2	8.54e-01	3.72e-01	1.75e-01	5.02e-02	2.58e-02
Mètode 3	1.52e-01	3.46e-02	8.27e-03	9.45e-04	2.49e-04
Mètode 4	1.22e-02	2.56e-04	5.86e-05	4.06e-06	3.37e-07

Taula 4.1: Error per a $k = 2$, $m = 2$ i $t^* = 0.0866$.

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.025$	$h = 0.0125$	$h = 0.0063$
Mètode 1	1.18e-04	3.54e-06	2.44e-07	1.58e-08	1.10e-09
Mètode 2	8.29e-01	2.13e-01	1.02e-01	5.02e-02	2.58e-02
Mètode 3	1.36e-01	1.51e-02	3.76e-03	9.39e-04	2.49e-04
Mètode 4	2.88e-02	4.05e-04	2.46e-05	1.53e-06	1.05e-07

Taula 4.2: Error per a $k = 0.5$, $m = 0.5$ i $t^* = 0.3466$.

La taula de temps per al primer cas és:

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.025$	$h = 0.0125$	$h = 0.0063$
Mètode 1	0.0039	0.0008	0.0012	0.0016	0.0049
Mètode 2	0.0024	0.0008	0.0015	0.0020	0.0069
Mètode 3	0.0031	0.0011	0.0021	0.0030	0.0124
Mètode 4	0.0045	0.0019	0.0036	0.0091	0.0214

Taula 4.3: Temps per a $k = 2$, $m = 2$ i $t^* = 0.0866$.

Cas $k > 0$ i $m < 0$

Amb aquests paràmetres tenim un sistema estable i un d'instable. Les combinacions ara són molt més nombroses, donat que podem agafar el radi inicial del primer sistema dins o fora de la circumferència de radi 1, i el mateix per al segon. A la realitat però, és el sistema instable el que domina i fa variar l'error depenent de si comença fora de la circumferència (i tendeix a infinit) o si comença dins (i tendeix a un punt). Fixem ara els paràmetres $k = 0.5$ i $m = -0.5$, i mostrem les taules d'error per a diferents condicions inicials:

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.025$	$h = 0.0125$	$h = 0.0063$
Mètode 1	1.18e-04	3.54e-06	2.44e-07	1.58e-08	1.10e-09
Mètode 2	8.29e-01	2.13e-01	1.02e-01	5.02e-02	2.58e-02
Mètode 3	1.36e-01	1.51e-02	3.76e-03	9.39e-04	2.49e-04
Mètode 4	2.88e-02	4.05e-04	2.46e-05	1.53e-06	1.05e-07

Taula 4.4: Error per $(x_0, y_0, u_0, v_0) = (1, 1, -0.8, 0)$ i $t^* = 0.3466$.

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.025$	$h = 0.0125$	$h = 0.0063$
Mètode 1	8.67e-07	5.42e-08	3.35e-09	2.09e-10	1.35e-11
Mètode 2	4.15e-01	1.70e-01	7.84e-02	3.76e-02	1.86e-02
Mètode 3	9.57e-02	2.20e-02	5.46e-03	1.35e-03	3.41e-04
Mètode 4	7.32e-02	2.54e-03	1.46e-04	8.75e-06	5.55e-07

Taula 4.5: Error per $(x_0, y_0, u_0, v_0) = (0.8, 0, -0.8, 0)$ i $t^* = 2$.

Cas $k < 0$ i $m < 0$

Ara tenim que totes les solucions tendeixen a la circumferència de radi 1. Fixem les condicions inicials $(x_0, y_0, u_0, v_0) = (1, 1, -0.5, -0.5)$ i obtenim les taules de errors següents:

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.025$	$h = 0.0125$	$h = 0.0063$
Mètode 1	7.39e-04	3.82e-06	6.46e-08	6.56e-09	4.49e-10
Mètode 2	1.47e-01	7.23e-02	3.58e-02	1.78e-02	8.93e-03
Mètode 3	1.42e-02	3.54e-03	8.84e-04	2.21e-04	5.61e-05
Mètode 4	9.48e-04	5.80e-05	3.60e-06	2.25e-07	1.45e-08

Taula 4.6: Error per $k = -2$, $m = -2$ i $t^* = 2$.

