Improving the numbers. A new generation of ODE solvers and Computer Assisted Proofs

Marcos Rodríguez

Dirigida por: Roberto Barrio Gil
IUMA y Centro Universitario de la Defensa Academia General Militar

En el estudio de sistemas dinámicos, modelizaciones poblacionales, simulaciones de reacciones y un sinfín de áreas de la ciencia, la formulación última del problema se realiza en términos de ecuaciones diferenciales de naturaleza muy diversa. Podemos encontrarnos con modelos descritos a través de una ecuación diferencial de orden superior, sistemas dinámicos representados por el Hamiltoniano, o incluso por medio de la función potencial, como puede ser el caso del problema del satélite artificial, sin olvidar la clásica formulación como un sistema de ecuaciones diferenciales. Una vez formulado, tanto físicos, químicos como ingenieros e incluso matemáticos, tienen que resolver la ecuación diferencial, atendiendo cada uno a sus necesidades particulares. Aparecen parámetros en las ecuaciones. Unos necesitan unos pocos dígitos de precisión, pues están limitados a la tosquedad de sus instrumentos de medida. Otros quieren mucha precisión, para estudiar propiedades del sistema que no serían perceptibles de otro modo. Un ejemplo concreto de esta necesidad lo podemos encontrar en los trabajos de Divakar Viswanath quien fue capaz de encontrar condiciones iniciales de órbitas periódicas foliadas en el atractor caótico de Lorenz, con más de 500 dígitos de precisión. Para hacerlo tuvo que servirse de ingeniosos argumentos analíticos evitando así una integración en alta precisión que no podía realizar. También, para estudiar la naturaleza fractal del atractor de Lorenz, Viswanath tuvo que realizar estudios analíticos en alta precisión combinándolos con los datos de las órbitas periodicas obtenidas anteriormente. Por otra parte, algunos investigadores quieren saber si la solución depende fuertemente de las condiciones iniciales, otros si depende de los parámetros elegidos. El ejemplo más representativo de esta motivación es el estudio de los exponentes de Lyapunov, como mecanismo de detección de caos de un sistema. Como último ejemplo, en la ingeniería es común el tratar de resolver ecuaciones diferenciales cuyos parámetros o condiciones iniciales están sujetos a incertidumbre, bien por la propia medición, bien por querer conocer el comportamiento del sistema en un rango de valores de los mismos. Para ello, la solución clásica consistía en realizar una simulación estadística de tipo Monte Carlo. Otra solución, más elegante, basada en los trabajos de Martin Berz, consiste en propagar junto con la solución, todas las dependencias respecto de las condiciones iniciales y parámetros y, en el punto final, reconstruir la forma propagada por medio de un polinomio de Taylor multivariado. Así pueden enumerarse diversos requisitos de la comunidad científica. Sin embargo, todos ellos están de acuerdo en una cosa. No quieren perder el tiempo resolviendo la ecuación, y piensan: ¿Y es que eso no puede hacerlo otro? En la actualidad existen numerosos programas capaces de integrar ecuaciones diferenciales, basados en distintos métodos, programados en diversos lenguajes, capaces de realizar diferentes simulaciones, y ligados a gran variedad de licencias, libres y comerciales. No cuesta demasiado darse cuenta de la triste relación existente entre versatilidad, facilidad y funcionalidad de un programa y su tipo de licencia. Ciertamente es fácil entender a los desarrolladores de software, ya que, cuanto más es capaz de hacer un programa, más esfuerzo subyace en él, y menor es el número de programadores dispuestos a regalar el fruto de su trabajo. Ésta fue la motivación de la temática del primer bloque de la presente tesis doctoral. Sin pensar siquiera en el tipo de licencia, en la actualidad, existen muchos programas capaces de resolver ecuaciones diferenciales, respondiendo a algún requisito de los antes mencionados, pero nunca a todos. Todos estos requisitos, posibles para pocos integradores, imposibles para muchos, se juntan en un solo programa dando lugar a un software libre y gratuito capaz de lo posimposible1: TIDES. La gran mayoría de los integradores numéricos se basan en la idea de aproximar el valor de la solución de una ecuación diferencial por una astuta combinación lineal de evaluaciones de la función. La