

REAL ACADEMIA DE CIENCIAS
EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

INTEGRACIÓN GEOMÉTRICA

DISCURSO LEÍDO EN EL ACTO DE SU RECEPCIÓN
COMO ACADÉMICO DE NÚMERO POR EL

EXCMO. SR. D. JESÚS MARÍA SANZ SERNA

Y CONTESTACIÓN DEL

EXCMO. SR. D. AMABLE LIÑÁN MARTÍNEZ

EL DÍA 28 DE NOVIEMBRE DE 2007



MADRID
Domicilio de la Academia
Valverde, 22

Depósito legal: M. 46.709-2007

Imprime:

Realigraf, S. A.

Pedro Tezano, 26. 28039 Madrid

**Excelentísimo Señor Presidente,
Excelentísimos Señores Académicos,
Señoras y señores:**

El ingreso en esta Academia representaría para cualquier investigador español un motivo indudable de satisfacción y hasta de orgullo. En mi caso particular, estos sentimientos se ven intensificados porque, según vengo manifestando desde hace tiempo, creo firmemente que las sociedades científicas están llamadas a desempeñar un papel de creciente relevancia en la vida nacional. La ciencia española ha experimentado un impulso capital gracias, entre otras causas, a las acertadas políticas introducidas en los años ochenta del pasado siglo. Goza hoy nuestro país de un sistema de investigación que empieza a ser comparable con los de nuestros vecinos más avanzados; el seguir progresando requiere, además de los esfuerzos —más o menos individuales— de los propios investigadores, del desarrollo de un tejido científico debidamente articulado mediante sociedades que estructuren dicho sistema. En esta empresa, corresponde a esta Casa un lugar singular y ambicioso, como órgano representativo del conjunto de todas las ciencias. Quede aquí testimonio de mi compromiso de trabajar, en la medida de mis modestas fuerzas, en favor de la ciencia española a través de la Academia que hoy me incorpora.

Sucedo en la medalla número veinte a don Alberto Dou, en situación de supernumerario desde 2004, quien, a su vez y hasta 1962, fue precedido en la misma por don Julio Rey Pastor. No he poseído la fortuna de frecuentar el trato personal del padre Dou, si bien, como todos los matemáticos españoles de mi generación he sido en todo momento consciente del papel que él representó en la apertura de nuestra ciencia a las corrientes internacionales, de modo especial mediante el fomento de la formación en centros extranjeros —por la que, por cierto, yo mismo pasé. Me gustaría subrayar la coincidencia que representa la pertenencia de mi ilustre predecesor a la Compañía de Jesús, cuando debo mi vocación científica a otro jesuita, el padre Carmelo Oñate,¹ con quien, siendo yo estudiante de

¹El padre Oñate falleció el 28 de diciembre de 2005, cuando se estaba con-

bachillerato, pasé innumerables e inolvidables horas en el laboratorio de Física.

No puedo olvidar hacer mención de mis profesores en las Universidades de Valladolid y Dundee, y de mis colaboradores,² a quienes tanto debo. Y, antes de entrar propiamente en materia, deseo agradecer de forma calurosa a los Académicos don Amable Liñán y don Idefonso Díaz las diversas atenciones, siempre por mí inmerecidas, de las que vienen haciéndome objeto.

Hace ahora unos quince o veinte años comenzaron a publicarse ciertos artículos que venían a proponer un nuevo modo de enfocar la integración³ numérica de las ecuaciones diferenciales ordinarias.

cluyendo la redacción de este discurso, que me hubiera gustado que él hubiese leído.

²Expreso aquí mi agradecimiento a mis coautores: L. Abia, E. Alarcón, A. Araújo (Portugal), J. G. Blom (Países Bajos), J. C. Butcher (Nueva Zelanda), M. P. Calvo, B. Cano, I. Christie (Reino Unido–EEUU), J. C. Díaz (EEUU), M. Doblaré, A. Durán, T. Eirola (Finlandia), G. Fairweather (Reino Unido–EEUU), J. de Frutos, G. H. Ganser (EEUU), B. García-Archilla, D. F. Griffiths (Reino Unido), Guo Ben-Yu (China), E. Hairer (Austria–Suiza), W. H. Hundsdorfer (Países Bajos), A. Iserles (Israel–Reino Unido), P. E. Koch (Noruega), S. Larsson (Suecia), J. C. López-Marcos, M. A. López-Marcos, V. S. Manoranjan (Reino Unido–EEUU), A. Marquina, R. J. Y. McLeod (Reino Unido–EEUU), A. R. Mitchell (Reino Unido), J. Ll. Morris (Reino Unido–EEUU), A. Murua, S. P. Nørsett (Noruega), T. Ortega, C. Palencia, A. Portillo, R. D. Skeel (Canadá–EEUU), M. N. Spijker (Países Bajos), A. M. Stuart (Reino Unido), Y. Tourigny (Canadá–Reino Unido), F. Vadillo, J. G. Verwer (Países Bajos). En el caso de M. P. Calvo he de agradecer también su ayuda en la preparación de algunos detalles de este discurso.

³Seguimos la terminología tradicional y universalmente admitida: la palabra *integración* hace referencia a la solución de ecuaciones diferenciales y no al cálculo de integrales, definidas o indefinidas (primitivas). A este cálculo se le denomina, por razones históricas, *cuadratura*, ya que integral se corresponde con área y los antiguos asociaban las áreas de recintos arbitrarios a las de cuadrados (considérese p. ej. la expresión *metros cuadrados*). En especial, los términos *cuadratura del círculo* hacen referencia a un problema clásico de la Matemática griega (dado un círculo en el plano construir con regla y compás un cuadrado de la misma área), por más que en nuestro país se usen como sinónimos de *quimera* o para aludir a intentos de buscar *tres pies a los gatos*. La imposibilidad de la construcción demandada por la cuadratura del círculo sólo se ha establecido en fecha relativamente reciente por Lindemann, quien repara en este discurso en su papel de maestro de Kutta.

Pronto, esas aportaciones fueron haciéndose más y más frecuentes hasta venir a constituir un cuerpo de doctrina bien definido: *la Integración Geométrica* [42]. La buena fortuna, que siempre me ha ayudado, dispuso las cosas de manera que tuve ocasión, primero, de realizar alguna de las contribuciones científicas que dieron origen al campo [80], [99], [100], [81], [82], [83], [84] y, después, de redactar buena parte de la literatura que lo sistematizó [85], [86], [18], [93], [90].⁴ Creo también haber introducido los términos mismos de “Integración Geométrica”,⁵ sin perjuicio de que, como suele ocurrir en estos casos, otras personas puedan haber tenido idéntica iniciativa de modo más o menos independiente.

He elegido la Integración Geométrica como tema del presente discurso de ingreso. Y esto, porque creo —y espero no equivocarme— que puede resultar menos árido que los otros en que he trabajado para un auditorio como éste, ciertamente constituido por científicos, mas no por especialistas en Análisis Numérico. A la relativa amenidad a que aspiro pueden tal vez ayudar dos factores. El primero, que la Integración Geométrica trae su causa no de la lógica interna de la propia Matemática sino de problemas provenientes de ámbitos científicos muy diversos. El otro, que, siendo la Integración Geométrica un paradigma que surge como alternativa o complemento al clásico, conviene conferir a esta exposición cierto carácter histórico, que suele ser bienvenido por la audiencia.

1. El paradigma clásico

1.1. Ecuaciones diferenciales

Comenzaremos por esbozar una somera historia de la integración numérica de las ecuaciones diferenciales, desde sus orígenes en el

⁴Quizá sea oportuno mencionar aquí la invitación que recibí a presentar una conferencia sobre estos aspectos en el International Congress of Mathematicians de Zürich 1994 [88].

⁵Por ejemplo McLachlan y Quispel escriben en [65] “... what is now known as ‘geometric integration’, a term coined by Sanz-Serna.”

siglo XVIII hasta la configuración, en los años cincuenta y sesenta del pasado siglo XX, de lo que llamo el paradigma clásico.

Las ecuaciones diferenciales nacieron en el siglo XVII, en simultaneidad estricta con el Cálculo Infinitesimal [47]. Con frecuencia, la solución de los problemas mecánicos, geométricos o de otra índole que dieron origen a los conceptos de derivada e integral no requiere encontrar una primitiva o una derivada, sino determinar una función desconocida a partir de una relación que la liga con su derivada: en otras palabras, determinar las soluciones de una ecuación diferencial.

Pronto se entendió cómo, sin casi excepción, cada ley de la Física se traduce matemáticamente en una ecuación diferencial, cuyas infinitas soluciones se corresponden con todas las posibles evoluciones del sistema que se estudia. Para identificar la evolución que realmente tiene lugar, es menester complementar la ley física con la especificación del estado del sistema en un instante inicial, es decir, en términos matemáticos, complementar la ecuación diferencial con una condición inicial, para disponer de lo que, en terminología moderna, denominamos un problema de valores iniciales o problema de Cauchy. Son bien conocidos unos párrafos del marqués de Laplace⁶ que vienen a afirmar que el conocimiento de las leyes físicas (ecuaciones diferenciales), junto con el de las condiciones iniciales oportunas, permitiría predecir sin ambigüedad el estado del universo en cualquier tiempo futuro a una mente capaz de integrar problemas de valores iniciales. Es notable que el papel central que las ecuaciones diferenciales poseen en la visión determinista del universo *à la Laplace*, no disminuyó con la introducción en el siglo XX de teorías físicas, como la Mecánica Cuántica, que reconocen un papel al azar: éstas también aparecerán construidas en torno a ecuaciones diferenciales. La Mecánica newtoniana, base de la ciencia moderna y

⁶...una inteligencia que pudiese abarcar todas las fuerzas que animan a la naturaleza y las respectivas situaciones de los entes que la componen —una inteligencia suficientemente vasta para someter estos datos a análisis— abarcaría en la misma fórmula los movimientos de los mayores cuerpos y los de los átomos más ligeros; para ella nada sería incierto y el futuro, como el presente, estarían ante su vista ... (*Essai sur les probabilités* (1795)).

de la cosmovisión de la Ilustración, es considerada desde hace tiempo una mera aproximación; las ideas de Newton sobre las ecuaciones diferenciales siguen poseyendo, por el contrario, plena vigencia.⁷

Visto el papel central que en la aplicación de la Matemática a las ciencias desempeñan las ecuaciones diferenciales, no es de extrañar el enorme esfuerzo que se ha dedicado a la tarea de integrarlas, empezando por las aportaciones de Newton, Leibniz, Johann y Jacob Bernoulli y otros pioneros del Cálculo Infinitesimal (ver p. ej. [45]). A grandes rasgos, se puede decir que las primeras contribuciones buscaron la llamada (de modo confundente⁸) integración elemental, es decir la reducción mediante cambios de variables, manipulaciones algebraicas y otros artificios, a menudo ingeniosos y altamente específicos, a problemas de cuadraturas. La incapacidad de los métodos elementales para integrar algunos problemas importantes pronto fue aparente y se introdujeron técnicas de mayor potencia y generalidad, como la solución por series, usada ya por el propio Newton (*Methodus Fluxionum et Serierum Infinitarum* (1671)), y los métodos numéricos, que consideraremos a continuación.

Aunque nos apartemos brevemente de nuestro hilo conductor, conviene dejar constancia aquí de que la falta de éxito en la integración efectiva de los problemas de valores iniciales, a pesar de la amplia gama de técnicas analíticas y numéricas introducidas en los siglos XVIII y XIX, iba a conducir a importantes desarrollos, dando origen a ramas enteras de la ciencia matemática. Ante todo, la solución por series actúa como uno de los motores para el estudio de las llamadas Funciones Especiales. De otro lado, cuando la solución no puede ser explícitamente exhibida, ni en términos de funciones elementales, ni en términos de series o funciones especiales,

⁷El propio Newton parece haber sido consciente de la excepcional importancia de sus contribuciones en el campo de las ecuaciones diferenciales. Véase a este respecto el comentario de V. I. Arnold [3]: “El descubrimiento fundamental de Newton, el único que él consideró debía mantener secreto y publicó sólo en forma de anagrama es el siguiente *Data aequatione quotcumque fluentes quantitates involvente fluxiones invenire et vice versa.*”

⁸*Elemental* se refiere a la necesidad de restringirse a la clase de funciones llamadas elementales. No debe interpretarse como sinónimo de sencillo o fácil.

se hace preciso indagar su misma existencia y unicidad. Esto suscita una serie de investigaciones que comienzan con Cauchy y que acabarán dando origen al Análisis Funcional. La teoría de los grupos de Lie nace del deseo de caracterizar cuándo es factible la integración elemental. También, y a partir sobre todo de Poincaré y Liapunov, se investigan las propiedades cualitativas de las soluciones, contribuyendo al nacimiento de la Topología y de la moderna teoría de los Sistemas Dinámicos, etc.

1.2. Métodos numéricos

1.2.1. El método de Euler

En general, se llaman *numéricos* [91] aquellos métodos que permiten obtener, aunque sea con carácter aproximado, la solución de un problema matemático mediante el uso de un número finito y practicable de operaciones aritméticas: sumas, restas, multiplicaciones y divisiones. En el estudio de los métodos numéricos entran en consideración tanto la mejor o peor aproximación de la solución calculada, como el mayor o menor coste del cálculo.

