

Asociación Argentina
de Mecánica Computacional



Mecánica Computacional Vol XXXV, págs. 1181-1195 (artículo completo)
Martín I. Idiart, Ana E. Scarabino y Mario A. Storti (Eds.)
La Plata, 7-10 Noviembre 2017

APLICACIÓN DE MÉTODOS NUMÉRICOS SIMPLÉCTICOS A SISTEMAS MECÁNICOS CONSERVATIVOS Y NO CONSERVATIVOS

José A. Sánchez^a, Ernesto Farías de la Torre^a y Osvaldo Natali^b

^aFacultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales – Universidad Nacional de Córdoba,
Departamento de Física. Avenida Vélez Sarsfield 1611 (CP 5000) Córdoba. Argentina.
joseasanchez53@yahoo.com.ar, fariasdeltorre@gmail.com

^bFacultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales – Universidad Nacional de Córdoba,
Departamento de Matemática. Avenida Vélez Sarsfield 1611 (CP 5000) Córdoba. Argentina.
nataliosvaldo@hotmail.com

Palabras Clave: Ecuaciones y Sistemas Hamiltonianos, Métodos numéricos simplécticos y geométricos, Péndulo simple, Sistemas no conservativos.

Resumen. En el presente trabajo mostramos la propiedad de simplecticidad –preservación de las áreas- de los sistemas Hamiltonianos y su gran importancia para resolver problemas de sistemas mecánicos conservativos, a través de métodos numéricos simplécticos que aseguran la conservación de la función Hamiltoniana –energía mecánica total– y de las áreas en el espacio de fases, permitiendo buenos resultados después de largos períodos de tiempo. Se toma como ejemplo de aplicación de estas técnicas numéricas al péndulo simple no lineal (en grandes oscilaciones). También se analizan algunas ideas para extender las aplicaciones de estos métodos a sistemas mecánicos no conservativos.

1 INTRODUCCIÓN

Los algoritmos simplécticos, como parte de la integración numérica geométrica, constituyen un método importante en creciente desarrollo para resolver sistemas Hamiltonianos que cubren casi todos los procesos físicos reales con disipación de energía despreciable, tales como el movimiento de cuerpos celestes y satélites artificiales o la dinámica molecular.

Una propiedad fundamental de los sistemas Hamiltonianos es que su flujo en el espacio de fases preserva la estructura geométrica simpléctica. Sin embargo, los métodos numéricos convencionales descuidan esta especial característica y conllevan un aumento ó disipación artificial de la energía mecánica total.

Una ventaja importante de los algoritmos simplécticos es que son adecuados para el seguimiento durante largos períodos de tiempo y para simulaciones cualitativas.

Tomamos como ejemplo el péndulo simple por su importancia como un modelo clásico en ciencia y en educación ya que muchos fenómenos no lineales pueden ser descriptos mediante ecuaciones diferenciales similares y además, porque conocemos su solución exacta expresada mediante funciones elípticas (Ochs, 2011), lo que nos permite determinar el error de los experimentos numéricos ensayados.

1.1 Ecuaciones de Lagrange

Un sistema mecánico de d grados de libertad se describe en cada instante de tiempo t mediante el vector $q = (q_1, \dots, q_d)$ de coordenadas generalizadas (coordenadas cartesianas, ángulos, longitud de arco de una curva, etc.). El vector $\dot{q} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_d)$ representa las velocidades generalizadas.

Para el caso de sistemas conservativos se define la función Lagrangiana $L = T - U$, donde $T = T(q, \dot{q})$ es la energía cinética del sistema mecánico y $U = U(q)$ es la energía potencial del mismo.

El movimiento del sistema se determina resolviendo las ecuaciones de Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad (1)$$

con $k = 1, \dots, d$, a partir de las correspondientes condiciones iniciales.

Ejemplo: Péndulo Simple

Tiene un grado de libertad. Tomamos a θ como coordenada generalizada y a $\dot{\theta}$ como velocidad generalizada.

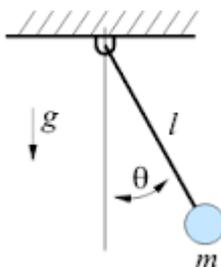


Figura 1: Péndulo Simple

donde,

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\theta}^2 \quad (2)$$

$$U = -mgl \cos \theta \quad (3)$$

$$L = T - U = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\theta}^2 + mgl \cos \theta \quad (4)$$

La ecuación de Lagrange (1), que se expresa:

$$ml^2 \ddot{\theta} + mgl \sin \theta = 0 \quad (5)$$

o equivalentemente,

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0 \quad (6)$$

1.2 Ecuaciones de Hamilton

Hamilton, mediante la introducción de los momentos generalizados o momentos canónicos conjugados $p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}(q, \dot{q})$ simplificó las ecuaciones de Lagrange y las transformó en ecuaciones con una notable simetría.

Definimos el hamiltoniano como función de p y q :

$$H(p, q) := p^T \dot{q} - L(q, \dot{q}) \quad (7)$$

teniendo en cuenta que $\dot{q} \leftrightarrow p$ es una biyección continuamente diferenciable para todo q dada por la transformada de Legendre.