ventaja que esto conlleva es que, para su utilización, un usuario apenas tiene que alimentar el programa con la función que representa su campo vectorial (escrita con una sintaxis natural), sus condiciones iniciales, y los tiempos iniciales y finales de la integración. Sin embargo, los métodos de este tipo quedan lastrados por la rigidez de la representación del campo vectorial y lo que suponía facilidad de uso impide poder 1Vocablo ficticio. Lugar donde lo posible y lo imposible se encuentran 1 calcular dependencias de la solución respecto a las condiciones iniciales y, en el caso de Runge-Kutta y métodos multipaso, ir a precisiones elevadas, ya que el orden del método no puede ser cambiado. Para desarrollar TIDESno podíamos utilizar ninguno de los métodos mencionados, ya que imposibilitarían algunas características que queríamos incluir. Nuestra elección fue el método de Taylor, basado en la fórmula de Taylor en una variable. Para poder utilizar este método, hay que alimentarlo con la función del campo vectorial, así como de sus derivadas hasta el orden deseado. Para poder realizar esto de una manera numéricamente eficiente, es necesario un tratamiento simbólico previo de la función del campo vectorial, lo que supondría un trabajo tedioso que debería realizar cada usuario para resolver su problema. Este primer problema lo resolvimos proveyendo a TIDESde un preprocesador simbólico, escrito en Mathematica, que realiza el trabajo sucio en lugar del usuario. Además, el preprocesador no sólo descompone la función para su tratamiento, sino que con dos sencillas instrucciones crea todo el código C o FORTRAN necesario, listo para compilar. El siguiente paso consistió en modificar el método de Taylor para que pudiera calcular también las dependencias de la solución respecto a las condiciones iniciales, así como implementar los motores de integración en doble precisión y en precisión extendida. El software TIDESes el buque insignia de esta tesis doctoral. Ha sido elaborado, probado y revisado minuciosamente para poder resolver todas las necesidades mencionadas de una manera extremadamente sencilla, pero eficiente y competitivo con otros programas existentes . Además, es distribuido de manera libre y gratuita. La primera parte de la tesis se centra en la descripción básica del método, la extensión a dependencia paramétrica y un profundo estudio de los errores de redondeo del mismo. El segundo bloque de la tesis se ha dedicado a las demostraciones asistidas por ordenador. La motivación de este bloque viene del estudio de los sistemas dinámicos donde, dada la naturaleza no lineal de la mayoría de ellos, abundan las simulaciones numéricas que dan gran información del sistema pero que carecen del rigor tan apreciado por los matemáticos. Son muchos los investigadores que han seguido estas líneas de investigación. En las últimas décadas, la comunidad científica ha empezado a usar los ordenadores para aportar el rigor de un teorema a sus simulaciones. Como casos particulares podemos señalar los trabajos de Galias y Zgliczýnski quienes probaron la existencia de órbitas periódicas particulares, Zgliczýnski, Kapela y Wilczak, quienes probaron bifurcaciones. Zgliczýnski en solitario introdujo los conceptos topológicos para probar la existencia de caos. Y finalmente podríamos remarcar la demostración de la existencia de un atractor caótico hecha por Tucker. Nuestro trabajo se va a enfocar en la demostración de existencia de órbitas periódicas, pero de una manera masiva. Partimos de una colección grande de condiciones iniciales de órbitas periódicas (más de 75000) de dos sistemas dinámicos Hamiltonianos, calculadas por procedimientos numéricos. Nuestro objetivo es pues validar las órbitas y demostrar su estabilidad por medio de las técnicas de demostraciones asistidas por ordenador. En un primer trabajo se han validado los puntos de manera discreta, teniendo familias rigurosas pero discontinuas de órbitas, con un 97también se ha demostrado la estabilidad lineal de las órbitas. En la segunda actuación, se han seleccionado familias aisladas para intentar, y conseguir, demostrarlas de manera continua usando los mismos argumentos de las demostraciones asistidas, pero de una forma más exigente. De esta forma se han conseguido resultados más sólidos, pero no tan extensos como en el estudio discreto. 2