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.025$	$h = 0.0125$	$h = 0.0063$
Mètode 1	1.90e-07	1.19e-08	7.50e-10	4.66e-11	3.00e-12
Mètode 2	7.11e-03	3.52e-03	1.77e-03	8.80e-04	4.41e-04
Mètode 3	1.96e-04	4.90e-05	1.24e-05	3.08e-06	7.79e-07
Mètode 4	2.59e-07	1.66e-08	1.07e-09	6.69e-11	4.33e-12

Taula 4.7: Error per $k = -0.01$, $m = -0.01$ i $t^* = 2$.

La taula de temps per al segon cas és:

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.025$	$h = 0.0125$	$h = 0.0063$
Mètode 1	0.0071	0.0086	0.0170	0.0335	0.0654
Mètode 2	0.0077	0.0116	0.0214	0.0415	0.0881
Mètode 3	0.0109	0.0175	0.0340	0.0661	0.1324
Mètode 4	0.0254	0.0437	0.0699	0.1371	0.2703

Taula 4.8: Temps per $k = -0.01$, $m = -0.01$ i $t^* = 2$.

Capítol 5

Comparació dels dos mètodes: aplicació al mètode de Newton

El mètode de Newton és un mètode iteratiu per trobar zeros de funcions. Considerem que tenim la funció $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ i volem trobar \mathbf{x}^* tal que $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = 0$. Donat un punt \mathbf{x}_0 prou a prop de la solució, el mètode ens diu que iterant:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - D\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$$

la successió $\{\mathbf{x}_k\}_k$ convergeix a \mathbf{x}^* . Un gran avantatge d'aquest mètode és que convergeix a la solució encara que la matriu $D\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)^{-1}$ tingui bastant d'error. De fet, fins i tot es pot utilitzar una matriu constant, però la convergència és més lenta.

L'objectiu d'aquest capítol és plantejar un problema on trobar un zero d'una funció al qual poguem aplicar el mètode de Newton, i que a la matriu $D\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ apareguin derivades parcials respecte condicions inicials d'algun altre problema. Així, podem comparar l'eficàcia dels dos mètodes en un context on, aparentment, l'error final en la matriu de derivades sembla menys important que la rapidesa en calcular-les.

5.1 Problema restringit de 3 cossos

Definim el Problema restringit de tres cossos (PR3C) de la manera següent (veure [9]): *Dos cossos giren al voltant del seu centre de masses en òrbites circulars sota la influència de la força gravitacional mútua. Un tercer cos (atret pels dos cossos anteriors, però sense influir en el seu*

moviment) es mou dins el pla definit pels dos cossos en rotació. El PR3C tracta de descriure el moviment d'aquest tercer cos.

Aquest problema es pot plantejar de moltes maneres: amb variables físiques (dimensionals) o variables sense dimensions, i amb un sistema de referència sideral o un sistema sinòdic ¹. Per practicitat, només tractarem el cas sense dimensions, però sí que plantejarem el problema amb els dos tipus de sistemes de referència.

Equacions del moviment: sistema sideral

En un sistema de coordenades (ξ, η) inercial on l'origen és el centre de masses dels dos cossos en rotació, les equacions del moviment del tercer cos són:

$$\begin{cases} \ddot{\xi} = -[\mu_1 \frac{(\xi - \mu_2 \cos t)}{\rho_1^3} + \mu_2 \frac{(\xi + \mu_1 \cos t)}{\rho_2^3}] \\ \ddot{\eta} = -[\mu_1 \frac{(\eta - \mu_2 \sin t)}{\rho_1^3} + \mu_2 \frac{(\eta + \mu_1 \sin t)}{\rho_2^3}] \end{cases} \quad (5.1)$$