En el caso de las ecuaciones diferenciales ordinarias, los métodos numéricos pueden presumir de una genealogía muy distinguida. El primero y más simple fue introducido por Euler en 1768 (*Institutionum Calculi Integralis, Volumen Primum*); aún se emplea en algunos casos y juega todavía un papel destacado en la didáctica del Análisis Numérico.⁹ Puede describirse, como es bien sabido, como el reemplazamiento de la solución por una poligonal, o, alternativamente, como la substitución del verdadero incremento que media entre el estado presente de la solución y el estado futuro por el incremento aproximado correspondiente a la recta tangente (desarrollo de Taylor de primer orden).¹⁰

⁹Una mayor —aunque no excesiva— precisión en esta cuestión y otras puede obtenerse de la consulta de los apéndices al discurso, que no pretenden presentar una visión sistemática, completa o rigurosa de la Integración Geométrica.

¹⁰Los métodos basados en desarrollos de Taylor de orden superior fueron también inventados por Euler.

1.2.2. Métodos lineales multipaso

El sencillo método de Euler puede mejorarse de varias formas alternativas. Una primera idea conduce a los llamados *métodos lineales multipaso*. Los más antiguos de éstos fueron concebidos hacia 1850 por el astrónomo John Couch Adams, más famoso por haber descubierto el planeta Neptuno. Los métodos introducidos por Adams, que hoy siguen siendo de uso ubicuo, aparecen por vez primera en la literatura [5] el año 1883 en un trabajo de F. Bashforth, donde son empleados en el cálculo de la forma de las gotas de un líquido apoyadas sobre una superficie plana.

En los métodos lineales multipaso se obtiene el valor de la solución numérica en un tiempo futuro usando información relativa a la historia reciente de tal solución, sin limitarse, como ocurre en el método de Euler, a información sobre el estado presente de la misma.

1.2.3. Métodos Runge-Kutta

Una segunda idea alternativa para la mejora de la sencilla fórmula de Euler fue introducida en 1895¹¹ por Runge [74] y generalizada en 1900 por Heun [49] y sobre todo en 1901 por Kutta [53], quien introdujo varios métodos notables. Uno de ellos —con pesos $1/6$, $2/6$, $2/6$, $1/6$ y orden cuatro— adquiriría gran notoriedad, hasta el punto de ser conocido en algunos círculos con el nombre de “el” método de Runge-Kutta.¹² La realidad es que, desde sus orígenes, el término Runge-Kutta ha hecho referencia a una clase —muy amplia por cierto— de fórmulas y no a un único método.

¹¹El 8 de diciembre de 1995 tuvo lugar en el Centrum voor Wiskunde en Informatica de Amsterdam una reunión para celebrar los 100 años de la invención de los métodos Runge-Kutta. La revista *Applied Numerical Mathematics* publicó un volumen monográfico sobre la reunión (Volumen 22, números 1–3), coordinado por J. C. Butcher. Aunque circunstancias personales me impidieron asistir al encuentro como tenía previsto, pude contribuir al volumen [11]. Es de especial interés el artículo [10], que presenta una panorámica histórica del desarrollo de los métodos Runge-Kutta.

¹²Hace muchos años que tal método ha sido superado por completo. Hoy sólo tiene interés histórico y no hay razón alguna para usarlo que no sea la de la inercia.

Las aportaciones a la Aerodinámica de Wilhelm Martin Kutta¹³ son sobradamente conocidas [6]. Carl David Tolmé Runge, por su parte, jugó un papel relevante en la Matemática germana de su tiempo; en 1905 fue el primer catedrático de Matemática Aplicada de Alemania, al ocupar el puesto creado al efecto por Felix Klein en Gotinga, cuando ésta era la meca mundial de nuestra ciencia. Se había doctorado Runge en Berlín en 1880, bajo la dirección de Karl Weierstrass y Ernst Kummer. Entre sus discípulos más afamados figura Max Born, a su vez director de la tesis de J. Oppenheimer. Mencionaré que, aunque Runge nació en Brema (1856), pasó su infancia en La Habana, entonces colonia española, donde su padre era cónsul de Dinamarca. Y esto me da pie para comentar otros hechos curiosos, aun a riesgo de interrumpir el flujo del discurso. Uno de ellos es que don Pedro Puig Adam¹⁴ (Académico en esta Casa entre 1952 y 1960) usó uno de los métodos propuestos por Runge para resolver un problema que le había planteado La Cierva en relación con la estabilidad de las palas del autogiro.¹⁵ El otro, que el padre Dou, mi predecesor en la medalla, dedicó a la integración numérica uno de los cuatro capítulos de su texto [28] sobre ecuaciones diferenciales ordinarias, cubriendo tanto los métodos lineales multipaso como los de Runge-Kutta.

1.2.4. Métodos y ordenadores

A pesar de que, como acabamos de notar, los métodos numéricos para integrar ecuaciones diferenciales poseen una genealogía cier-

¹³Kutta, como Hilbert, Minkowski y otros, fue discípulo de Lindemann, quien demostró la trascendencia del número π , cerrando el problema de la cuadratura del círculo. La progenie científica de Lindemann no puede ser más distinguida: su director de tesis fue Klein, a su vez discípulo de Lipschitz, a su vez de Dirichlet, a su vez de Fourier, a su vez de Lagrange, a su vez de Euler, a su vez de Johann Bernoulli, a su vez de su hermano Jacob Bernoulli.

¹⁴Se doctoró en 1921 bajo la dirección de Rey Pastor, a quien tuvimos ocasión de referirnos más arriba.

¹⁵Los detalles pueden verse en el bien conocido libro [72]. La concepción de un rotor estable es una aportación de gran valor de La Cierva al moderno helicóptero.

tamente distinguida, puede afirmarse que hasta mediados del siglo XX estuvieron confinados a un papel marginal en el panorama global de la Matemática. Ante todo, hay que recordar que cuando las operaciones aritméticas debían llevarse a cabo sin más herramientas que el papel y el lápiz, con el auxilio de calculadoras mecánicas a lo sumo, el empleo efectivo de las aproximaciones numéricas era en algunos casos sencillamente imposible. En otros, constituía una tediosa tarea, un enorme esfuerzo en términos de tiempo y recursos.¹⁶ Esta razón llevaba por sí sola a favorecer las técnicas analíticas sobre las numéricas. Pero además, el desarrollo de la Matemática a lo largo del siglo XIX y de la primera mitad del XX implicó una creciente deriva de nuestra disciplina hacia la generalización y la abstracción, hacia las grandes teorías, alejándola de los problemas concretos y esto no podía de dejar de resultar negativo para el prestigio de los métodos numéricos que, frecuentemente, tienen un carácter *ad hoc* y casuístico.¹⁷ El mismo tipo de consideraciones creo que podrían efectuarse a propósito del Cálculo de Probabilidades: iniciado por nombres ilustrísimos hace doscientos o trescientos años, permaneció en la periferia de la Matemática hasta épocas relativamente recientes y no deja de llamar la atención lo tardío del concepto mismo de probabilidad y de resultados básicos como el Teorema

¹⁶He oído relatar a mis maestros en Escocia cómo, cuando ellos eran doctores en los años cuarenta del siglo XX, los investigadores ejecutaban cálculos numéricos rodeados de un equipo de auxiliares —a menudo mujeres— a quienes iban distribuyendo las operaciones que debían realizar con el auxilio de calculadoras mecánicas. Y, naturalmente, recuerdo las primeras veces que usé un ordenador, hacia 1975, todavía en los tiempos en que los programas se introducían mediante tarjetas perforadas y eran compilados y ejecutados bajo la supervisión de un operador profesional, única persona con acceso físico a la máquina, que era custodiada en un *sancta sanctorum* donde no podían penetrar los profanos. Los resultados eran entregados al usuario al día siguiente —y esto sólo en el caso favorable e infrecuente de que el programa careciese de errores y hubiese “corrido.”

¹⁷En su muy interesante libro [50] sobre Alan Turing —uno de los matemáticos padres del ordenador—, A. Hodges escribe en una nota a pie de página: “Como rama de las Matemáticas, sin embargo, el Análisis Numérico aparecía en el último escalón, incluso por debajo de la Estadística, en términos de lo que la mayoría de matemáticos universitarios consideraba de interés.”

del Límite Central. No siendo especialista en la materia, no me atrevo a conjeturar las razones de fondo que devolvieron, bien entrado el siglo XX, al Cálculo de Probabilidades a un lugar central en la Matemática; sin duda, la creciente importancia de la Estadística en todo tipo de investigaciones [77] habrá tenido un papel decisivo en el proceso. En el caso de los métodos numéricos, a nadie se oculta que el auge que vienen experimentado desde hace cincuenta o sesenta años se debe a la disponibilidad de ordenadores electrónicos digitales que han incrementado y siguen incrementado de modo sencillamente inverosímil la posibilidad de llevar a cabo cálculos aritméticos cada vez más complejos en tiempos cada vez más breves, permitiendo así la resolución de problemas antes inasequibles.

No debe concluirse de esto que los métodos numéricos modernos sean hijos del ordenador. La realidad es precisamente la contraria: los ordenadores¹⁸ fueron concebidos como herramientas para posibilitar el tratamiento numérico de problemas, fundamentalmente en el ámbito de las ecuaciones diferenciales, cuya solución, siendo importante para alguna aplicación, no era alcanzable por técnicas analíticas. No es por tanto aventurado afirmar que debemos los ordenadores a la necesidad de emplear métodos numéricos para resolver problemas de ecuaciones diferenciales.

1.3. La teoría

El ímpetu que la disponibilidad de ordenadores confirió al uso de métodos numéricos en todo tipo aplicaciones científicas y técnicas no pudo dejar de generar algún interés en la comunidad matemática.¹⁹

¹⁸El idioma inglés muestra más claramente que el castellano el origen de los ordenadores: *computer* es, literalmente, el que efectúa cálculos. Primero se usó para referirse a personas y sólo más tarde para designar máquinas. Así el *Webster's Encyclopedic Unabridged Dictionary of the English Language* ofrece dos acepciones de *computer*: la primera es *One who or that computes*.

¹⁹La afirmación precedente, es decir, que la disponibilidad de ordenadores despertó el interés de los matemáticos por los métodos numéricos, debe tomarse en su justo valor: las actitudes de desdén hacia los ordenadores y el cálculo numérico han subsistido entre los matemáticos hasta fechas recientes. Un mayor interés de la

A partir de aproximadamente 1955 comienzan a aparecer una serie de investigaciones de importancia, que, al proyectar la luz del análisis sobre los métodos numéricos, permiten, primero, un mejor entendimiento de los mismos, en segundo lugar, introducir criterios que hagan dable compararlos entre sí y, finalmente, proceder también a innovaciones significativas.

Para las ecuaciones diferenciales ordinarias, una buena parte de las aportaciones medulares se debe al sueco Germund Dahlquist, recientemente fallecido,²⁰ quien trabajó en dos grandes líneas: la teoría general de los métodos lineales multipaso [25], [26] y los problemas denominados rígidos (*stiff*) [27], que aparecen en múltiples aplicaciones (Ingeniería Química, circuitos, sistemas mecánicos con amortiguamiento, discretización de ecuaciones parabólicas [78], [101]).

También los métodos Runge-Kutta fueron testigos de notables avances, sobre todo merced al neozelandés John Butcher²¹ [7], [8], [9]. Este desarrolló una metodología simple para analizarlos mediante la introducción de recursos de la Teoría de Grafos. Cuando los métodos Runge-Kutta se manejaban con las pedestres técnicas usadas hasta entonces, construir fórmulas de orden alto era tarea oscura

comunidad matemática hacia los ordenadores cuando estos nacían hubiese abierto enormes posibilidades profesionales para jóvenes matemáticos. Estas oportunidades fueron mejor aprovechadas por físicos y por ingenieros quienes, en general, mostraron mayor sensibilidad y menos prejuicios hacia estos asuntos.

²⁰Germund Dahlquist nació en Uppsala el 16 de enero de 1925 y falleció el 8 de febrero de 2005 en Estocolmo. Al igual que Runge es descendiente científico de Weierstrass; la cadena maestro discípulo, toda ella formada por matemáticos relevantes, es Weierstrass, Schwarz, Fejer, Marcel Riesz, Hormander, Dahlquist. Para rendir homenaje a Dahlquist, SIAM (Society for Industrial and Applied Mathematics) instituyó un premio con su nombre para galardonar a quienes se distinguen con contribuciones a la solución numérica de las ecuaciones diferenciales. Tuve el honor de recibir el premio Dahlquist, en su primera edición, el 29 de marzo de 1995 en la Universidad de Stanford, California. El diploma contiene la siguiente mención: *To J. M. Sanz-Serna for his distinguished work on stability and long term behavior of numerical solutions of ordinary and partial differential equations, especially for his leadership in establishing a numerical analysis of Hamiltonian dynamics and his contribution to a theory for symplectic methods of general applicability.*

²¹Nació en Auckland el 31 de marzo de 1933.

y pesadísima;²² hoy es casi trivial, habiéndose obtenido métodos explícitos de orden 10 [40] e implícitos de orden arbitrario.

1.4. Paquetes

La disponibilidad de ordenadores cada vez más asequibles, accesibles, rápidos y fáciles de manejar; la clarificación aportada por los recientes resultados teóricos y los métodos concebidos a la luz de la nueva teoría fueron factores que convergieron en la redacción, a partir de los años sesenta del pasado siglo, de programas o paquetes para la integración ‘automática’ de problemas de valores iniciales en ecuaciones diferenciales ordinarias.²³ No es éste el lugar de describir las entrañas complejísimas de tales paquetes: baste decir que comprenden una batería de métodos de diversos órdenes (generalmente Runge-Kutta o lineales multipaso) y además recursos que les permiten estimar el error local y ajustar la longitud del paso y el orden del método para que la integración sea tal que las estimaciones sean menores que una tolerancia prescrita por el usuario.