Teorema 1 Las ecuaciones de Lagrange (1) son equivalentes a las ecuaciones de Hamilton:

$$\begin{aligned} \dot{p}_k &= -\frac{\partial H}{\partial q_k}(p, q), \\ \dot{q}_k &= \frac{\partial H}{\partial p_k}(p, q). \end{aligned} \quad (8)$$

con $k = 1, \dots, d$,

Prueba

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p} &= \dot{q}^T + p^T \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} = \dot{q}^T, \\ \frac{\partial H}{\partial q} &= p^T \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = -\frac{\partial L}{\partial q}. \end{aligned} \quad (9)$$

Luego las ecuaciones de Lagrange (1) son equivalentes a las ecuaciones de Hamilton (8).

1.3 Caso de energía cinética cuadrática

Si $T(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} \dot{q}^T M(q) \dot{q}$, entonces $M(q)$ –matriz de masa– es una matriz simétrica definida positiva y $p = M(q) \dot{q}$. Reemplazando \dot{q} por $M(q)^{-1} p$ en la definición (7) de $H(p, q)$ se obtiene:

$$H(p, q) = p^T M(q)^{-1} p - L(q, M(q)^{-1} p) \quad (10)$$

$$\begin{aligned} H(p, q) &= p^T M(q)^{-1} p - \frac{1}{2} p^T M(q)^{-1} p + U(q) \\ &= \frac{1}{2} p^T M(q)^{-1} p + U(q) \\ &= T + U \end{aligned} \quad (11)$$

De donde se obtiene que el hamiltoniano es la suma de la energía cinética y de la energía potencial del sistema mecánico; es decir que H es la energía mecánica total del sistema.

1.4 Integrales primeras

Definición 1. Una función no constante $I(y)$ es una integral primera del sistema de ecuaciones diferenciales $\dot{y} = f(y)$ si toda solución $y(t)$ del sistema satisface $I(y(t)) = \text{constante}$, lo que es equivalente a:

$$I'(y) f(y) = 0 \quad (12)$$

para todo y . En un sistema hamiltoniano, la función hamiltoniana $H(p, q)$ es una integral primera del sistema (9). En efecto, tomando en cuenta que $H'(p, q) = \left(\frac{\partial H}{\partial p}, \frac{\partial H}{\partial q} \right)$ y las ecuaciones (9) $\dot{p} = -H_q$, $\dot{q} = H_p$ se obtiene:

$$\frac{\partial H}{\partial p} \left(-\frac{\partial H}{\partial q} \right)^T + \frac{\partial H}{\partial q} \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)^T = 0 \quad (13)$$

El hecho de que la función hamiltoniana $H(p, q)$ sea una integral primera de las ecuaciones de Hamilton implica, por supuesto, la conservación de la energía mecánica total del sistema.

1.5 Ejemplo

En el caso del péndulo simple tenemos que $q_1 = \theta$ y $p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = ml^2 \dot{\theta}$, por simplicidad designaremos a q_1 y p_1 como q y p , respectivamente. También, supondremos que $m = l = g = 1$. En consecuencia,

$$\begin{aligned}
 H(p, q) &= p^2 - \frac{1}{2} p^2 - \cos(q) \\
 &= \frac{1}{2} p^2 - \cos(q)
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

y las ecuaciones de Hamilton para este caso se escriben:

$$\begin{aligned}
 \dot{p} &= -\sin(q), \\
 \dot{q} &= p.
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

entonces, $H(p, q) = \frac{1}{2} p^2 - \cos(q) = \text{constante}$, es una integral primera del sistema (15).

2 TRANSFORMACIONES SIMPLÉCTICAS

Consideremos paralelogramos bidimensionales en \mathbb{R}^{2d} . Supongamos que el paralelogramo está generado por dos vectores.

$$\begin{aligned}
 \xi &= \begin{pmatrix} \xi^p \\ \xi^q \end{pmatrix}, \\
 \eta &= \begin{pmatrix} \eta^p \\ \eta^q \end{pmatrix}.
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

en el espacio (p, q) con $(\xi^p, \xi^q, \eta^p, \eta^q \in \mathbb{R}^d)$ como $P = \{t\xi + s\eta \mid 0 \leq t \leq 1, 0 \leq s \leq 1\}$. En el caso $d = 1$ consideremos el área orientada:

$$\text{área orientada: } (P) = \det \begin{pmatrix} \xi^p & \eta^p \\ \xi^q & \eta^q \end{pmatrix}
 \tag{17}$$

Para el caso $d > 1$ se reemplaza esta área por la *suma de las áreas orientadas de las proyecciones de P sobre los planos coordenados de P sobre los planos coordenados (p_i, q_i)* ; es decir, por:

$$\omega(\xi, \eta) := \sum_{i=1}^d \det \begin{pmatrix} \xi_i^p & \eta_i^p \\ \xi_i^q & \eta_i^q \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^d (\xi_i^p \eta_i^q - \xi_i^q \eta_i^p)
 \tag{18}$$

(18) define una forma bilineal que actúa sobre vectores de \mathbb{R}^{2d} de gran importancia en los sistemas hamiltonianos. En notación matricial, esta transformación tiene la forma:

$$\omega(\xi, \eta) = \xi^T J \eta
 \tag{19}$$

con $J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$. Donde I es la matriz identidad de dimensión d .

