Algoritmos de integración geométrica. Teoría y aplicaciones (MTM2004-00535) Resumen de la actividad investigadora

Integración geométrica es el término que se suele usar para describir los métodos numéricos utilizados para resolver ecuaciones diferenciales que preservan una o más propiedades físicas/matemáticas del sistema de forma exacta (hasta error de redondeo). Este área tiene su origen (a) en el convencimiento de la importancia de preservar las características cualitativas conocidas del problema continuo subyacente cuando la ecuación se discretiza y (b) en el hecho de que los métodos numéricos tradicionales no preservan esas propiedades cualitativas. Como resultado, durante el último decenio han aparecido nuevos esquemas numéricos que preservan las estructuras consideradas relevantes en un problema dado. La preservación de estas propiedades tiene importantes consecuencias de cara a la correcta simulación de sistemas físicos provenientes de áreas tan diversas como la mecánica celeste, los aceleradores de partículas, la dinámica molecular, la mecánica cuántica, la dinámica de fluidos, la dinámica del sólido rígido, etc.

Como valor añadido, resulta que el hecho de preservar las propiedades geométricas del sistema no sólo produce un comportamiento cualitativo mejorado de la aproximación, sino que también permite efectuar una integración a tiempos más largos que los métodos tradicionales, debido al favorable mecanismo existente en la propagación de errores. La base teórica para este superior comportamiento estriba en la idea del análisis regresivo del error. El área de la integración geométrica se ha desarrollado intensamente en los últimos años, habida cuenta de las favorables características de los nuevos métodos y sus potenciales aplicaciones en muy diversos campos.

La actividad del grupo MTM2004-00535 se centra fundamentalmente en:

(a) El diseño y análisis de nuevas familias de integradores geométricos (generalmente de orden alto) para ecuaciones diferenciales ordinarias obtenidos por composición de métodos básicos (de primer o segundo orden).Esto requiere el análisis teórico de la estructura de las condiciones de orden (para simplificar la solución de las mismas) y de los errores de discretizacion (para fijar los criterios de optimización de los parámetros libres que quedan al imponer las condiciones de orden a una determinada familia paramétrica de métodos de integración).

(b) Diseño de métodos de integración especialmente adaptados a ciertos tipos de problemas de evolución que poseen una estructura algebraica particular, como por ejemplo la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo cuando el potencial también depende explícitamente del tiempo.

(c) Desarrollo de nuevas clases de métodos de integración de sistemas Hamiltonianos basados en funciones generatrices.

(d) Análisis de diversas técnicas de paso variable que preservan la estructura del problema en la integración geométrica de ecuaciones diferenciales ordinarias.

(e) Aplicación de las técnicas de integración geométrica al tratamiento numérico de ecuaciones diferenciales cuya solución es altamente oscilatoria. El propósito es construir nuevos algoritmos especialmente adaptados que sean capaces de proporcionar una descripción cualitativa correcta de una manera eficiente.

(f) Comparación realista de la eficiencia de los nuevos métodos de integración geométrica obtenidos con otros normalmente usados en problemas no triviales, así como tratamiento de sistemas complejos a tiempos largos.

Para llevar a cabo estas tareas se requiere:

(i) Programas de cálculo simbólico (p.e., *Mathematica*) sobre ordenadores realmente potentes, dado que la dimensión del espacio de parámetros y el número de ecuaciones de orden (no lineales) a resolver es muy alto y se requieren técnicas especiales (tipo métodos de continuación) para obtener soluciones apropiadas.

(ii) Librerías numéricas (tipo NAG) sobre ordenadores potentes para llevar a cabo las simulaciones de problemas realistas con los nuevos métodos a tiempos largos.

(iii) Interacción con otros grupos interesados en simulaciones de ecuaciones diferenciales ordinarias con cierta estructura geométrica que resulte conveniente preservar a lo largo del tiempo para (a) comparar la eficiencia de diferentes métodos de integración y (b) tratar de diseñar algoritmos especialmente adaptados para su resolución.