²²El propio Kutta comete un error en su trabajo de 1901 [53] como consecuencia de la pesadez del enfoque pre-Butcher: uno de los métodos que Kutta construye y cree de orden cinco, sólo es en realidad de orden cuatro. Otra prueba del carácter tedioso del enfoque original usado por Runge y Kutta: antes de Butcher muchos textos proporcionaban los coeficientes del método Runge-Kutta ‘por antonomasia’ y de otras fórmulas clásicas; ninguno de tales manuales describía la construcción correspondiente, que hubiese precisado de muchas páginas de manipulaciones algebraicas. Así en la literatura española, en el conocido texto de Puig Adam, mencionado más arriba [72], leemos “pero como el cálculo es prolijo y no encierra ya novedad metodológica alguna, remitimos al lector que quiera comprobarlo a obras ...”

²³Un libro de texto representativo de ese momento es el de Gear [38], autor a quien por cierto debemos algunos de los primeros códigos automáticos. Ligeramente posterior es [104] centrado en códigos basados en los métodos de Adams. Ver también [54].

No sólo aparecieron programas automáticos para integrar ecuaciones diferenciales, sino programas para comparar entre sí tales programas, midiendo su eficiencia en una serie de problemas ‘test’ adecuada, ver p. ej. [51].

2. Limitaciones del paradigma clásico

A título orientativo se podría decir que a mediados de los 70 del pasado siglo disponíamos ya de todos los elementos que configuran el paradigma clásico. De hecho en el año 76²⁴ tuvo lugar un congreso dedicado a evaluar el *State of the Art in Numerical Analysis* y la presentación llevada a cabo en el mismo por J. D. Lambert [55] para describir la integración numérica de las ecuaciones diferenciales ordinarias no es sino una exposición, por cierto magistral, de todas y solas las ideas del paradigma clásico.

En síntesis, cuando se estudiaba hace, digamos, dos o tres décadas, la integración numérica de un problema de valores iniciales en uno cualquiera de los libros de textos disponibles, se entendía que concurrían los siguientes elementos.

- *Un objetivo bien definido que alcanzar:* Calcular, con el menor costo posible y dentro de un margen de aproximación prescrito, el valor de la solución al final del intervalo de tiempos considerado.
- *Una herramienta para alcanzarlo:* Un paquete automático.²⁵
- *Un marco teórico para diseñar o comprender la herramienta:* las ideas de convergencia, error global, consistencia, error local, estabilidad.

El segundo de los anteriores puntos merece un comentario. Sin duda, aun desde la visión del paradigma clásico, se era consciente de las limitaciones de resolver *todos* los problemas de valores iniciales con el mismo paquete. El propio Lambert [55] hacía mención

²⁴Este tipo de congresos se ha celebrado en Inglaterra bajo los auspicios del *Institute of Mathematics and its Applications (IMA)* en Birmingham (1966), York (1976), Birmingham (1986) y York (1996). El último incluyó ya una sesión sobre Integración Geométrica [90].

²⁵En rigor, esto no es cierto: el paradigma clásico había identificado perfectamente las dificultades inherentes a los llamados problemas rígidos y para ellos se disponía de paquetes especiales. Simplificamos la exposición, para ganar en claridad, suponiendo que no tenemos en mente los problemas rígidos.

de “clases especiales de problemas de valores iniciales” y lamentaba que “hubiesen recibido relativamente poca atención.²⁶” Si bien Lambert concluía con acierto que “donde hay estructura deberíamos ser capaces de emplearla en el método numérico,” la verdad es que el paradigma clásico no tomaba en consideración las especificidades del problema que se debía resolver.

La importancia para la ciencia y la técnica del desarrollo de los paquetes concebidos en el ámbito del paradigma clásico no puede obviarse. Sin embargo, tal paradigma ni daba, ni puede dar cabida en su seno a la plural realidad del mundo de la integración numérica de ecuaciones diferenciales. Veamos dos ejemplos.

Hace unos quince años, una integración numérica alcanzó gran notoriedad tras su publicación en *Science*. Sussman y Wisdom [106], tras integrar las ecuaciones del movimiento de los planetas desde el estado presente hasta la situación de hace cien millones de años, llegaron a la conclusión de que “desde Mercurio a Plutón el caos domina en el sistema solar.” Lejos pues de ser el modelo de regularidad que, propuesto por Kepler, llevó a Newton a concebir su Mecánica y a la idea misma de Ley de la Física, el movimiento planetario había poseído en el pasado un carácter del todo caótico. La fascinante integración de Sussman y Wisdom tiene imposible encaje en el paradigma clásico:

- El objetivo no era encontrar el estado del sistema en una instante prescrito; era más bien decidir si la evolución había sido regular o caótica. Los autores de [106] comparan el efecto de usar en su estudio diferentes técnicas de integración y concluyen que con otros métodos las gráficas obtenidas son ‘notablemente’ (*remarkably*) semejantes. Esto sólo puede entenderse como ‘confesión de parte’ de que los autores no se engañaban y no albergaban esperanza alguna de que los resultados de los diversos métodos poseyesen precisión en el senti-

²⁶‘Relativamente’ es sin duda un típico *understatement* británico, habida cuenta de que [55] es capaz de suministrar tan sólo una referencia bibliográfica sobre ‘clases especiales’.

do convencional de describir con poco error cuál era el estado del sistema solar hace cien millones de años.

- La herramienta no era ningún paquete, sino un método especialmente concebido para el problema a resolver.
- La herramienta había sido diseñada usando ideas de Astronomía y Mecánica Racional que poco o nada tenían que ver con las que eran lugar común en el campo de los métodos numéricos.

El segundo ejemplo que deseamos ofrecer proviene de la simulación de la dinámica de las macromoléculas de interés biológico [37], [63]. Se trata de integrar la segunda Ley de Newton (fuerza igual a masa por aceleración) para el movimiento de los átomos de la molécula, que pueden fácilmente ser cien mil o más.

- El objetivo es alcanzar información sobre aspectos como energías medias, conformaciones posibles, plegamientos, etc. No hay esperanza de computar la solución con precisión: típicamente, las perturbaciones duplican su tamaño cada picosegundo y el movimiento puede seguirse durante milisegundos o más. Las velocidades iniciales son desconocidas y se suelen asignar aleatoriamente. Las expresiones utilizadas para las fuerzas interatómicas son meras aproximaciones y además incluyen ciertos parámetros cuyos valores se desconocen y hay que ajustar.
- El método más usado, la sencilla regla explícita del punto medio, está sumamente alejado de las sofisticación de los paquetes. Incluso si se pudiesen integrar con paquetes complejos sistemas de tantas ecuaciones como éstos, es poco probable que aventajesen a la regla del punto medio.
- El éxito de la regla del punto medio no puede justificarse a través de las ideas de consistencia y estabilidad. Este esquema

es tan sólo de segundo orden y, en un análisis lineal, marginalmente estable, por lo que podría temerse que la más mínima no linealidad pudiera inestabilizarlo.

3. Nuevos enfoques

Planteadas así las cosas, veamos ya cómo los diversos elementos que configuran la Integración Geométrica han venido a ofrecer una nueva visión de los métodos numéricos para ecuaciones diferenciales.

Son varias las ideas introducidas recientemente para suplir las deficiencias del paradigma clásico. No es nuestra voluntad ser exhaustivos y nos limitaremos a esbozar dos de los temas a nuestro juicio más importantes.

3.1. Nuevos análisis

En primer lugar, conviene referirse al nuevo tratamiento dado a los análisis de error.

Como acabamos de señalar, hay múltiples casos de integraciones numéricas útiles en la práctica y que, sin embargo, carecen de cualquier precisión en el sentido tradicional. Este tipo de situación se había presentado ya en otras áreas del Análisis Numérico donde había conducido a introducir el concepto de *análisis regresivo del error*. Por ejemplo, desde los inicios del Álgebra Lineal Numérica (años cuarenta) había sido de interés estimar el error en la solución de los sistemas lineales de ecuaciones. En un primer momento, se había comenzado por enfocar el análisis de modo *progresivo*, es decir se había tratado de medir la distancia entre la solución verdadera y la efectivamente calculada. Las conclusiones fueron muy pesimistas; sólo eran alcanzables cotas muy groseras para el error así definido. Entonces se concibió una idea alternativa: demostrar que la solución numérica satisface de modo exacto un sistema de ecuaciones \tilde{S} próximo al que se está resolviendo S y acotar la diferencia en-

tre S y \tilde{S} . Como tantas otras veces en que se precisa hacer virtud de la necesidad, se cayó pronto en la cuenta de que el análisis regresivo no es sólo una manera de avanzar cuando el progresivo es imposible. Muy al contrario, en las situaciones, harto comunes, en que el sistema que se resuelve S es él mismo conocido sólo de modo aproximado (por ejemplo por ser sus coeficientes resultado de medidas experimentales sujetas a error), carece de sentido insistir en conocer su solución con gran precisión. Basta con asegurarse de que el método numérico introduce errores similares a los que provienen de la incertidumbre en los coeficientes de S .

Un sencillo ejemplo clarifica la situación: se da 1,4 como valor numérico aproximado de $\sqrt{2}$. En el análisis progresivo, el error es $1,4 - \sqrt{2}$, aproximadamente $-0,014$. En el modo regresivo, se observa que $1,4 = \sqrt{1,96}$, y se compara 1,96 con 2, con un error de, aproximadamente, 0,04. Por tanto cuando el dato 2 se conoce él mismo con un error del 2% o más, no tiene sentido refinar la aproximación dada por 1,4.

En el contexto de la integración numérica, la reciente popularización del análisis regresivo del error viene a interpretar la solución calculada como solución de un problema de valores iniciales que es una perturbación de aquel que se está resolviendo. Más precisamente se comparan los valores calculados con los valores de una función que satisface un problema de valores iniciales vecino del que se está resolviendo.²⁷

Como un problema de valores iniciales viene especificado por la ecuación diferencial y la condición inicial, el análisis regresivo puede basarse en perturbar una u otra.

La perturbación de la condición inicial ha sido común en el ámbito de la teoría de Sistemas Dinámicos, donde da origen al llamado *shadowing*. Si bien ha habido claro impacto de éste sobre los méto-

²⁷Aunque se usa la terminología ‘análisis regresivo del error’, en realidad nos encontramos ante un híbrido: hay una componente regresiva, porque se introduce un problema vecino, y hay una componente progresiva, porque se acota la diferencia entre la solución numérica y la del problema vecino —en un análisis regresivo puro ésta última diferencia sería nula.

dos numéricos (ver, por ejemplo, [95],[56] y sus referencias), la perturbación de la ecuación diferencial ha jugado un papel mucho más destacado. Por esta razón nos centramos de aquí en adelante en ésta última.

Entender que el uso de un método numérico puede interpretarse como una perturbación de la ecuación diferencial que se está resolviendo tiene en realidad una larga historia en el campo de las ecuaciones en derivadas parciales, donde tal idea se conoce con el nombre de método de las *ecuaciones modificadas* y se ha venido utilizando de manera meramente heurística, casi siempre por ingenieros. Una referencia clásica es [108] y un tratamiento más matemático es el proporcionado en [39]. En el contexto de las ecuaciones ordinarias —caso que nos ocupa— el empleo riguroso de las ecuaciones modificadas ha recibido un considerable impulso en los últimos años y está en la base de la mayor parte de las contribuciones a la Integración Geométrica.

De especial importancia es un trabajo [41] de E. Hairer que mostró cómo construir sistemáticamente, mediante las llamadas B-series, ecuaciones modificadas para estudiar las perturbaciones introducidas por los métodos Runge-Kutta. Un desarrollo alternativo fue presentado por Ander Murua en su tesis doctoral [67], [13], [89].

3.2. Integración simpléctica de problemas Hamiltonianos

El segundo tema que deseamos abordar es el de los métodos llamados simplécticos para sistemas Hamiltonianos. Notábamos anteriormente una cierta sensación de incomodidad o embarazo en los analistas numéricos ante el hecho de que todas las ecuaciones diferenciales se resolviesen con los mismos algoritmos. Gran parte de los recientes desarrollos han consistido precisamente en la creación de métodos especialmente adaptados a clases particulares de problemas, incorporando al método numérico propiedades *geométricas* de la clase particular en cuestión: de aquí el nombre ‘Integración Geométrica.’ Dentro de estas clases particulares, ha sido la de los pro-

blemas hamiltonianos [4] la que ha recibido atención mayor y más temprana. La necesidad de estudiar métodos numéricos específicos para este ámbito había sido notada entre otros por MacKay y Weiss, quienes en su recopilación de literatura sobre ecuaciones de Hamilton [64] escribieron: “*Another neglected problem is the development of computer algorithms which respect the symplectic nature of the Hamiltonian.*”

A pesar de no ser matemáticamente, en un sentido que no deseo precisar, sino un caso muy particular y simétrico dentro de todos los sistemas posibles de ecuaciones diferenciales, los sistemas hamiltonianos aparecen con enorme frecuencia en las aplicaciones; virtualmente todos los fenómenos donde la disipación o está ausente o puede ignorarse son susceptibles de ser modelados por un sistema hamiltoniano. En particular estos sistemas son clave en Mecánica Clásica, Mecánica Estadística, Mecánica Cuántica, Óptica, Física de Plasmas, etc.