Definición 2 Una transformación lineal $A: \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ se denomina *simpléctica* si

$$A^T J A = J
 \tag{20}$$

o, equivalentemente, si $\omega(A\xi, A\eta) = \omega(\xi, \eta)$ para todo $\xi, \eta \in \mathbb{R}^{2d}$.

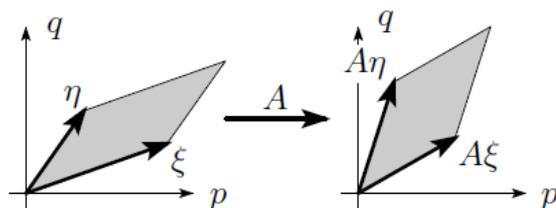


Figura 2: Simplecticidad (preservación del área) de una Transformación lineal

En el caso $d=1$, donde la expresión (p_i, q_i) representa el área del paralelogramo P , la simplecticidad de una transformación lineal A es, por lo tanto, la preservación del área (ver figura 2). En el caso general, ($d > 1$), la simplecticidad significa que la suma de las proyecciones de las áreas orientadas de P sobre (p_i, q_i) es la misma que para los paralelogramos transformados $A(P)$.

Definición 2 (para transformaciones no lineales) Una transformación diferenciable $g: U \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ (donde U es un conjunto abierto) se llama simpléctica si la matriz Jacobiana $g(p, q)$ es simpléctica para todo $(p, q) \in U$. Es decir, si

$$g'(p, q)^T J g'(p, q) = J \quad (21)$$

o

$$\omega(g'(p, q)\xi, g'(p, q)\eta) = \omega(\xi, \eta) \quad (22)$$

para todo $(p, q) \in U$. Lo que significa que toda transformación simpléctica (incluidas las no lineales) preservan el área.

Utilizaremos la notación $y = (p, q)$ y escribiremos el sistema hamiltoniano en la forma

$$\dot{y} = J^{-1} \nabla H(y) \quad (23)$$

donde J es la matriz que vimos antes, y $\nabla H(y) = H'(y)^T$.

El flujo $\varphi: U \subset \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ de un sistema hamiltoniano es una transformación que traslada cada solución en el tiempo t , es decir, $\varphi(p_0, q_0, t) = (p(t, p_0, q_0), q(t, p_0, q_0))$, donde $p(t, p_0, q_0)$, $q(t, p_0, q_0)$ es la solución del sistema con los valores iniciales $p(0) = p_0$, $q(0) = q_0$. Entonces, utilizando la notación $y = (p, q)$ e $y_0 = (p_0, q_0)$ podemos escribir $\varphi(y_0, t) = (p(t, p_0, q_0), q(t, p_0, q_0))$.

Teorema 2 (Poincaré, 1899)

Para cada tiempo t fijo, el flujo $\varphi(y_0, t)$ de un sistema hamiltoniano con una función dos veces continuamente diferenciable $H(y)$ define una transformación simpléctica, es decir

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial y_0}(y_0, t) \right)^T J \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y_0}(y_0, t) \right) = J \quad (24)$$

Prueba: Ver (Hairer et al., 2006, págs. 184-185) o (Arnold, 1989, cap. 8)

Lo que significa que los sistemas hamiltonianos generan flujos simplécticos sobre el espacio de fases.

La ecuación (24) provee una definición intrínseca para sistemas hamiltonianos en el sentido de que cualquier función continuamente diferenciable $f: U \subset \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^{2n}$ puede ser localmente escrita como

$$f = J^{-1} \frac{\partial H}{\partial y}(y) \quad (25)$$

para una adecuada función hamiltoniana $H(y)$ si el flujo generado por $\dot{y} = f(y)$ es simpléctico para todo $H(y)$ y t suficientemente pequeño. Formalizaremos lo expresado anteriormente mediante el siguiente teorema (Hairer y otros 2006, págs. 185-186):

Teorema 3. (Propiedad característica de los sistemas hamiltonianos) Sea $f: U \subset \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^{2n}$ continuamente diferenciable. Entonces, $\dot{y} = f(y)$ es localmente Hamiltoniana si y sólo si su flujo $\varphi(y_0, t)$ es simpléctico para todo $y \in U$ y para todo tiempo t suficientemente pequeño.

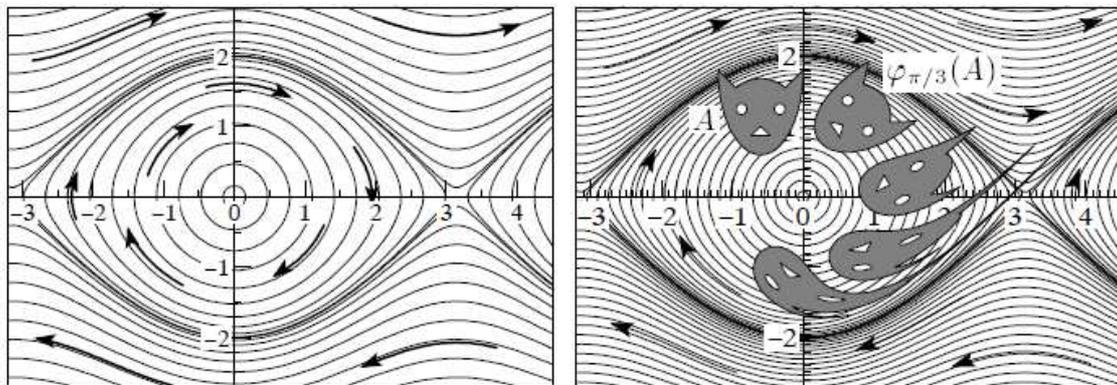


Figura 3: Curvas de nivel $H(p, q) = \text{constante}$ para el problema del péndulo (fig. izq.) y preservación del área de su flujo exacto (fig. der.). De: Hairer et al. (2006)