on t és la variable temps, μ_1, μ_2 són les masses del primer i segon cos respectivament (a més, compleixen que $\mu_1 + \mu_2 = 1$), i ρ_1, ρ_2 estan definides per:

$$\begin{aligned} \rho_1^2 &= (\xi - \mu_2 \cos t)^2 + (\eta - \mu_2 \sin t)^2 \\ \rho_2^2 &= (\xi + \mu_1 \cos t)^2 + (\eta + \mu_1 \sin t)^2 \end{aligned}$$

Equacions del moviment: sistema sinòdic

En un sistema de coordenades (x, y) amb el mateix origen que (ξ, η) , que rota a la mateixa velocitat angular que els dos cossos en rotació, les equacions del moviment del tercer cos són:

$$\begin{cases} \ddot{x} - 2\dot{y} = -[\frac{\mu_1(x - \mu_2)}{r_1^3} + \frac{\mu_2(x + \mu_1)}{r_2^3}] + x \\ \ddot{y} + 2\dot{x} = -[\frac{y\mu_1}{r_1^3} + \frac{y\mu_2}{r_2^3}] + y \end{cases} \quad (5.2)$$

on μ_1, μ_2 són les mateixes que a (5.1) i r_1, r_2 estan definits per:

$$\begin{aligned} r_1^2 &= (x - \mu_2)^2 + y^2 \\ r_2^2 &= (x + \mu_1)^2 + y^2 \end{aligned}$$

Fixem-nos que en els dos cassos la condició $\mu_1 + \mu_2 = 1$ ens permet definir $\mu_2 = \mu$ i $\mu_1 = 1 - \mu$. D'aquesta manera, sota les condicions que s'ha plantejat el problema, en el sistema sideral el primer cos està en la circumferència de radi μ i el segon en la de radi $1 - \mu$, i en el sistema sinòdic fixem el primer cos en la posició $P_1(\mu, 0)$ i el segon a $P_2(\mu - 1, 0)$ com a la Figura 5.1.

¹El sistema de referència sideral o inercial és aquell que ni rota ni accelera respecte d'un punt de referència. En canvi, al sistema de referència sinòdic els eixos de coordenades roten respecte un punt de referència.

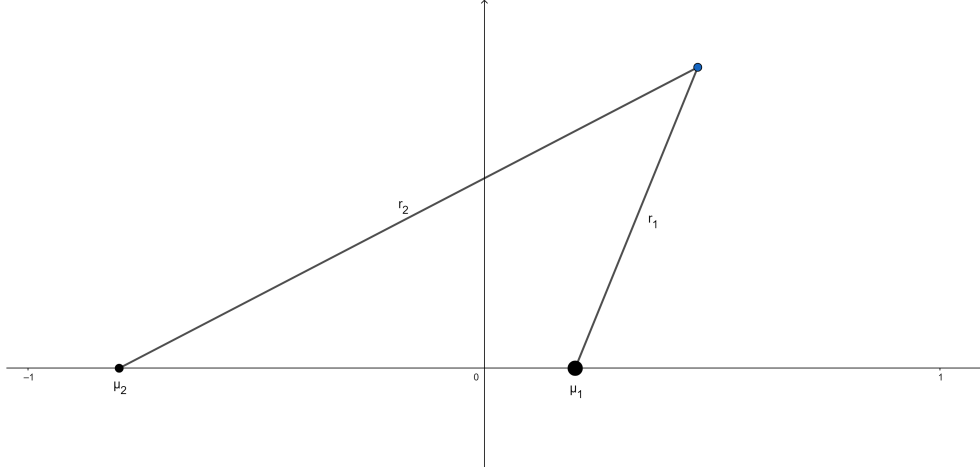


Figura 5.1: Plantejament del PR3C en el sistema de coordenades sinòdic.