Por definición, el carácter hamiltoniano o no de un problema depende de que el segundo miembro (campo de vectores) del sistema diferencial pueda o no escribirse como en términos de una única función real hamiltoniana apropiada. Se demuestra que es posible caracterizar los sistemas hamiltonianos considerando tan sólo sus soluciones, sin atender a la ecuación diferencial en sí misma. En efecto, un sistema es hamiltoniano cuando y solamente cuando el flujo de sus soluciones es una *transformación simpléctica* del espacio de fases. La noción de transformación simpléctica es geométrica: en el caso de un solo grado de libertad, una transformación simpléctica es aquella que conserva el área. En dimensiones más elevadas el carácter simpléctico pide la conservación de una colección de áreas multidimensionales o, en lenguaje más clásico, de los llamados invariantes integrales de Poincaré.

Los sistemas hamiltonianos poseen numerosas propiedades no compartidas por otros sistemas de ecuaciones diferenciales. Por otra parte, propiedades que aparecen en sistemas ‘generales’ sólo de modo excepcional son genéricas en los sistemas hamiltonianos. Todos estos rasgos específicos de los problemas hamiltonianos no son más

que consecuencias del carácter simpléctico del flujo de sus soluciones.

Cuando se integra un problema hamiltoniano con un método o paquete convencional no se respeta el carácter simpléctico del flujo de las soluciones y por tanto se pierden todos los rasgos geométricos específicos. En el lenguaje de las ecuaciones modificadas, el efecto de resolver un problema hamiltoniano por un método convencional puede verse como alterar el sistema que se integra para obtener uno, quizá muy próximo, pero ya no hamiltoniano, perdiéndose pues los rasgos específicos de la dinámica hamiltoniana.

Surge así la idea de la integración simpléctica, esto es, de concebir métodos numéricos que posean la propiedad de que al ser aplicados a un problema hamiltoniano cualquiera den origen a un flujo numérico simpléctico. En la terminología de las ecuaciones modificadas, la integración un problema hamiltoniano con un método simpléctico se interpreta como una perturbación la ecuación diferencial sin abandonar la clase de los problemas hamiltonianos o, todavía, como una perturbación de la verdadera función de Hamilton.

Algunas de las primeras contribuciones a la integración simpléctica surgieron en los comienzos de los años ochenta [76], [23], [66], aunque, al parecer, el concepto se remonta a DeVogelaere en 1956 [24]. Feng [33], [34], [35] tomó la idea con energía, originando, junto con sus discípulos a una amplia literatura.²⁸ Los trabajos pioneros sobre este tema partían de la idea de que las transformaciones simplécticas pueden ser expresadas en términos de una *función generatriz*. Buscaban entonces computar una función generatriz adecuada para el método numérico. Por desgracia esto conducía a métodos prolijos, difíciles de encontrar y demasiado complicados para poseer relevancia práctica. Lasagni [57] en Suiza, Suris [105] en la Unión

²⁸La carrera científica del profesor Feng Kang (1920–1993) fue notable y abarca numerosos campos. Trabajó en Moscú con Pontriaguin. En China se le atribuye la invención del método de los elementos finitos, que utilizó en el cálculo de presas. Debo en parte mi propio interés en la integración simpléctica a una visita que efectué a su Instituto de la Academia China de Ciencias en noviembre o diciembre de 1987.

Soviética y yo mismo [81], trabajando independientemente, dimos un enfoque alternativo, evitando por completo el uso de funciones generatrices. Más concretamente demostramos que la clase de métodos Runge-Kutta contiene abundantes métodos simplécticos.

Este descubrimiento desencadenó muy pronto una amplísima literatura,²⁹ que a su vez ha influido en todo el campo de la integración numérica de las ecuaciones diferenciales ordinarias.³⁰ A los métodos simplécticos para problemas hamiltonianos han venido a sumarse métodos especiales para problemas reversibles, problemas con conservación de volumen, y otros, con una cada vez mayor conexión con la teoría de los grupos y álgebras de Lie. No es este el momento de establecer un sumario y menos un sumario técnico de este campo. Estimo que lo que precede basta para hacerse una idea tanto de la naturaleza de los problemas que la integración numérica venía a resolver, como del interés de la ciencia en resolverlos. Como siempre, el tiempo mostrará si todos estos desarrollos mantienen una validez duradera o, por el contrario, son, al igual que tantos otros, una pequeña escaramuza más en nuestro secular combate para vencer a las ecuaciones diferenciales.

4. Conclusión

Por último, y si ello no empaña el carácter del acto, desearía concluir con una anécdota. En junio de 1981 participé en un congreso internacional; era una de las primeras veces que lo hacía. A la conclusión de una de las sesiones, otro, entonces joven, matemático y yo mismo acompañamos a su hotel a uno de los participantes más acreditados, quien, muy amablemente se interesó por nuestras investigaciones, relacionadas con las suyas. Al despedirse, quiso saber

²⁹De hecho [81] es el quinto artículo más citado de entre los publicados en la revista BIT entre 1981 y 2000 [32].

³⁰Así por ejemplo, la segunda edición [45] de 1993 del tratado de Hairer, Nørsett y Wanner, probablemente el mejor del campo, recogía ya muchos de estos desarrollos. La primera edición [44], de 1987, operaba por completo dentro del paradigma clásico.

nuestras nacionalidades y, cuando se las referimos, respondió con tanta sorpresa como falta de tacto: ¡De qué países tan extraños sois! Mi joven compañero era, es, de Sri Lanka.³¹

Creo que esta anécdota puede ser descriptiva de cómo se veía desde el extranjero nuestra Matemática hace no tanto. Hoy la participación de españoles en conferencias internacionales de Análisis Numérico no constituye motivo de extrañeza para nadie. Jugamos un papel internacional conmensurado con nuestra dimensión demográfica y económica. El avance, sencillamente admirable, registrado en los últimos veinticinco años es fruto, entre otras cosas, del trabajo de toda la generación de analistas numéricos españoles a la que pertenezco. Desearía pues que mi ingreso en esta Academia pudiera percibirse como un reconocimiento a todos ellos, que en nombre de todos agradezco.

He dicho.

³¹Hoy dirige un departamento en una universidad estadounidense.

Apéndice I: Métodos numéricos clásicos

En los apéndices se revisan y amplian, de modo muy informal, algunos de los conceptos y desarrollos matemáticos mencionados en el cuerpo del discurso.

El método de Euler

Sea

$$\frac{dy}{dt} = f(y), \quad 0 \leq t \leq T, \quad y(0) = \alpha \in R^D, \quad (1)$$

el problema de valores iniciales que se desea integrar. Es bien conocido cómo los sistemas de orden superior pueden reescribirse en formato de primer orden y cómo el caso no autónomo en que $f = f(y, t)$ depende de t puede reducirse al autónomo, $f = f(y)$, ampliando el número de componentes de y . Por ello, los métodos numéricos suelen concebirse sólo para sistemas autónomos de primer orden como el considerado en (1). Con todo, existen algunos métodos de interés para integrar sistemas de segundo orden sin previamente reescribirlos en formato de primer orden.³² De otra parte, un importante número de las consideraciones hechas en este discurso se extienden con variantes más o menos profundas a las ecuaciones en derivadas parciales de evolución reescritas como ecuaciones diferenciales ordinarias abstractas [107], [103], [102].

El *método de Euler* calcula aproximaciones y_n a los valores $y(t_n)$ de la solución en un número finito de puntos $t_n \in [0, T]$, $n = 0, 1, \dots, N$, $t_0 = 0$, $t_N = T$. De modo recurrente, para $n = 0, 1, \dots$, se tiene, con $h_n = t_{n+1} - t_n$:

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(y_n). \quad (2)$$

Calcular y_{n+1} a partir de y_n es efectuar un *paso*. El valor h_n se denomina *longitud del paso*. En el caso más sencillo, los t_n son equiespaciados, es decir, h_n toma un valor h independiente de n : se dice

³²Entre ellos, los métodos Runge-Kutta-Nyström, a los que haremos referencia más tarde.

entonces que el método se utiliza con *paso fijo*. Fijados f y h_n e interpretando y_n como una variable, la fórmula (2) define una transformación Ψ_{f,h_n} en el espacio R^D :

$$y \mapsto \Psi_{f,h_n}(y) = y + hf(y).$$

Con esta notación el método (2) se reescribe

$$y_{n+1} = \Psi_{f,h_n}(y_n).$$

La transformación Ψ_{f,h_n} es la contraparte numérica del *flujo* Φ_{f,h_n} de la ecuación diferencial $dy/dt = f(y)$. Por definición, $\Phi_{f,t}$ es la transformación en R^D que avanza t unidades de tiempo las soluciones de la ecuación diferencial, esto es, para cada $\alpha \in R^D$, $\Phi_{f,t}(\alpha)$ es el valor $y(t)$ en tiempo t de la solución que en tiempo 0 toma el valor inicial $y(0) = \alpha$.

Métodos lineales multipaso

Métodos de Adams explícitos

En un método lineal multipaso, el cálculo de y_{n+1} involucra no sólo información sobre y_n como acontece en el método de Euler, sino también sobre $y_{n-1}, \dots, y_{n-k+1}$. Aquí el entero dado $k \geq 1$ se llama *número de pasos* del método de que se trate.

Los métodos de Adams llamados *explícitos* o de Adams-Bashforth pueden obtenerse como sigue (por sencillez y aunque el caso general es por completo análogo, presentamos tan sólo el caso de paso fijo). Integramos primero (1) entre t_n y t_{n+1} :

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(\tau) d\tau = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y(\tau)) d\tau. \quad (3)$$

A continuación se aproxima la última integral por la fórmula de cuadratura interpolatoria [91] basada en las abscisas t_n, \dots, t_{n-k+1} , es decir,

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y(\tau)) d\tau \approx h [\beta_{k-1} f(y(t_n)) + \dots + \beta_0 f(y(t_{n-k+1}))],$$

donde los k pesos de la cuadratura, $\beta_{k-1}, \dots, \beta_0$, se determinan para que no haya error en el cálculo de la integral si $f(y(t))$ fuese un polinomio en t de grado $\leq k - 1$ (lo que evidentemente equivale a que la solución $y(t)$ sea un polinomio en t de grado $\leq k$). Así, encontramos que la relación

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = h [\beta_{k-1}f(y(t_n)) + \dots + \beta_0f(y(t_{n-k+1}))], \quad (4)$$

es satisfecha *de modo aproximado* por los verdaderos valores de la solución. Los valores aproximados y_n se definen mediante (4):

$$y_{n+1} - y_n = h [\beta_{k-1}f(y_n) + \dots + \beta_0f(y_{n-k+1})],$$

fórmula que permite el cálculo recursivo de y_{n+1} , $n \geq k - 1$. Los llamados *valores de arranque* y_1, \dots, y_{k-1} han de hallarse independientemente mediante alguna técnica auxiliar, y naturalmente, $y_0 = \alpha$. Obsérvese que en el caso particular $k = 1$, el proceso anterior conduce al método de Euler.

Métodos de Adams implícitos

Para los llamados métodos implícitos de Adams, o métodos Adams-Moulton, la cuadratura utilizada involucra también la abscisa t_{n+1} :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y(\tau)) d\tau \approx h [\tilde{\beta}_k f(y(t_{n+1})) + \dots + \tilde{\beta}_0 f(y(t_{n-k+1}))]$$

y los correspondientes pesos $\tilde{\beta}_j$ —hay uno más que en el caso Bashforth— se eligen para integrar exactamente polinomios de grado $\leq k$. El método es entonces

$$y_{n+1} - y_n = h [\tilde{\beta}_k f(y_{n+1}) + \dots + \tilde{\beta}_0 f(y_{n-k+1})];$$

esto es una ecuación vectorial que hay que resolver en cada paso para obtener el vector y_{n+1} , tarea que suele acometerse por un método iterativo de aproximaciones sucesivas.

Caso general

En general un método lineal de k pasos, cuando se usa con paso fijo, queda descrito por $2k + 2$ constantes $\alpha_0, \dots, \alpha_k, \beta_0, \dots, \beta_k$, denominadas *coeficientes*. La fórmula

$$\alpha_k y_{n+1} + \dots + \alpha_0 y_{n-k+1} = h [\beta_k f(y_{n+1}) + \dots + \beta_0 f(y_{n-k+1})] \quad (5)$$

se emplea para efectuar el paso. Si $\beta_k = 0$ el método se llama *explícito*; en otro caso *implícito*: efectuar un paso requiere hallar las D componentes de y_{n+1} resolviendo iterativamente un sistema de ecuaciones. Claramente, los métodos de Adams corresponden a la elección $\alpha_k = 1, \alpha_{k-1} = -1, \alpha_j = 0, j \leq k - 2$, con los restantes coeficientes obtenidos como pesos de las fórmulas de cuadratura descritas más arriba. Otro método de interés, al que nos referiremos más adelante, es el llamado *implícito de Euler*, con $k = 1, \alpha_1 = 1, \alpha_0 = -1, \beta_1 = 1, \beta_0 = 0$.

Métodos Runge-Kutta

En su artículo original [74], Runge parte también de la forma integrada (3) del problema de valores iniciales (1). Nota que el método de Euler se puede obtener tras aproximar la integral por el valor $hf(y(t_n)) \approx hf(y_n)$ (*regla de cuadratura del rectángulo*) y que ciertamente se obtendría una mejor aproximación usando la *regla del punto medio*, es decir, reemplazando la integral por $hf(y(t_{n+1/2}))$, con $t_{n+1/2} = t_n + h_n/2$, punto medio del segmento $[t_n, t_{n+1}]$. Para, a su vez, obtener una aproximación Y a $y(t_{n+1/2})$ que pueda ser usada en la cuadratura, Runge emplea un paso del método de Euler de longitud $h_n/2$ a partir de t_n . En definitiva, el método más sencillo sugerido por Runge es

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(Y), \quad Y = y_n + \frac{h_n}{2} f(y_n). \quad (6)$$

Ahora cada paso requiere evaluar f dos veces (una primera en y_n y otra en la llamada segunda *etapa* Y); lo que representa trabajar en

cada paso el doble que en el método de Euler. Notemos que, aunque Y depende de n , por sencillez tal dependencia no se recoge en la notación. Runge [74], [75] derivó fórmulas más complicadas que (6) basadas en el uso de reglas de cuadratura más complejas para aproximar la integral en (3).