3 INTEGRADORES NUMÉRICOS SIMPLÉCTICOS

Los métodos numéricos más simples para sistemas de ecuaciones diferenciales $\dot{y} = f(y)$ son el método de Euler *explícito*:

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_n) \quad (26)$$

y el método de Euler *implícito*:

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_{n+1}) \quad (27)$$

Mostraremos la simplecticidad de algunos métodos numéricos cuando son aplicados a sistemas Hamiltonianos en las variables $y = (p, q)$.

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -H_q(p, q), \\ \dot{q} &= H_p(p, q).\end{aligned}\tag{28}$$

ó equivalentemente,

$$\dot{y} = J^{-1}\nabla H(y)\tag{29}$$

donde H_p y H_q denotan los vectores columna de derivadas parciales de la función hamiltoniana $H(p, q)$ con respecto a p y q respectivamente.

Definición 3. Un método numérico de un paso se llama simpléctico si la transformación de un paso

$$y_1 = \mathcal{O}_h(y_0)\tag{30}$$

es simpléctica cuando el método se aplica a un sistema Hamiltoniano suave.

Teorema 4. (de Vogelaere, 1956). Los denominados métodos simplécticos de Euler

$$\begin{aligned}p_{n+1} &= p_n - hH_q(p_{n+1}, q_n), \\ q_{n+1} &= q_n + hH_p(p_{n+1}, q_n).\end{aligned}\tag{31}$$

o

$$\begin{aligned}p_{n+1} &= p_n - hH_q(p_n, q_{n+1}), \\ q_{n+1} &= q_n + hH_p(p_n, q_{n+1}).\end{aligned}\tag{32}$$

son *métodos simplécticos* de orden 1.

Prueba Consideraremos sólo el método de la izquierda. Escribimos esas ecuaciones en la forma:

$$\begin{aligned}p_{n+1} - p_n + hH_q(p_{n+1}, q_n) &= 0, \\ q_{n+1} - q_n - hH_p(p_{n+1}, q_n) &= 0.\end{aligned}\tag{33}$$

diferenciando con respecto a (p_n, q_n) obtenemos:

$$\begin{pmatrix} -I & hH_{qq} \\ 0 & -I - hH_{pq} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} I + hH_{qp}^T & 0 \\ -hH_{pp} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} \\ \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\tag{34}$$

donde todas las derivadas parciales de H son evaluadas en (p_{n+1}, q_n) .

Esta ecuación permite calcular

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} \\ \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I + hH_{qp}^T & 0 \\ -hH_{pp} & I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I & -hH_{qq} \\ 0 & I + hH_{pq} \end{pmatrix} \quad (35)$$

y verificar la condición de simplecticidad:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} \\ \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} \end{pmatrix}^T \mathbf{J} \begin{pmatrix} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} \\ \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} \end{pmatrix} = \mathbf{J} \quad (36)$$

Teorema 5. El método de Euler modificado o método del punto medio

$$y_{n+1} = y_n + h \mathbf{J}^{-1} \nabla H \left(\frac{y_{n+1} + y_n}{2} \right) \quad (37)$$

es un *método simpléctico* de orden 2.

Prueba

Diferenciando, obtenemos:

$$\left(I - \frac{h}{2} \mathbf{J}^{-1} \nabla^2 H \right) \begin{pmatrix} \frac{\partial y_{n+1}}{\partial y_n} \end{pmatrix} = \left(I + \frac{h}{2} \mathbf{J}^{-1} \nabla^2 H \right) \quad (38)$$

luego, también podemos verificar que se cumple la *condición de simplecticidad*:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial y_{n+1}}{\partial y_n} \end{pmatrix}^T \mathbf{J} \begin{pmatrix} \frac{\partial y_{n+1}}{\partial y_n} \end{pmatrix} = \mathbf{J} \quad (39)$$

debido a su simetría el método del punto medio es de orden 2.

Existen otros métodos simplécticos, que no desarrollaremos aquí por razones de brevedad, tales como: el método de Störmer-Verlet (o de salto de rana – *leap frog*) y los métodos de Runge-Kutta simplécticos.

3.1 Aplicaciones al ejemplo del péndulo

Como ya vimos en la ecuación (15), en el caso del péndulo, el Hamiltoniano es $H = T + U = \frac{1}{2} p^2 - \cos(q)$ constante a lo largo de cada una de las trayectorias en el espacio de fases.

Para condiciones iniciales (q_0, p_0) , la energía total está dada por $H_0 = \frac{1}{2} p_0^2 - \cos(q_0) = \text{constante}$. Por lo tanto, $p^2 = 2H_0 + 2\cos(q)$, lo que nos permite dibujar las trayectorias en el espacio de fases.