5.2 Òrbites periòdiques

5.2.1 Cas $\mu = 0$ i període de Kepler

Considerem primer de tot que $\mu = 0$. És a dir, $\mu_1 = 1$ i $\mu_2 = 0$. Només tenim un cos a l'origen de massa 1 i el cos lliure sense massa amb equacions del moviment:

$$\ddot{\xi} = -\frac{\xi}{\rho^3}, \quad \ddot{\eta} = -\frac{\eta}{\rho^3} \quad (5.3)$$

on $\rho^2 = \xi^2 + \eta^2$, en el sistema sideral. I:

$$\ddot{x} - 2\dot{y} = x\left(1 - \frac{1}{r^3}\right), \quad \ddot{y} + 2\dot{x} = y\left(1 - \frac{1}{r^3}\right) \quad (5.4)$$

on $r^2 = x^2 + y^2$, en el sistema sinòdic.

Les equacions (5.3) i (5.4) de fet representen les equacions del moviment per un cos dins el problema de Kepler de dos cossos. Les solucions de (5.3) són conegudes i són còniques (circumferències, el·lipses, paràboles i hipèrboles). Ens centrarem en les solucions circulars ja que, a part de ser periòdiques, quan considerem el sistema de referència sinòdic segueixen sent solucions circulars però de diferent període (mentre que les el·lipses, en canviar el sistema de referència poden deixar de ser periòdiques).

Considerem doncs, el Hamiltonià del problema per a $\mu = 0$ en el sistema sideral (veure [9]), fent el canvi a polars $\xi = \rho \cos \phi$, $\eta = \rho \sin \phi$:

$$H = \frac{1}{2}\left(p_\rho^2 + \frac{p_\phi^2}{\rho^2}\right) - \frac{1}{\rho}$$

que ens dóna les equacions:

$$\begin{cases} \dot{\rho} = \frac{\partial H}{\partial p_\rho} = p_\rho & \begin{cases} \dot{p}_\rho = -\frac{\partial H}{\partial \rho} = \frac{p_\phi^2}{\rho^3} - \frac{1}{\rho^2} \\ \dot{p}_\phi = -\frac{\partial H}{\partial \phi} = 0 \end{cases} \\ \dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial p_\phi} = \frac{p_\phi}{\rho^2} \end{cases}$$

Tenim $\dot{p}_\phi = 0 \Rightarrow p_\phi = \dot{\phi}\rho^2 \equiv \text{moment angular}$ és constant. Si volem trobar solucions circulars necessitem $\dot{\rho} = p_\rho = 0 \Rightarrow \dot{p}_\rho = 0 \Rightarrow p_\rho^2 = \rho$. Per tant, donat un radi inicial $\rho(0) = \rho_0$, la solució circular ha de complir: $p_\phi = \rho_0^{1/2}$ i $\dot{\phi} = \pm\rho_0^{-3/2}$ constants.

Finalment, si volem trobar el període, apliquem la fórmula $\|\dot{\phi}\| \cdot T = 2\pi$ i obtenim el *període de Kepler*:

$$T_K = \frac{2\pi}{\rho_0^{-3/2}} \quad (5.5)$$

Com més endavant veurem, ens interessa plantejar el problema amb unes condicions inicials concretes: la partícula es troba inicialment en l'eix d'abscisses i té una velocitat inicial perpendicular a aquest eix i positiva. Traduint això a les coordenades (ξ, η) , tenim que les condicions inicials per solucions circulars són:

$$\xi_0 = \pm\rho_0, \quad \eta_0 = 0, \quad \dot{\xi}_0 = 0, \quad \dot{\eta}_0 = \rho_0^{-1/2} \quad (5.6)$$

Considerem ara el Hamiltonià del mateix problema però en el sistema sinòdic, fent el canvi $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$:

$$H = \frac{1}{2}(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}) - p_\theta - \frac{1}{r}$$

que ens dóna les equacions:

$$\begin{cases} \dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = p_r & \begin{cases} \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\theta^2}{r^3} - \frac{1}{r^2} \\ \dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = 0 \end{cases} \\ \dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{r^2} - 1 \end{cases}$$

Com volem solucions circulars, fixem $\dot{r} = p_r = 0 \Rightarrow \dot{p}_r = 0 \Rightarrow p_\theta^2 = r$. Per tant, donat un radi inicial $r(0) = r_0$ necessitem $p_\theta = r_0^{-1/2}$ i $\dot{\theta} = \pm r_0^{-3/2} - 1$ per tal de tenir solucions circulars.