En general, cada método de Runge-Kutta queda especificado por un entero positivo s (*el número de etapas*) y por *coeficientes* reales b_i , $i = 1, \dots, s$, a_{ij} , $i, j = 1, \dots, s$. Para avanzar la solución un paso de longitud h_n partiendo de y_n se comienza por computar las s etapas $Y_i \in R^D$ definidas por

$$Y_i = y_n + h_n [a_{i1}f(Y_1) + \dots + a_{is}f(Y_s)], \quad i = 1, \dots, s, \quad (7)$$

y luego se hace

$$y_{n+1} = y_n + h_n [b_1f(Y_1) + \dots + b_sf(Y_s)]. \quad (8)$$

La fórmula (8) puede concebirse como el reemplazamiento de la integral en (3) por una regla de cuadratura basada en s evaluaciones del integrando. Las relaciones (7) se interpretan entonces como trabajo previo para hallar los valores que serán usados en la cuadratura (8).

En los métodos pioneros debidos a Runge, Heun, Kutta y otros, la matriz de los coeficientes (a_{ij}) es triangular inferior, es decir $a_{ij} = 0$ cada vez que $i \leq j$. Entonces, en cada paso, las etapas Y_i se calculan por recurrencia, $j = 1, \dots, s$; cada etapa demanda una nueva evaluación de f ; el método se llama *explícito*. Con posterioridad se han considerado también métodos implícitos, en los que la matriz (a_{ij}) no es ya triangular inferior. Entonces, en cada paso, todas las etapas han de calcularse de forma simultánea: hay que resolver un sistema para las $s \times D$ componentes de los s vectores D -dimensionales Y_i [94].

Los métodos de Runge-Kutta, como el de Euler y otros de un paso, responden a un formato abstracto

$$y_{n+1} = \Psi_{f, h_n}(y_n),$$

donde la transformación Ψ asociada al método en cuestión es una aproximación al verdadero flujo Φ de la solución.

Por último hacemos notar que las clases de métodos lineales multipaso y Runge-Kutta no son disjuntas: entre otros, los métodos de Euler e implícito de Euler pertenecen a ambas familias.

Análisis de los métodos numéricos

Conceptos generales

Dentro de lo que llamo paradigma clásico, el análisis de los métodos numéricos para ecuaciones diferenciales ordinarias —extendido sobre todo a través del texto de Henrici [48]— se basa en tres grandes conceptos: convergencia, estabilidad y consistencia [79], [58], [59].

La idea de *convergencia* está relacionada con el llamado *error global*. Este es la diferencia $y(t_n) - y_n$ entre el verdadero valor de la solución $y(t_n)$ y la aproximación numérica calculada y_n . Un método se llama convergente si, en una hipotética sucesión de cálculos con longitudes de paso más y más pequeñas, los errores globales pueden hacerse tan pequeños como se desee. Si, cuando $h = \max_n h_n$ tiende hacia cero, los errores globales son del orden de h^p , el método se dice convergente de *orden* p . Por consiguiente, la convergencia (de orden tan grande como sea posible) es un objetivo que desearíamos alcanzar.

El concepto de *estabilidad* hace referencia a la manera en que los errores se propagan en el algoritmo al ir calculando sucesivamente los valores aproximados y_n para $n = 1, 2, \dots$. En realidad hay una constelación de conceptos de estabilidad relacionados [62], y por ser más precisos, diremos que la que aquí nos ocupa ahora es la a veces llamada *cero-estabilidad*. Esta demanda esencialmente que el efecto que un error en y_n tenga sobre los valores posteriores y_m , $m > n$ se pueda acotar de modo uniforme cuando $h = \max_n h_n$ tiende hacia cero.

La *consistencia* se relaciona con el llamado *error local*. Este, *grosso modo*, es el error tras un solo paso del método y mide en

qué medida los verdaderos valores $y(t_n)$ satisfacen las ecuaciones del método numérico, esto es, las ecuaciones que sirven para definir la sucesión de los y_n . Por ejemplo, para el método de Euler (2) el error local en $y(t_n)$ se define por

$$\ell_n = y(t_{n+1}) - y(t_n) - h_n f(y(t_n)).$$

El vector ℓ_n posee dos interpretaciones de interés. Ante todo es el *residuo* que mide en qué cuantía se viola la igualdad (2) cuando los valores numéricos y_{n+1} , y_n se reemplazan por sus contrapartidas $y(t_{n+1})$, $y(t_n)$ en la solución teórica. De otra parte es un *error* toda vez que constituye la diferencia entre el verdadero valor $y(t_{n+1})$ y la aproximación numérica $y(t_n) + h_n f(y(t_n))$ que suministraría el propio método de Euler si se le permitiese partir en t_n del valor exacto $y(t_n)$ en vez de tenerlo que hacer de la aproximación y_n .

Como $f(y(t_n)) = y'(t_n)$, un sencillo desarrollo de Taylor muestra que el error local ℓ_n en el método de Euler es aproximadamente $(h_n^2/2)y''(t_n)$, y se dice que el método es consistente de primer orden.

Dejando el método de Euler y retornando al caso general, el resultado más importante es el llamado *teorema de equivalencia*: los métodos convergentes son precisamente aquellos que son consistentes y estables. Además un método cero-estable y consistente de orden p (esto es con errores locales $O(h^{p+1})$) es convergente de orden p , con errores globales $y(t_n) - y_n = O(h^p)$.

La primera formulación del teorema de equivalencia, en un contexto distinto (ecuaciones en derivadas parciales de evolución *lineales*) se debe al premio Abel 2005 Peter Lax [73] (ver [69], [70], [96], [98]).

Métodos lineales multipaso

La teoría clásica de los métodos lineales multipaso fue desarrollada por Dahlquist, esencialmente en su tesis.

En analogía con lo que vimos para el método de Euler, el error local de (5), se define por,

$$\alpha_k y(t_{n+1}) + \cdots + \alpha_0 y(t_{n-k+1})$$

$$-h [\beta_k f(y(t_{n+1})) + \cdots + \beta_0 f(y(t_{n-k+1}))],$$

esto es

$$\alpha_k y(t_{n+1}) + \cdots + \alpha_0 y(t_{n-k+1}) \\ -h [\beta_k y'(t_{n+1}) + \cdots + \beta_0 y'(t_{n-k+1})],$$

expresión cuyo desarrollo en potencias de la longitud del paso h se obtiene de modo trivial. Evidentemente el término en h^j de ese desarrollo involucra la derivada $d^j y/dt^j$ de la solución y de (1) y un coeficiente numérico que es una expresión lineal en los coeficientes α y β del método. Por ejemplo, para $j = 0$, el término es

$$[\alpha_k k + \cdots + \alpha_0] y(t_n) \tag{9}$$

Imponer orden de consistencia $\geq p$ demanda anular los términos en h^j , $j = 0, 1, \dots, p$ y conduce a $p + 1$ relaciones lineales entre los coeficientes. De otro lado, un método (5) de k pasos tiene $2k + 2$ coeficientes ($2k + 1$ si se desea que sea explícito y $\beta_k = 0$). El método no cambia multiplicando todos los coeficientes por una constante no nula, de modo que los coeficientes independientes son $2k + 1$ ($2k$ en el caso explícito). Se concluye que el orden de consistencia máximo alcanzable es $2k$ ($2k - 1$ en el caso explícito). Los métodos clásicos de Adams-Moulton son consistentes de orden $k + 1$ y los de Adams-Bashforth de orden k ; esto es aproximadamente sólo la mitad del máximo alcanzable.

Se prueba que condición necesaria y suficiente para la cero-estabilidad del método (5) es que el llamado *primer polinomio característico*

$$\rho(\zeta) = \alpha_k \zeta^k + \cdots + \alpha_0$$

tenga todos sus ceros en el disco unidad $|\zeta| \leq 1$ y los ceros de módulo unidad sean simples. La anulaci3n de (9) requiere que $\alpha_k + \cdots + \alpha_0 = 0$. Por ello 1 es un cero de ρ en cada método consistente. La presencia de otros ceros simples de módulo unidad no impide la cero-estabilidad del método pero causa ciertas dificultades.

Es notable que alguno de los métodos considerados en la literatura de principios del siglo XX resultaron ser inestables o sólo marginalmente estables cuando se sometieron al escrutinio de la teoría de Dahlquist; la inestabilidad no se había detectado en la práctica pues la limitación del cálculo manual sólo había permitido efectuar unos pocos pasos en las ocasiones que tales fórmulas habían sido aplicadas.

Dahlquist, con un análisis muy elegante, encontró, que la consistencia y la cero-estabilidad de los métodos lineales multipaso se hallan en un cierto conflicto mutuo (*barrera de Dahlquist*): los métodos de orden de consistencia máximo $2k$ no pueden ser estables. En realidad se prueba que no es posible jugar con los valores de los coeficientes para obtener métodos convergentes de orden mayor del obtenido por Adams en el siglo XIX.

Métodos Runge-Kutta

Las fórmulas de Runge-Kutta, como el resto de los métodos de un paso, carecen de los problemas de estabilidad que pueden encontrarse en el caso multipaso. Son siempre cero-estables y por ello, un método Runge-Kutta es convergente de orden p si y solamente si es consistente de orden p . Aquí el error local se define como

$$\ell = \Phi_{f,h}(y) - \Psi_{f,h}(y), \quad (10)$$

donde en principio es conveniente considerar y como una variable que recorre R^D . Cuando esta variable toma el valor particular $y(t_n)$ y al parámetro h se le da el valor h_n , el error local es la diferencia entre el verdadero valor $y(t_{n+1})$ y el valor $\Psi_{f,h_n}(y(t_n))$ que proporcionaría en t_{n+1} el método, si en t_n partiese de la solución exacta $y(t_n)$.

Una fuente de interés matemático de los métodos Runge-Kutta es su falta de linealidad. El método multipaso (5) combina linealmente vectores y y vectores f y estos últimos, evaluados en la solución $y(t)$ son valores del vector derivada $y'(t)$. Por el contrario, vemos por ejemplo en (6) que en los métodos Runge-Kutta, f debe ser evaluada en expresiones en las que ya aparecen valores de f . En un método

explícito de s etapas puede haber s evaluaciones de f encajadas unas en otras como las diversas capas de las muñecas rusas.

Una primera consecuencia de esta falta de linealidad es que el desarrollo de Taylor del error local no es sencillo. Como mencionamos anteriormente, los trabajos antiguos procedían a tal desarrollo de forma que hoy parece ingenua y engorrosa en grado sumo. Ante todo, los autores carecían de la economía que hoy nos supone la notación vectorial y el concepto de derivada de Fréchet; ellos operaban componente a componente y en términos de derivadas parciales de las componentes. Evidentemente en la presentación que sigue nos atenderemos al tratamiento simple del error local empleado a partir de los años sesenta del siglo XX.

Para desarrollar (10) en potencias de h comenzamos por la solución numérica $\Psi_{f,h}(y)$. Para ella se tiene un desarrollo

$$y + \sum_{m=1}^{\infty} h^m \sum_{\tau \in RT_m} \frac{1}{\sigma(\tau)} c(\tau) F(\tau)(y) \quad (11)$$

que explicamos a continuación.

Para cada m , RT_m denota el conjunto de *árboles con raíz* con m vértices. Es a veces cómodo pensar en estos grafos (Figura 1) como árboles genealógicos en los que figuran m personas: un antepasado único común llamado raíz del árbol, hijos de la raíz, hijos de los hijos, etc. Para $m = 1$, RT_1 tiene un único elemento: el árbol τ_1 reducido a su raíz. Para $m = 2$ hay asimismo un sólo árbol τ_2 ; éste tiene un vértice raíz y un vértice hijo de la raíz. Para $m = 3$ hay ya dos árboles; $\tau_{3,1}$ raíz de la que emanan dos hijos y $\tau_{3,2}$ raíz, hijo, nieto.

El número de árboles crece rápidamente como función del de vértices (Cuadro 1). Así hay 4 árboles de orden 4, 9 de orden 5, 20 de orden 6, 48 de orden 7, ...