Si se resuelve el problema utilizando el método de Euler explícito ($q_0 = 0, p_0 = 0.05$) y el

método de Euler implícito ($q_0 = 0, p_0 = 2.2$) con paso de tiempo $h = 1/5$ (ver [4]), en ambos casos el péndulo comienza a moverse desde su posición más baja; cuando el péndulo tiene suficiente cantidad de movimiento $|p_0| > 2$ se generan rotaciones. Por otro lado, el péndulo se balancea si: $|q(t)| < \pi$.

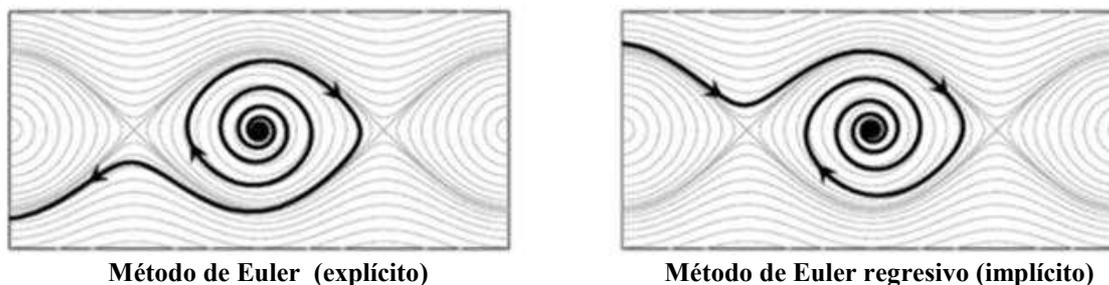


Figura 4: Curvas de nivel del Hamiltoniano, en el caso del péndulo simple y trayectoria en el espacio de fases determinada numéricamente mediante los métodos de Euler explícito e implícito.

Como se ve en la Figura 4 la solución numérica obtenida mediante el método de Euler explícito es inestable y la energía total crece exponencialmente en el tiempo. El péndulo comienza con movimientos oscilatorios muy pequeños. Con el tiempo aumenta más y más su velocidad hasta que el movimiento se convierte en rotatorio. El método de Euler implícito o regresivo genera soluciones estables pero la energía total decae con el avance del tiempo. Ahora, el péndulo arranca con suficiente energía para rotar, pero con el tiempo la energía se disipa hasta que el péndulo casi se detiene. En ambos métodos la energía no se conserva dando soluciones inaceptables para la Física. En muchos problemas dinámicos de la Física y de la Ingeniería tales como el movimiento de satélites o la dinámica molecular es importante utilizar un algoritmo numérico adecuado que conserve la energía durante un largo período de tiempo para llegar a una solución correcta. La utilización de pasos de tiempo pequeños o métodos de alto orden puede mejorar las soluciones, pero la energía puede no conservarse en el tiempo, por eso, es recomendable utilizar los métodos simplécticos que conservan el Hamiltoniano y, además, preservan las áreas en el espacio de fases como ya hemos visto anteriormente.

Cambiando la notación escribimos H_q como $\nabla_q H$ y H_p como $\nabla_p H$, escribimos las ecuaciones de Lagrange en la forma:

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} &= -\nabla_q H, \\ \frac{dq}{dt} &= \nabla_p H. \end{aligned} \quad (40)$$

Si bien los métodos de Euler simplécticos (31) y (32) son implícitos; para Hamiltonianos separables $H(p, q) = T(p) + U(q)$, como en el presente caso del péndulo simple, ambas variantes se convierten en métodos explícitos. En efecto, en este caso $H = T + U$ con $T = \frac{1}{2}p^2$ y $U = -\cos(q)$. En consecuencia, $\nabla_p H(p, q) = \nabla_p T(p)$ y $\nabla_q H(p, q) = \nabla_q U(q)$ y, entonces las ecuaciones de Hamilton se escriben en la forma:

$$\begin{aligned}\frac{dp}{dt} &= -\nabla_q U(q), \\ \frac{dq}{dt} &= \nabla_p T(p).\end{aligned}\tag{41}$$

Los métodos numéricos de Euler explícito (26) y Euler simpléctico (31), para el caso del péndulo, se expresan mediante los sistemas de ecuaciones (42) y (43) respectivamente:

$$\begin{aligned}p_{n+1} &= p_n - h \sin(q_n), \\ q_{n+1} &= q_n + h p_n.\end{aligned}\tag{42}$$

o

$$\begin{aligned}p_{n+1} &= p_n - h \sin(q_n), \\ q_{n+1} &= q_n + h p_{n+1}.\end{aligned}\tag{43}$$

A continuación, se transcribe un programa en lenguaje FORTRAN, cuya ejecución permite efectuar los cálculos numéricos a partir de los métodos anteriores (42) y (43) con datos ($h=0.2, p_0=0.5, q_0=0, n=50$), obteniendo los resultados exhibidos en la tabla que se inserta posteriormente.