El període d'aquesta solució serà:

$$\tilde{T}_K^+ = \frac{2\pi}{r_0^{-3/2} - 1}, \quad \tilde{T}_K^- = \frac{2\pi}{r_0^{-3/2} + 1} \quad (5.7)$$

on \tilde{T}_K^+ és per solucions $\dot{\theta} > 0$ i \tilde{T}_K^- és per solucions $\dot{\theta} < 0$.

Com en el cas anterior, ens interessen unes condicions inicials particulars: posició inicial a l'eix d'abscisses i velocitat inicial perpendicular a aquest eix i positiva. En les coordenades (x, y) ens queda:

$$x_0 = \pm r_0, \quad y_0 = 0, \quad \dot{x}_0 = 0, \quad \dot{y}_0 = r_0^{-1/2} - r_0 \quad (5.8)$$

5.2.2 Cas $\mu \neq 0$

Quan $\mu \neq 0$ la discussió anterior no es pot dur a terme a causa de que les equacions del moviment de la partícula són molt més complicades i no trobem solucions analítiques.

De tota manera, es pot demostrar mitjançant el mètode de la continuació analítica que també existeixen solucions periòdiques per a paràmetres μ suficientment propers a 0, però la demostració queda fora de l'objectiu d'aquest treball (es pot trobar a [9]).

5.3 Resultats

En aquest apartat trobar experimentalment òrbites periòdiques per a $\mu \neq 0$.

Considerem que el tercer cos es troba al punt inicial $(x_0, 0)$. Sabem que per $\mu = 0$, imposant $(\dot{x}_0, \dot{y}_0) = (0, \frac{1}{\|x_0\|} - \|x_0\|)$, tenim que a temps $t = \frac{T_k}{2}$ la partícula ha fet mig cicle. Per tant, $(x, y, \dot{x}, \dot{y})(\frac{T_k}{2}) = (-x_0, 0, 0, -\dot{y}_0)$.

Considerant la mateixa partícula $(x_0, 0)$ amb $\mu \neq 0$, han d'existir un temps $t = T^*$ i una velocitat inicial \dot{y}_0^* tals que $(x, y, \dot{x}, \dot{y})(\frac{T^*}{2}) = (x(\frac{T^*}{2}), 0, 0, \dot{y}(\frac{T^*}{2}))$.

Definint la funció:

$$\mathbf{f}(T, \dot{y}_0) = \begin{pmatrix} y(x_0, y_0, \dot{x}_0, \dot{y}_0, T) \\ \dot{x}(x_0, y_0, \dot{x}_0, \dot{y}_0, T) \end{pmatrix}$$

per els valors T^* i \dot{y}_0^* es complirà que $\mathbf{f}(\frac{T^*}{2}, \dot{y}_0^*) = 0$.

Per trobar-los experimentalment, considerem el mètode de Newton següent:

$$\begin{pmatrix} T \\ \dot{y}_0 \end{pmatrix}_0 = \begin{pmatrix} \frac{T_k}{2} \\ \frac{1}{\|x_0\|} - \|x_0\| \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} T \\ \dot{y}_0 \end{pmatrix}_{n+1} = \begin{pmatrix} T \\ \dot{y}_0 \end{pmatrix}_n - \begin{pmatrix} \dot{y} & \frac{\partial y}{\partial \dot{y}_0} \\ \ddot{x} & \frac{\partial \dot{x}}{\partial \dot{y}_0} \end{pmatrix}_{(T, \dot{y}_0)_n} \cdot \begin{pmatrix} y \\ \dot{x} \end{pmatrix}_{(T, \dot{y}_0)_n}$$

Els coeficients de la matriu contenen derivades respecte condicions inicials, que calcularem mitjançant els mètodes 1 i 2 del capítol anterior (integració de les equacions variacionals amb un RK d'ordre 4 i la derivació amb diferències endavant) ja que són els més ràpids.