El término $\sigma(\tau)$ en (11) es un número entero: el número de *simetrías* de τ . Por definición una simetría de un árbol con raíz es una permutación del conjunto de sus vértices que deja invariante las relaciones padre/hijo. Por ejemplo $\sigma(\tau_1) = \sigma(\tau_2) = \sigma(\tau_{3,2}) = 1$ (no

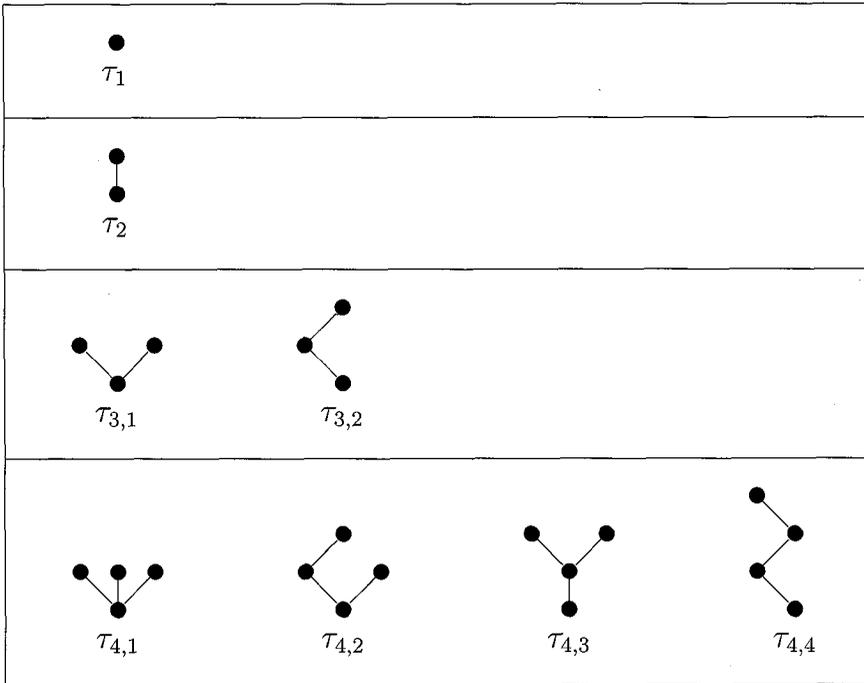


Figura 1: Árboles con raíz con uno, dos, tres o cuatro vértices

| | | | | | | | | | | |
|---------------------|---|---|---|---|---|----|----|-----|-----|-----|
| m | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
| $\text{card}(RT_m)$ | 1 | 1 | 2 | 4 | 9 | 20 | 48 | 115 | 286 | 719 |

Cuadro 1: Número de árboles con raíz con m vértices

hay más simetrías que la identidad), mientras que $\sigma(\tau_{3,1}) = 2$, habida cuenta de que éste árbol, raíz con dos hijos, permanece invariante permutando entre sí ambos hijos.

Consideremos seguidamente las llamadas *diferenciales elementales* $F(\tau)(y)$. Para cada árbol con raíz fijado τ , F es una función D -dimensional de la variable D -dimensional y , función que se construye en términos de la función f en el problema de valores iniciales (1). Por ejemplo, para el árbol τ_1 de un sólo vértice la diferencial elemental es la propia f :

$$F(\tau_1)(y) = f(y);$$

en general cada vértice terminal —vértice sin hijos, a veces llamado hoja del árbol— va a corresponder el vector $f(y)$ en la diferencial elemental. Con dos vértices

$$F(\tau_1)(y) = f'(y)f(y),$$

donde el segundo miembro representa la derivada primera (matriz jacobiana) de f evaluada en y actuando sobre el vector $f(y)$ (en general un vértice con un sólo hijo da origen a un término $f'(y)$). Para los árboles con tres vértices tenemos, en primer lugar

$$F(\tau_{3,1})(y) = f''(y)[f(y), f(y)],$$

donde $f''(y)$ es la derivada segunda evaluada en y , operador bilineal que actúa sobre los vectores operandos $f(y)$ y $f(y)$ (en general a un vértice con dos hijos corresponde una derivada segunda) y por otra parte

$$F(\tau_{3,2})(y) = f'(y)f'(y)f(y),$$

donde la derivada primera $f'(y)$ actúa sobre el vector $f'(y)f(y)$ descrito más arriba. Lo significativo es que cada diferencial elemental es una transcripción directa de la estructura padre/hijo del árbol a que corresponde. Un vértice con k hijos da lugar a una derivada k -ésima que opera sobre k operandos asociados a los hijos.

Finalmente quedan por presentar las $c(\tau)$ en (11). Estas son funciones de los coeficientes del método:

$$\begin{aligned} c(\tau_1) &= \sum_{i=1}^s b_i, \\ c(\tau_2) &= \sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij}, \\ c(\tau_{3,1}) &= \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{ik}, \\ c(\tau_{3,2}) &= \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk}. \end{aligned}$$

Para un árbol con m vértices encontramos un polinomio homogéneo de grado m en los coeficientes del método, expresado a través de una suma con m índices: uno por cada vértice del grafo. Las sumas reflejan otra vez la estructura padre/hijo del árbol. Corresponde a la raíz un término b_i , y si el vértice con índice k es hijo del vértice con índice j aparece un factor a_{jk} .

En cuanto al desarrollo del verdadero flujo $\Phi_{f,h}(y)$ se demuestra que este también de la forma (11), pero con el coeficiente $c(\tau)$ reemplazado por un valor $\gamma(\tau)$ llamado *densidad* del árbol τ . Por brevedad no podemos incluir aquí ninguna explicación de cómo se calcula $\gamma(\tau)$ a partir de la estructura del árbol τ , limitándonos a notar los primeros valores:

$$\begin{aligned} \gamma(\tau_1) &= 1, \\ \gamma(\tau_2) &= \frac{1}{2}, \\ \gamma(\tau_{3,1}) &= \frac{1}{3}, \\ \gamma(\tau_{3,2}) &= \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

Tras estos preliminares estamos en disposición de presentar las condiciones para que un método Runge-Kutta posea orden al menos

p : estas se obtienen anulando los términos de orden h^m , con $m = 1, 2, \dots, p$, en el desarrollo del error local (10), o equivalentemente igualando entre sí, los coeficientes $c(\tau)$ con las densidades $\gamma(\tau)$ para cada árbol con p o menos vértices.

Así,

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1$$

es necesaria y suficiente para orden $p \geq 1$; ésta ecuación en conjunción con

$$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} = \frac{1}{2}$$

es necesaria y suficiente para orden $p \geq 2$; y hay que añadir

$$\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{ik} = \frac{1}{3},$$

$$\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} = \frac{1}{6}$$

en orden a asegurarse orden tres o más.

Los trabajos de Butcher han analizado en profundidad estas condiciones de orden, que son interesantes en grado sumo por su marcado carácter no lineal (compárese con los métodos lineales multipaso). Se demuestra que las ecuaciones que provienen de los distintos árboles son independientes, en el sentido de que, si el número de etapas s y los valores de los coeficientes b_i , a_{ij} se consideran como parámetros libres, ninguna ecuación es consecuencia de las restantes. A la vista del rápido incremento del número de árboles a medida que crece el número de vértices se concluye con temor que el número de condiciones de orden será elevado cuando se desee alcanzar órdenes altos. Hay 4 condiciones para orden 3, $4 + 4 = 8$ para orden 4 y $8 + 9 = 17$ para orden 5 (el máximo considerado por Kutta). Para orden 6 se precisan $17 + 20 = 37$ y para orden 7, $37 + 48 = 85$. En 1956 Huña [52] halló un método explícito de orden 6 (37 ecuaciones) y 8 etapas (36 coeficientes: 8 b_i en la cuadratura y 28 a_{ij} ,

$i > j$ en las etapas). La explicación de esta y otras anomalías fue posible tras la clarificación que se derivó de los trabajos de Butcher. Este introdujo un conjunto de *hipótesis simplificadoras*: relaciones entre los coeficientes cuya imposición hace que ciertas condiciones de orden se satisfagan como consecuencia automática de la satisfacción de otras. Como fruto de estos análisis se demuestra que con s etapas se puede alcanzar orden $2s$. Este orden máximo se obtiene de modo único en un método implícito que se conoce como método de Gauss, porque la correspondiente cuadratura (8) resulta ser la bien conocida cuadratura gaussiana (fórmula que con s nodos cuadra sin error polinomios de grado $\leq s$). El más sencillo método de Gauss ($s = 1$, orden 2) es la llamada *regla implícita del punto medio* con $b_1 = 1$, $a_{11} = 1/2$, es decir

$$y_{m+1} = y_n + h_n f(Y_1), \quad Y_1 = y_n + \frac{1}{2} h_n f(Y_1),$$

o, eliminando la etapa Y_1 de estas relaciones,

$$y_{n+1} = y_n + h_n f\left(\frac{1}{2}(y_n + y_{n+1})\right).$$

Las series de la forma (11) se denominan B-series. No sólo la solución verdadera y las soluciones Runge-Kutta tienen desarrollos en potencias que son B-series: la práctica totalidad de los métodos de un paso dan origen a desarrollos de este tipo. Numerosas consideraciones se efectúan con más sencillez manejando B-series que manejando los coeficientes del correspondiente método. Podemos encontrar un ejemplo de esta aseveración en la idea de *composición*. Dado un problema de valores iniciales avancemos su solución h_1 unidades de tiempo mediante un método Runge-Kutta de s_1 etapas y, a partir del resultado obtenido, avancemos h_2 unidades de tiempo mediante una segunda fórmula Runge-Kutta con s_2 etapas. El proceso global efectúa un único paso de longitud $h_1 + h_2$ de un tercer método Runge-Kutta de $s_1 + s_2$ etapas. Este procedimiento define una ley de composición en el conjunto de todos los métodos Runge-Kutta al que dota de estructura de *grupo no abeliano*. La ley de composición que acabamos de describir es mejor entendida cuando los

métodos se manejan a través de sus B-series que cuando se opera en términos de los coeficientes b_i, a_{ij} . Estas ideas tienen una clara belleza matemática y por otro lado no se hallan desprovistas de interés práctico, entre otros motivos por estar en la base de la noción de *orden efectivo* de un método: resulta que hay métodos de orden p que dan aproximaciones equivalentes a las de un método de orden (y por ende complejidad) mayor $q > p$; este orden mayor se denomina el orden efectivo del método [11], [61].

Apéndice II: Sistemas hamiltonianos

El problema de valores iniciales (1) se llama *hamiltoniano* si la dimensión D de y es par, $D = 2d$, y escribiendo $y = (p, q)$, con p y q de dimensión d , las ecuaciones diferenciales para las componentes p_i y q_i son

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = +\frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad i = 1, \dots, d, \quad (12)$$

donde $H = H(p, q)$ es una función real de $2d$ variables reales denominada el hamiltoniano. El entero d se conoce con el nombre de *número de grados de libertad*, tomado de la Mecánica [4].³³

Por definición y como acabamos de exponer, el carácter hamiltoniano o no de un problema depende de que el segundo miembro (campo vectorial) f de la ecuación diferencial (1) pueda o no escribirse como en (12) en términos de una única función real apropiada H . Se demuestra sin embargo que es posible caracterizar los sistemas hamiltonianos considerando tan sólo sus soluciones, sin atender a la expresión de las ecuación diferenciales en sí mismas. En efecto, un sistema de dimensión $2d$ es hamiltoniano cuando y solamente cuando el flujo Φ_t de sus soluciones es, para cada t , una *transformación simpléctica*, es decir, satisface

$$\Phi_t'^T J \Phi_t' \equiv J,$$

donde $\Phi_t' = \Phi_t'(y)$ es la matriz jacobiana de Φ_t , y J es la matriz antisimétrica constante

$$J = \begin{bmatrix} 0_d & I_d \\ -I_d & 0_d \end{bmatrix},$$

con $0_d, I_d$ las matrices cero e identidad d -dimensionales.

Aunque aquí haya sido definida de manera analítica, la noción de transformación simpléctica es en realidad geométrica: en el caso

³³Existen, dentro del formalismo hamiltoniano, múltiples extensiones relevantes [31], [36], [87], [97] del sencillo formato (12). Este se conoce con más propiedad con el nombre de *canónico*.

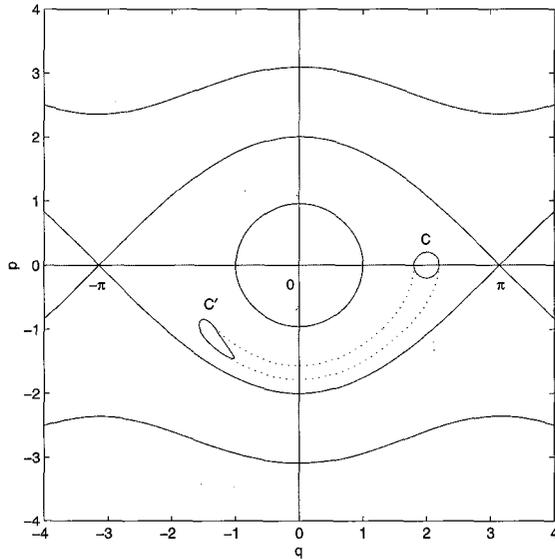


Figura 2: Plano de fases para el péndulo. Se han representado algunas de las posibles trayectorias: una órbita de libración que rodea al origen (oscilaciones periódicas del péndulo), dos órbitas de rotación, una en la parte superior de la figura (q crece monótonamente) y otra en la parte inferior (q decrece monótonamente) y las separatrices que conectan los equilibrios inestables. Cada condición inicial en el círculo C evoluciona tras 3 unidades de tiempo y se transforma en un punto de la figura C' . Los recintos C y C' poseen la misma área.

de un solo grado de libertad, $d = 1$, una transformación simpléctica es aquella que conserva el área. En dimensiones más elevadas el carácter simpléctico pide la conservación de una colección de áreas multidimensionales o, en lenguaje más clásico, de los llamados invariantes integrales de Poincaré [4]. La Figura 2 ofrece un sencillo ejemplo correspondiente a la función hamiltoniana con un grado de libertad

$$H = \frac{1}{2}p^2 + 1 - \cos q, \quad (13)$$

que da origen al sistema

$$\frac{dp}{dt} = -\sin q, \quad \frac{dq}{dt} = p, \quad (14)$$

que describe las oscilaciones de un péndulo, siendo q el ángulo que lo separa de la vertical y p la velocidad angular.³⁴ Cada punto del *plano de fases* (p, q) representa un estado del péndulo. En particular observamos el equilibrio estable en $q = 0, p = 0$ (péndulo parado en su posición más baja) y el equilibrio inestable en $q = \pm\pi, p = 0$ (péndulo parado en la posición más alta). El equilibrio estable aparece rodeado de trayectorias cerradas de *libración*, en que q oscila periódicamente, mientras que para $|p|$ grande las trayectorias son abiertas y el péndulo *rota*, esto es, q crece o decrece de modo monótono. Las zonas de trayectorias de libración y rotación aparecen delimitadas por las separatrices que conectan los equilibrios inestables. En la figura hemos considerado un círculo C de posibles estados iniciales del péndulo y, para cada uno, hemos hallado el estado correspondiente tras 3 unidades de tiempo. El resultado es la figura ovalada $C' = \Phi_3(C)$, imagen de C mediante la transformación Φ_3 . Los recintos C y C' poseen la misma área en virtud del carácter hamiltoniano del sistema que se integra.