Es notable observar el permanente aumento del Hamiltoniano cuando se utiliza el Método de Euler, en tanto que, el mismo se mantiene casi constante cuando se aplica el método de Euler simpléctico.

```
PROGRAM EULER
Integer n
CHARACTER(LEN=90) :: String
String = "(I4,F5.1,6F12.6)"
OPEN ( UNIT=8 , FILE='ResEu.dat', STATUS='UNKNOWN' )
Write (*,*) 'ingrese h,p0,q0,n'
Read (*,*) h,pn,qn,n
Write (8,*) '  n      t      p      q      H      ps      qs      HS '
psn=pn
qsn=qn
DO i=1,n
p=pn-h*sin(qn)
q=qn+h*pn
ps=psn-h*sin(qsn)
qs=qsn+h*ps
hh=0.5*p*p-cos(q)
hhs=0.5*ps*ps-cos(qs)
t=i*h
write (8, string) i, t, p, q, hh, ps, qs, hhs
pn=p
qn=q
psn=ps
qsn=qs
END DO
CLOSE (UNIT=8)
END PROGRAM
```

n	t	p	q	H	ps	qs	HS
1	0.2	0.500000	0.100000	-0.870004	0.500000	0.100000	-0.870004
2	0.4	0.480033	0.200000	-0.864851	0.480033	0.196007	-0.865636
3	0.6	0.440299	0.296007	-0.859577	0.441083	0.284223	-0.862603
4	0.8	0.381959	0.384067	-0.854202	0.385000	0.361223	-0.861353
5	1.0	0.307020	0.460458	-0.848718	0.314316	0.424086	-0.862018
6	1.2	0.218148	0.521862	-0.843098	0.232019	0.470490	-0.864430
7	1.4	0.118449	0.565492	-0.837310	0.141354	0.498761	-0.868185
8	1.6	0.011283	0.589182	-0.831332	0.045686	0.507898	-0.872725
9	1.8	-0.099853	0.591438	-0.825154	-0.051582	0.497582	-0.877409
10	2.0	-0.211364	0.571468	-0.818771	-0.147042	0.468174	-0.881583
11	2.2	-0.319538	0.529195	-0.812162	-0.237294	0.420715	-0.884643
12	2.4	-0.420506	0.465287	-0.805280	-0.318976	0.356919	-0.886105
13	2.6	-0.510242	0.381186	-0.798051	-0.388854	0.279149	-0.885687
14	2.8	-0.584646	0.279138	-0.790388	-0.443962	0.190356	-0.883386
15	3.0	-0.639751	0.162209	-0.782232	-0.481803	0.093996	-0.879518
16	3.2	-0.672051	0.034259	-0.773587	-0.500575	-0.006119	-0.874694
17	3.4	-0.678901	-0.100152	-0.764535	-0.499351	-0.105990	-0.869713
18	3.6	-0.658904	-0.235932	-0.755219	-0.478193	-0.201628	-0.865408
19	3.8	-0.612155	-0.367713	-0.745785	-0.438140	-0.289256	-0.862473
20	4.0	-0.540258	-0.490144	-0.736326	-0.381092	-0.365475	-0.861339
21	4.2	-0.446108	-0.598195	-0.726847	-0.309613	-0.427397	-0.862117
22	4.4	-0.333477	-0.687417	-0.717284	-0.226713	-0.472740	-0.864625
23	4.6	-0.206569	-0.754112	-0.707544	-0.135647	-0.499869	-0.868445
24	4.8	-0.069640	-0.795426	-0.697556	-0.039785	-0.507826	-0.873012
25	5.0	0.073192	-0.809354	-0.687288	0.057471	-0.496332	-0.877684
26	5.2	0.217960	-0.794716	-0.676734	0.152711	-0.465790	-0.881807
27	5.4	0.360693	-0.751124	-0.665873	0.242537	-0.417282	-0.884781
28	5.6	0.497185	-0.678985	-0.654614	0.323593	-0.352564	-0.886134
29	5.8	0.622786	-0.579548	-0.642779	0.392654	-0.274033	-0.885599
30	6.0	0.732315	-0.454991	-0.630122	0.446777	-0.184678	-0.883191
31	6.2	0.820206	-0.308528	-0.616413	0.483503	-0.087977	-0.879245
32	6.4	0.880937	-0.144486	-0.601555	0.501076	0.012238	-0.874387
33	6.6	0.909734	0.031701	-0.585689	0.498628	0.111964	-0.869424
34	6.8	0.903395	0.213648	-0.569203	0.476282	0.207220	-0.865184
35	7.0	0.860990	0.394327	-0.552604	0.435134	0.294247	-0.862350
36	7.2	0.784152	0.566525	-0.536324	0.377130	0.369673	-0.861332
37	7.4	0.676812	0.723355	-0.520552	0.304868	0.430647	-0.862224
38	7.6	0.544431	0.858718	-0.505206	0.221377	0.474922	-0.864825
39	7.8	0.393030	0.967604	-0.490038	0.129923	0.500906	-0.868708
40	8.0	0.228324	1.046210	-0.474789	0.033879	0.507682	-0.873300
41	8.2	0.055218	1.091875	-0.459298	-0.063352	0.495012	-0.877956
42	8.4	-0.122281	1.102919	-0.443517	-0.158360	0.463340	-0.882026
43	8.6	-0.300786	1.078462	-0.427448	-0.247748	0.413790	-0.884914
44	8.8	-0.477032	1.018305	-0.411029	-0.328164	0.348157	-0.886157
45	9.0	-0.647276	0.922899	-0.394028	-0.396398	0.268878	-0.885504
46	9.2	-0.806747	0.793443	-0.375975	-0.449528	0.178972	-0.882990
47	9.4	-0.949302	0.632094	-0.356205	-0.485131	0.081946	-0.878968
48	9.6	-1.067469	0.442234	-0.334053	-0.501502	-0.018355	-0.874079
49	9.8	-1.153061	0.228740	-0.309178	-0.497831	-0.117921	-0.869137
50	10.0	1.198411	0.001872	0.281904	0.474302	0.212781	0.864966

Tabla 1: Resultados de la ejecución del programa EULER.