Considerem doncs que el cos es troba a la posició inicial $(x_0, y_0) = (0.4, 0)$. La solució circumferència amb $\mu = 0$ vindria donada per la condició inicial $(\dot{x}_0, \dot{y}_0) = (0, 1.1811)$ i tindria un període de Kepler $T_k = 2.1278$.

Si intentem trobar solucions periòdiques per a $\mu = 0.001, 0.002, \dots, 0.01$ amb la mateixa posició inicial i fent servir un pas 0.00315, obtenim els resultats següents:

Taula 5.1: Resultats obtinguts mitjançant el mètode de Newton per trobar òrbites periòdiques al PR3C amb $\mu \neq 0$ i $(x_0, y_0, \dot{x}_0) = (0.4, 0, 0)$. A l'esquerra, els coeficients necessaris de la matriu del mètode calculats solucionant numèricament les equacions variacionals, i a la dreta mitjançant la derivació endavant.

Mètode 1					Mètode 2				
μ	N	$\frac{T^*}{2}$	\dot{y}_0^*	Temps	μ	N	$\frac{T^*}{2}$	\dot{y}_0^*	Temps
0.001	2	1.058454	1.183609	0.127177	0.001	2	1.057830	1.183612	0.132277
0.002	3	1.053787	1.186083	0.187522	0.002	2	1.054816	1.186116	0.131601
0.003	3	1.049383	1.188557	0.189408	0.003	3	1.050495	1.188563	0.200522
0.004	3	1.047520	1.191031	0.186340	0.004	3	1.047572	1.191049	0.204977
0.005	3	1.042097	1.193507	0.181891	0.005	3	1.044287	1.193544	0.196837
0.006	3	1.037729	1.195984	0.187565	0.006	3	1.037886	1.196047	0.198636
0.007	3	1.036171	1.198498	0.180353	0.007	4	1.034584	1.198473	0.260774
0.008	4	1.032234	1.200946	0.238877	0.008	4	1.031969	1.200968	0.266817
0.009	5	1.027300	1.203426	0.297687	0.009	5	1.027440	1.203430	0.323227
0.010	5	1.023652	1.205910	0.308393	0.010	5	1.023659	1.205924	0.327187

on N és el número d'iteracions al mètode de Newton i Temps el temps transcorregut desde la primera iteració fins a l'última.

Conclusió

Al llarg del treball hem anat veient com la comparació dels mètodes, que podia semblar senzilla, tenia més aspectes a considerar dels esperats.

La derivació numèrica sembla un recurs simple, però obtenir resultats precisos mitjançant aquest mètode no és trivial. La cancel·lació produïda en restar valors molt propers i l'error d'arrodoniment que incrementem en agafar un pas petit, fan que la derivació numèrica sigui un mètode a utilitzar amb precaució.

Fent l'estimació teòrica de la complexitat hem vist que la integració numèrica de les equacions variacionals, que a priori semblava tenir un cost computacional molt major a la derivació, és en realitat un dels mètodes amb menor número d'equacions a resoldre (juntament amb la derivació endavant). Això, juntament amb la dificultat afegida que comporta la derivació numèrica, fan que aquest mètode sembli ser la millor opció. Cal dir que en aquesta anàlisi no es té en compte la complexitat computacional intrínseca de les equacions variacionals (les parcials de la funció f poden ser molt més complexes).