Numerosas propiedades que aparecen en sistemas ‘generales’ sólo de modo excepcional son *genéricas* en los sistemas hamiltonianos gracias al carácter simpléctico del flujo. Usando de nuevo la Figura 2 para ofrecer una sencilla ilustración, vimos que en ella el origen es un *centro*: las trayectorias que lo rodean son cerradas (coinciden con las curvas de nivel de H). Los centros son equilibrios atípicos: pequeñas perturbaciones del segundo miembro del sistema (14) hacen que las trayectorias vecinas al origen se conviertan en espirales, o bien entrantes hacia el mismo o bien salientes.³⁵ Sin embargo si perturbamos

³⁴Eliminando la variable p , el sistema puede reformularse como uno de segundo orden

$$\frac{d^2q}{dt^2} = -\sin q$$

que corresponde a la segunda Ley de Newton.

³⁵Físicamente esto correspondería a la introducción de un pequeño rozamien-

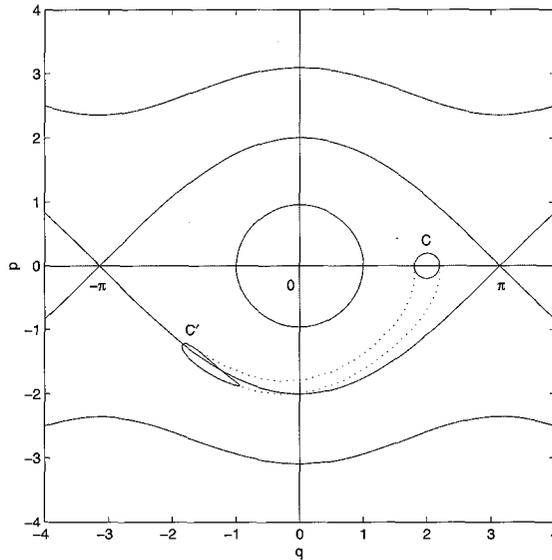


Figura 3: Esta gráfica difiere de la Figura 2 en que ahora la evolución de cada punto de C se ha obtenido mediante el método (explícito) de Euler. El incremento de área en la evolución numérica es manifiesto y acarrea como consecuencia que las trayectorias calculadas numéricamente (líneas de puntos) son espirales que se alejan del equilibrio. El efecto de utilizar éste método numérico es sustituir una evolución hamiltoniana por otra en que la energía del péndulo se incrementa al crecer t .

(14) de suerte que el sistema perturbado sea también hamiltoniano — es decir sustituimos H en (13) por una función vecina—, el origen sigue siendo un centro.

Cuando se integra un problema hamiltoniano con un método o paquete convencional no se respeta el carácter simpléctico del flujo de las soluciones y por tanto se pierden todos los rasgos geométricos específicos. Las Figuras 3 y 4 corresponden a la situación de la Figura 2, pero transformando el círculo C mediante métodos numéricos

to que amortiguase el péndulo o de una pequeña aportación de energía que iría incrementando la amplitud de las oscilaciones.

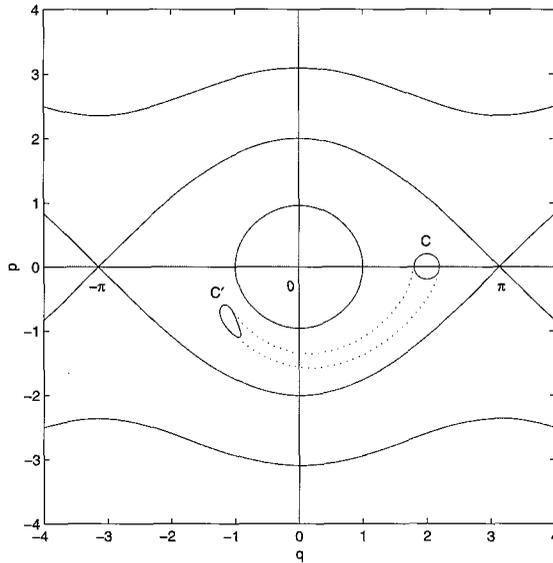


Figura 4: Aquí el método numérico es el regresivo de Euler. Hay contracción de área y las trayectorias numéricas son espirales que entran al origen. El método suplanta la evolución hamiltoniana por una de tipo disipativo.

en vez de acudir a la solución exacta. En la Figura 3 el método usado es el de Euler con $h = 1/4$: en el flujo numérico hay incremento de área y como consecuencia la solución numérica traza espirales inestables. Para el método regresivo de Euler (Figura 4, $h = 1/4$) hay contracción de áreas y la correspondiente amortiguación de las soluciones numéricas.

En el lenguaje de las ecuaciones modificadas, el efecto de resolver un problema hamiltoniano por un método convencional puede verse como alterar el sistema que se integra para obtener uno, quizá muy próximo, pero ya no hamiltoniano, perdiéndose pues los rasgos específicos de la dinámica hamiltoniana. Esta es la dificultad que los métodos simplécticos vienen a resolver.

Apéndice III: Métodos simplécticos Runge-Kutta

Como se indicó en el cuerpo del discurso, un evento que desencadenó el interés por la integración simpléctica de los sistemas Hamiltonianos, y más generalmente por la Integración Geométrica, fue el descubrimiento simultáneo en los artículos [57], [105], [81] del hecho de que existen métodos Runge-Kutta simplécticos. Así se encontraba un nexo entre los métodos de integración clásicos y la teoría de la Geometría Simpléctica.

Específicamente, esos artículos establecieron que las relaciones entre coeficientes

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad i, j = 1, \dots, s, \quad (15)$$

resultan suficientes para garantizar el carácter simpléctico de un método Runge-Kutta (7)–(8). Es fácil encontrar métodos que satisfagan (15): en particular los métodos de Gauss (con s etapas y orden máximo $2s$) resultan ser simplécticos [60]. La Figura 5 es como las 3 y 4, pero en ella se ha usado un método Runge-Kutta simpléctico: la regla implícita del punto medio (método de Gauss de una etapa). La conservación del área es evidente.³⁶

Por otro lado, las ecuaciones (15) son también necesarias para la simplecticidad del método. La primera prueba de ello es debida a Lasagni en unas notas no publicadas; sus técnicas, en un contexto ligeramente distinto, fueron usadas en [1]. Un enfoque alternativo y más potente para relacionar (15) con la simplecticidad de los métodos es el introducido en [20]: se comienza por establecer una condición necesaria y suficiente para que, en problemas hamiltonianos, una B-serie (11) defina una transformación simpléctica. Esto da un conjunto de condiciones sobre los coeficientes $c(\tau)$ de la serie. En una segunda etapa, esas condiciones se traducen en otras sobre

³⁶La ausencia de disipación numérica espuria es consecuencia de la conservación de área. No obstante no debe confundirse el rico concepto de simplecticidad con el más limitado de ausencia de disipación [71].

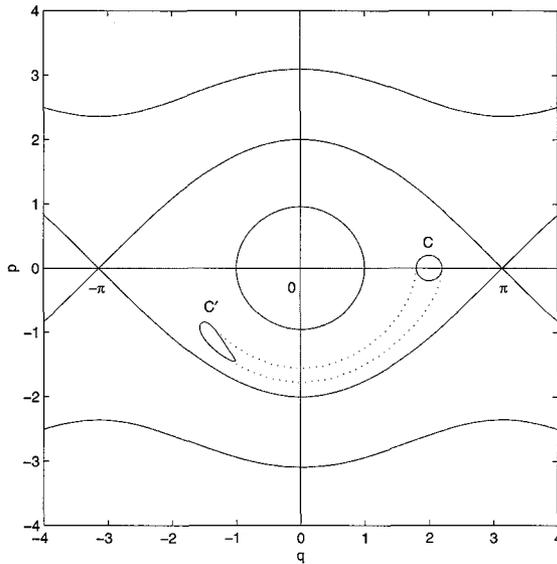


Figura 5: Como las gráficas anteriores, pero aquí el método numérico, la regla implícita del punto medio, es simpléctico.

los coeficientes del método generador de la B-serie. Este enfoque da una prueba de la necesidad mucho más sencilla de la basada en las ideas de Lasagni y, por otro lado, goza de la ventaja de no estar restringido a métodos Runge-Kutta.

La tarea de construir de modo efectivo métodos Runge-Kutta simplécticos se ve facilitada porque, tal como se probó en [92] (cf. [15]), una vez que se han impuesto las condiciones (15) sobre los coeficientes, aparecen redundancias en las condiciones que garantizan un orden de convergencia dado. En otras palabras, las relaciones (15) operan como *hipótesis simplificadoras* en el mismo sentido que las introducidas por Butcher y mencionadas anteriormente. Estos aspectos pueden ser abordados con gran elegancia mediante recursos de la teoría de grafos, análogos a los esbozados en el cuerpo del discurso.

Otro ámbito que ha visto la aparición de una cantidad relevante de investigaciones es el estudio riguroso de las ventajas de los integradores simplécticos sobre los que no lo son. Por ejemplo, se de-

muestra que los métodos simplécticos tienen mejor comportamiento que en cuanto a crecimiento del error global a lo largo de la integración (ver p. ej. [16], [21], [22], [29], [30]).

Por desgracia, las relaciones (15) no pueden satisfacerse por métodos Runge-Kutta explícitos y los métodos implícitos pueden ser demasiado costosos en algunas aplicaciones. Se obtiene un alivio de esta dificultad en aquellos casos en que la función de Hamilton $H = H(p, q)$ tiene la estructura *separada*³⁷

$$H(p, q) = T(p) + V(q)$$

con ecuaciones diferenciales

$$\frac{dp_i}{dt} = -F_i(q), \quad \frac{dq_i}{dt} = +G_i(p), \quad i = 1, \dots, d,$$

donde

$$F_i(q) = \frac{\partial V}{\partial q_i}, \quad G_i(p) = \frac{\partial T}{\partial p_i}, \quad i = 1, \dots, d.$$

Cuando el interés se restringe a este caso particular toman relevancia los llamados métodos *Runge-Kutta particionados* que emplean un juego de coeficientes b_i, a_{ij} para integrar las ecuaciones diferenciales de las variables p y otro juego diferente de coeficientes b_i^*, a_{ij}^* para las variables q . Estos métodos son simplécticos bajo un conjunto de relaciones análogo a (15) —que evidentemente ahora involucra la totalidad de coeficientes $b_i, a_{ij}, b_i^*, a_{ij}^*$ — y con ellos es dable obtener fórmulas que de modo simultáneo son explícitas y simplécticas.

Si, restringiendo aún más la familia de funciones hamiltonianas, sólo se considera la situación $H = T(p) + V(q)$ con T cuadrática

$$T(p) = \frac{1}{2} p^t M^{-1} p$$

³⁷Esta estructura particular aparece con frecuencia en Mecánica, con T y V las energías cinética y potencial respectivamente.

(M es una matriz constante llamada de masas), es posible eliminar las variables p para obtener el sistema de segundo orden para el vector q ³⁸

$$M \frac{dq}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial q},$$

que puede ser integrado con uno de los llamados métodos Runge-Kutta-Nyström. Se prueba, una vez más, que hay métodos de esta clase que son a la vez explícitos y simplécticos [16], [17], [14], [12], [19].

Las investigaciones sobre métodos Runge-Kutta simplécticos comentadas brevemente más arriba pueden extenderse a las familias de métodos Runge-Kutta separables simplécticos y Runge-Kutta-Nyström simplécticos e incluso a otras clases de fórmulas [43], [2], [68]. Como ya quedó indicado, no es nuestro objetivo ofrecer aquí un sumario del estado de la cuestión en los campos considerados y debemos remitir a los posibles lectores interesados a la amplia literatura disponible.

³⁸En *Mécanica* esto corresponde a eliminar los momentos/velocidades de las ecuaciones de movimiento para recuperar la segunda Ley de Newton.