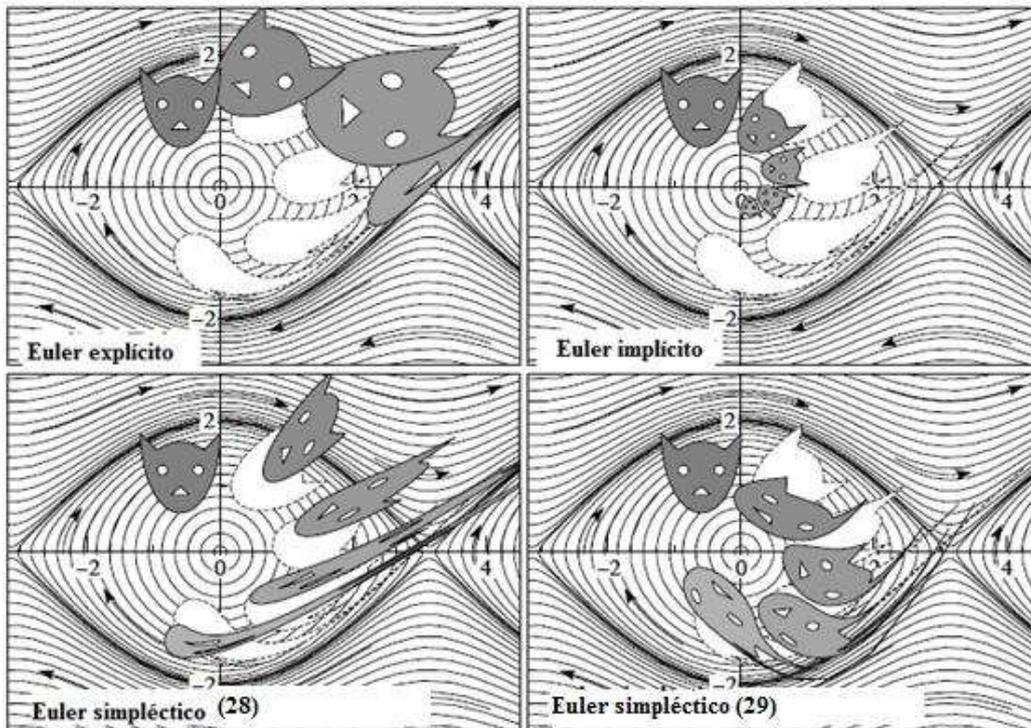


Figure 5: Flujo numérico con tamaño de paso $h = \frac{1}{3}$ para los cuatro “Métodos de Euler”. El flujo exacto está dibujado mediante sombras blancas.

Para fines cualitativos insertamos gráficos que comparan soluciones numéricas con soluciones exactas de los cuatro “Métodos de Euler”, dos no-simplécticos y dos simplécticos; ver Hairer et al. (2006).