Efectivament, els resultats obtinguts en el capítol 4 ho proven. En el cas $k > 0$ i $m > 0$, les taules 4.1 i 4.2 mostren com la integració de les equacions variacionals (Mètode 1) i la derivació amb 5 punts (Mètode 4) són els mètodes més precisos. De fet, en general el Mètode 1 és més precís, però en els casos en què el Mètode 4 té un error del mateix ordre (com a la taula 4.2), el temps invertit en obtenir aquests resultats és 4 vegades major que els temps invertit pel Mètode 1 (com es pot observar a la taula 4.3). En el cas $k > 0$ i $m < 0$ no hi ha cap dubte que el Mètode 1 dóna el resultat més precís. Cal destacar però, el fet que quan el sistema inestable té unes condicions inicials que acaben tendint a infinit l'error pot arribar a ser 100 major que quan les condicions inicials tendeixen a l'origen (com es pot comprovar a les taules 4.4 i 4.5). Finalment, en el cas $k < 0$ i $m < 0$ obtenim resultats que recolzen les conclusions anteriors. A les taules 4.6, 4.7 i 4.8 podem observar com els Mètodes 1 i 4 són els més precisos, però el Mètode

1 és quatre vegades més ràpid que el 4. A més, com els dos sistemes són estables, la precisió obtinguda és major que quan no ho és.

D'altra banda, els resultats obtinguts en l'últim capítol, a la taula 5.1, ens donen un altre punt de vista. La integració de les equacions variacionals (Mètode 1) i la derivació endavant (Mètode 2) convergeixen als mateixos punts, i la diferència de número d'iteracions i de temps invertit és quasi nul·la. És a dir, el mètode de Newton estan robust (convergeix a la solució desitjada fins i tot amb molt d'error a la matriu derivada) que la diferència d'ordre entre el Mètodes 1 i 2 és imperceptible.

Tenint en compte tot això, podem concloure que si el nostre objectiu és simplement calcular la matriu de derivades respecte condicions inicials d'un sistema, la solució més ràpida i eficaç és sense dubte la resolució de les equacions variacionals. De totes maneres, si el nostre objectiu és calcular aquesta matriu per després utilitzar-la en un mètode prou robust (com és el cas del mètode de Newton) la derivació numèrica endavant és una bona alternativa, ja que tot i ésser molt menys precisa, es triga el mateix i això és prioritari en aquest cas.

Bibliografia

- [1] V. Arnol'd. *Ordinary Differential Equations*, "7.3. Theorems of Continuous and Differentiable Dependence of the Solutions on the Initial Condition". Publisher Nauka, Moscú, 1984.
- [2] Jordi Villanueva: Equacions Diferencials Ordinàries
https://mat-web.upc.edu/people/rafael.ramirez/edos/apunts_edos1.pdf
- [3] J. Stoer, R. Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*, "2. Interpolation". Springer-Verlag, Munchen, 1991.
- [4] Richard L. Burden, J. Douglas Faires. *Numerical Analysis*, "3. Interpolation and Polynomial Approximation", "4. Numerical Differentiation and Integration". CENGAGE Learning, 2001.
- [5] William B. Gragg. *On Extrapolation Algorithms for Ordinary Initial Value Problems*. Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics: Series B, Numerical Analysis, Vol. 2, No. 3, 1965.
- [6] E. Hairer, C. Lubich. *Asymptotic Expansions of the Global Error of Fixed-Stepsize Methods*. 1984.
- [7] Anthony Ralston. *Introducción al Análisis Numérico*, "4. Diferenciación numérica, cuadratura numérica y suma". Limusa, México D.F., 1986.
- [8] Carl D. Murray, Stanley F. Dermott. *Solar System Dynamics*, "3. The Restricted Three-Body Problem". New York, 1999.
- [9] Victor Szebehely. *Theory of Orbits. The Restricted Problem of Three Bodies*, "1. Description of the Restricted Problem", "8. Periodic Orbits". New York, 1967.