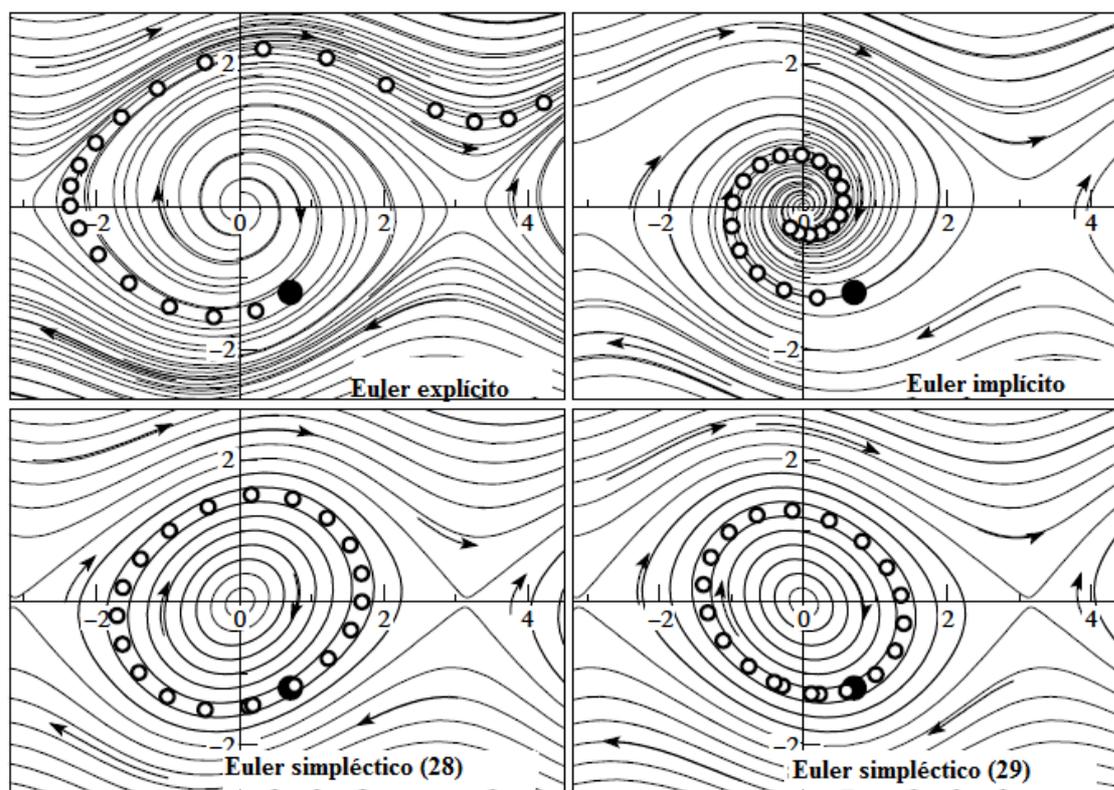


Figura 6: Soluciones numéricas con paso $h = 0.4$ para los cuatro “métodos de Euler” del numeral 3. comparados con la solución exacta

4 SISTEMAS NO CONSERVATIVOS

Comparando varios métodos (Hairer et al., 2006) también puede verse que los métodos simplécticos preservan el área en el diagrama de fases a diferencia de los no-simplécticos. Las soluciones numéricas difieren significativamente de la solución exacta –sombras blancas en la figura–, debido a la elección de un paso de cálculo muy grande.

Se han propuesto varios enfoques para aplicar métodos geométricos simplécticos a sistemas mecánicos no conservativos. En Luo y Guo (2009, 2011) se ha planteado un Hamiltoniano sustituto válido para las condiciones iniciales del sistema de ecuaciones diferenciales y para una curva del espacio de fases.

En Modin y Söderlind (2011) y en Rahrovani et al. (2014) se han propuesto esquemas de integración explícitos y semiexplícitos para sistemas Hamiltonianos perturbados débilmente disipativos, que tienden a la preservación de la estructura simpléctica. Se ha verificado que la evolución de la energía es consistente con la tasa correcta de disipación. En el segundo trabajo se ha aplicado el método, utilizando un integrador exponencial, al problema de carga móvil en el ferrocarril –interacción tren-vía.

Recientemente, Tsang et al. (2015) han propuesto integradores variacionales que conservan varios beneficios de los integradores simplécticos tradicionales.

5 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En el presente trabajo hemos intentado señalar la importancia creciente de la Mecánica Geométrica (Marsden y Ratiu, 1999; Holm, 2011) y, en particular, de los métodos numéricos geométricos que preservan la estructura simpléctica tanto en la Física como en la Ingeniería.

Hemos centrado nuestra atención en los sistemas Hamiltonianos que corresponden a sistemas mecánicos conservativos.

De nuestro trabajo surge también que la teoría matemática y física debe siempre prevalecer por sobre los experimentos numéricos. Mediante un ejemplo muy simple hemos mostrado que, si no se utilizan los métodos adecuados, ello conducirá, luego de largos períodos de tiempo, a soluciones incorrectas, pese al esfuerzo por disminuir el paso de cálculo o el aumento de la precisión.

Asimismo, pretendemos señalar la importancia y utilidad de los esfuerzos recientes orientados a la aplicación de integradores geométricos simplécticos a sistemas mecánicos no conservativos, por su posibilidad de ser utilizados para resolver problemas de Ingeniería.

REFERENCIAS

- Ochs, K. A comprehensive analytical solution of the nonlinear pendulum, págs. 479-490, *European Journal of Physics*, IOP Publishing, 2011.
- Hairer, E. Lubich, C., y Wanner, G. *Geometric Numerical Integration Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer Verlag, 2006.
- Arnold, V.I. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag, 1989.
- Novak, K. *Numerical methods for scientific computing*, USA, 2017.
- Poincaré, H. J. *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, Vol. 3, Gauthiers-Villars, Paris, 1899.
- Marsden, J., Ratiu, T. *Introduction to Mechanics and Symmetry*, Springer, 1999.
- Holm, D. *Geometric Mechanics*, Part II, Imperial College Press, London, 2011.
- Luo, T. y Guo, Y. *Infinite-dimensional Hamiltonian description of a class of dissipative mechanical systems*, ArXiv e-prints, 2009.
- Luo, T. y Guo, Y. *Application of Explicit Symplectic Algorithms to Integration of Damping Oscillators*, ArXiv e-prints, 2011.
- Modin K, y Söderlind G. Geometric integration of Hamiltonian systems perturbed by Rayleigh damping. *BIT Numer Math* 51(4), pp 977-1007, 2011.
- Rahrovani S, Abrahamson T, y Modin K. An efficient exponential integrator for large nonlinear stiff systems part 2: symplecticity global error analysis. *Conference proceedings of the society for experimental mechanics series*, Vol 2, Orlando, pp 269-280, 2014.
- Tsang, D., Galley, C., Stein, L.C., y Turner, A. Symplectic Integrators for general nonconservative systems, *The Astrophysical Journal Letters* 809 (1), L9, 2015.