Referencias

- [1] Abia, L., Sanz-Serna, J. M.: Partitioned Runge-Kutta methods for separable Hamiltonian problems. *Math. Comput.* **60**, (1993) 617–634.
- [2] Araújo, A. L., Murua, A., Sanz-Serna, J. M.: Symplectic methods based on decompositions. *SIAM J. Numer. Anal.* **34**, (1997) 1926–1947.
- [3] Arnold, V. I., *Geometrical methods in the theory of ordinary differential equations, 2nd ed.*, Springer, New York, 1988.
- [4] Arnold, V. I., *Mathematical methods of Classical Mechanics, 2nd ed.*, Springer, New York, 1989.
- [5] Bashforth, F., *An attempt to test the theories of capillary action by comparing the theoretical and measured forms of drops of fluid. With an explanation of the method of integration employed in constructing the tables which give the theoretical form of such drops*, by J. C. Adams, Cambridge University Press, 1883.
- [6] Bulirsch, R., Breitner, M.: Wilhelm Maria Kutta (1867–1944). *DMV Mitteilungen* **2**, (1994) 7–8.
- [7] Butcher, J. C.: Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes. *J. Austral. Math. Soc.* **3**, (1963) 202–206.
- [8] Butcher, J. C.: Implicit Runge-Kutta processes. *Math. Comput.* **18**, (1964) 50–64.
- [9] Butcher, J. C.: On the attainable order of Runge-Kutta methods. *Math. Comput.* **19**, (1965) 480–417.
- [10] Butcher, J. C., Wanner, G.: Runge-Kutta methods: some historical notes. *Appl. Numer. Math.* **22**, (1996) 113–151.

- [11] Butcher, J. C., Sanz-Serna, J. M.: The number of conditions for a Runge-Kutta method to have effective order p . *Appl. Numer. Math.* **22**, (1996) 103–111.
- [12] Calvo, M. P., López-Marcos, M. A., Sanz-Serna, J. M.: Variable step implementation of geometric integrators. *Applied Numer. Math.* **28**, (1998) 1–16.
- [13] Calvo, M. P., Murua, A., Sanz-Serna, J. M.: Modified equations for ODEs. *Contemporary Maths.* **172**, (1994) 63–74.
- [14] Calvo, M. P., Sanz-Serna, J. M.: Variable steps for symplectic integrators. En *Numerical Analysis 1991*, (Griffits, D. F., G. A. Watson, eds.) Longman Scientific and Technical, London, 1992, 34–48
- [15] Calvo, M. P., Sanz-Serna, J. M.: Order conditions for canonical Runge-Kutta-Nyström methods. *BIT* **32**, (1992) 131–142.
- [16] Calvo, M. P., Sanz-Serna, J. M.: The development of variable step integrators with, with applications to the two-body problem. *SIAM J. Sci. Comput.* **14**, (1993) 936–952.
- [17] Calvo, M. P., Sanz-Serna, J. M.: High-order symplectic Runge-Kutta-Nyström methods. *SIAM J. Sci. Comput.* **14**, (1993) 1237–1252.
- [18] Calvo, M. P., Sanz-Serna, J. M.: Symplectic numerical methods for Hamiltonian problems. *Int. J. Mod. Phys. C* **4**, (1993) 385–392. También en *Physics computing 92* (de Groot, R. A., Nadrchal, J., eds.) World Scientific, Singapur, 1993, 153–160.
- [19] Calvo, M. P., Sanz-Serna, J. M.: Reasons for a failure. The integration of the two-body problem with a symplectic Runge-Kutta-Nyström code with stepchanging facilities. En *Equadiff 91*, (Perelló, C., Simó, C., Sola-Morales, J., eds.) World Scientific, Singapur, 1993, 93–102.

- [20] Calvo, M. P., Sanz-Serna, J. M.: Canonical B-series. *Numer. Math.* **67**, (1994) 161–175.
- [21] Cano, B., Sanz-Serna, J. M., Error growth in the numerical integration of periodic orbits, with application to Hamiltonian and reversible systems. *SIAM J. Numer. Anal.* **34**, (1997) 1391–1417.
- [22] Cano, B., Sanz-Serna, J. M., Error growth in the numerical integration of periodic orbits by multistep methods, with application to reversible systems. *IMA J. Numer. Anal.* **18**, (1998) 57–75.
- [23] Channell, P. J.: Symplectic integration algorithms. Los Alamos National Laboratory Report, Report AT-6:ATN83-9, (1983).
- [24] Channell, P. J., Scovel, C. S.: Symplectic integration of Hamiltonian systems. *Nonlinearity* **3**, (1990) 231–259.
- [25] Dahlquist, G.: Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations. *Math. Scand.* **4**, (1956) 33–53.
- [26] Dahlquist, G.: *Stability and error bounds in the numerical integration of ordinary differential equations*. Trans. of the Royal Inst. of Techn., **130**, Stockholm, 1959.
- [27] Dahlquist, G.: A special stability problem for linear multistep methods. *BIT* **3**, (1963) 27–43.
- [28] Dou, A., *Ecuaciones diferenciales Ordinarias*, Editorial Dos-sat, Madrid, 1969.
- [29] Durán, A., Sanz-Serna, J. M.: The numerical integration of relative equilibrium solutions. Geometric theory. *Nonlinearity* **11**, (1998) 1547–1567.

- [30] Durán, A., Sanz-Serna, J. M.: The numerical integration of relative equilibrium solutions. The nonlinear Schrödinger equation. *IMA J. Numer. Anal.* **20**, (2000) 235–261.
- [31] Eirola, T., Sanz-Serna, J.M.: Conservation of integrals and symplectic structure in the integration of differential equations by multistep methods. *Numer. Math.* **61**, (1992) 281–290.
- [32] Embree, M.: The most widely cited papers in BIT. *BIT* **40**, (2000) 800–801.
- [33] Feng, K.: On difference schemes and symplectic geometry. En *Proc. of the 1984 Beijing Sym. on Differential Geometry and Differential Equations*, (Feng, K. ed.), Science Press, Beijing, 1985.
- [34] Feng, K.: Difference schemes for Hamiltonian formalism and symplectic geometry. *J. Comput. Maths.* **4**, (1986) 279–289.
- [35] Feng, K.: Symplectic geometry and numerical methods in fluid dynamics. En *Tenth Int. Conf. on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, (Zhuang, F. G. y Zhu, Y. L. eds.), Lecture Notes in Physics, **264** Springer, Berlin, 1986.
- [36] Frutos, J. de, Ortega, T., Sanz-Serna, J. M.: A Hamiltonian, explicit algorithm with spectral accuracy for the ‘good’ Boussinesq system. En *Proceedings of the ICOSAHOM 89 Conference*, (Canuto, C., Quarteroni, A., eds.) North Holland, Amsterdam 1990, 417–423.
- [37] García-Archilla, B., Sanz-Serna, J. M., Skeel, R. D.: Long-time-step methods for oscillatory differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.* **20**, (1998) 930–963.
- [38] Gear, C. W., *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971.

- [39] Griffiths, D. F., Sanz-Serna, J. M.: On the scope of the method of modified equations. *SIAM J. Sci. Comput.* **7**, (1986) 994–1008.
- [40] Hairer, E.: A Runge-Kutta method of order 10. *J. Ins. Math. Appl.* **21**, (1978) 47–59.
- [41] Hairer, E.: Backward analysis of numerical integrators and symplectic methods. *Annals of Numerical Maths.* **1**, (1994) 107–132.
- [42] Hairer, E., Lubich, C., Wanner, G., *Geometric numerical integration*, Springer, Berlin, 2002.
- [43] Hairer, E., Murua, A., Sanz-Serna, J. M.: The nonexistence of symplectic multiderivative-Runge-Kutta methods. *BIT* **34**, (1994) 80–87.
- [44] Hairer, E., Norsett, S. P., Wanner, G., *Solving ordinary differential equations I, Nonstiff problems*, Springer, Berlin, 1987.
- [45] Hairer, E., Norsett, S. P., Wanner, G., *Solving ordinary differential equations I, Nonstiff problems, 2nd ed.*, Springer, Berlin, 1993.
- [46] Hairer, E., Wanner, G., *Solving ordinary differential equations II, Stiff and differential-algebraic problems, 2nd ed.*, Springer, Berlin, 1996.
- [47] Hairer, E., Wanner, G., *Analysis by its history*, Springer, New York, 1997.
- [48] Henrici, P., *Discrete variable methods in ordinary differential equations*, Wiley, New York, 1962.
- [49] Heun, K.: Neue Methode zur approximativen Integration der Differentialgleichungen einer unabhängigen Veränderlichen. *Z. Math. Phys.* **45**, (1900) 23–38.

- [50] Hodges, A. *Alan Turing, The enigma of intelligence*, Counterpoint, London, 1983.
- [51] Hull, T. E., Enright, W. H., Fellen, B. M., Sedgwick, A. E.: Comparing numerical methods for ordinary differential equations. *SIAM J. Numer. Anal.* **9**, (1972) 603–637.
- [52] Huřa, A.: Une amélioration de la méthode de Runge-Kutta-Nyström pour la résolution numérique des équations différentielles du premier ordre. *Acta Math. Univ. Comenian* **1**, (1956) 201–224.
- [53] Kutta, W.: Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen. *Zeitschr. für Math. und Phys.* **46**, (1901) 435–453.
- [54] Lambert, J. D., *Computational methods in ordinary differential equations*, John Wiley, London, 1973.
- [55] Lambert, J. D.: The initial value problem for ordinary differential equations. En *The state of the art in Numerical Analysis*, (D. A. H. Jacobs ed.) Academic Press, 1976, 451–500.
- [56] Larsson, S., Sanz-Serna, J. M.: A shadowing result with applications to finite element approximation of reaction-diffusion equations. *Math. Comput.* **68**, (1999) 55–72.
- [57] Lasagni, F. M.: Canonical Runge-Kutta methods. *ZAMP* **39**, (1988) 952–953.
- [58] López-Marcos, J. C., Sanz-Serna, J. M.: A definition of stability for nonlinear problems. En *Numerical treatment of differential equations*, Teubner, Leipzig, 1988, 216–226.
- [59] López-Marcos, J. C., Sanz-Serna, J. M.: Stability and convergence in numerical analysis III: Linear investigation of nonlinear stability. *IMA J. Numer. Anal.* **8**, (1988) 71–84.

- [60] López-Marcos, M. A., Sanz-Serna, J. M., Díaz, J.C.: Are Gauss-Legendre methods useful in molecular dynamics? *J. Comput. Appl. Math.* **67**, (1996) 173–179.
- [61] López-Marcos, M. A., Sanz-Serna, J. M., Skeel, R. D.: Cheap enhancement of symplectic integrators. En *Numerical analysis 1995*, (Griffiths, D. F., Watson, G. A., eds.) Longman, Harlow (Essex), 1996, 107–122.
- [62] López-Marcos, M. A., Sanz-Serna, J. M., Skeel, R. D.: An explicit symplectic integrator with maximal stability interval. En *Numerical analysis, A. R. Mitchell 75th birthday volume*(Griffiths, D. F., Watson, G. A., eds.) World Scientific, Singapore, 1996, 163–176.
- [63] López-Marcos, M. A., Sanz-Serna, J. M., Skeel, R. D.: Explicit symplectic integrators using Hessian-vector products. *SIAM J. Sci. Comput.* **18**, (1997) 223–238.
- [64] MacKay, R. S., Meiss, J. D.: *Hamiltonian dynamical systems*, Adam Hilger Publishers, 1987.
- [65] McLachlan, R. I., Quispel, G. R. W.: Splitting methods. *Acta Numerica* **11**, (2002) 341–434.
- [66] Menyuk, C. R.: Some properties of the discrete Hamiltonian method. *Physica D*, **11** 109–129.
- [67] Murua, A., *Métodos simplécticos desarrollables en P-series.*, Tesis doctoral, Universidad de Valladolid, 1995.
- [68] Murua, A., Sanz-Serna, J. M.: Order conditions for numerical integrators obtained by composing simpler integrators. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **357**, (1999) 1079–1100.
- [69] Palencia, C., Sanz-Serna, J. M.: Equivalence theorems for incomplete spaces: an appraisal. *IMA J. Numer. Anal.* **4**, (1984) 109–115.

- [70] Palencia, C., Sanz-Serna, J. M.: An extension of the Lax-Richtmyer theory. *Numer. Math.* **44**, (1984) 279–283.
- [71] Portillo, A., Sanz-Serna, J. M.: Lack of dissipativity is not symplecticness. *BIT* **35**, (1995) 269–276.
- [72] Puig Adam, P., *Curso teórico práctico de ecuaciones diferenciales aplicado a la Física y Técnica. Decima quinta edición*, Madrid, 1978.
- [73] Richtmyer, R. D., Morton, K. W., *Difference methods for initial value problems, 2nd ed.*, Wiley-Interscience, New York, 1967.
- [74] Runge, C.: Ueber die numerische Aflösung von Differentialgleichungen. *Math. Anal.* **46**, (1895) 167–178.
- [75] Runge, C.: Ueber die numerische Aflösung totaler Differentialgleichungen. *Göttinger Nachr.* **46**, (1905) 252–257.
- [76] Ruth, R. D.: A canonical integration technique. *IEEE Trans. Nuclear Science* **30**, (1983) 2669–2671.
- [77] Salburg, D. *The lady tasting tea, how Statistics revolutionized science in the twentieth century*, Freeman, New York, 2001.
- [78] Sanz-Serna, J. M.: Linearly implicit variable coefficient methods of Lambert-Sigurdsson type. *IMA J. Numer. Anal.* **1**, (1981) 39–45.
- [79] Sanz-Serna, J. M.: Stability and convergence in numerical analysis I: Linear problems—A simple, comprehensive account. En *Nonlinear Differential Equations*, (Hale, J. K., Martínez-Amores, P., eds.). Pitman, Boston, 1985, 64–113
- [80] Sanz-Serna, J. M.: Studies in numerical nonlinear instability I. Why do leapfrog schemes go unstable? *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **6**, (1985) 923–938.

- [81] Sanz-Serna, J. M.: Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems. *BIT* **28**, (1988) 877–883.
- [82] Sanz-Serna, J. M.: Two topics in nonlinear stability. En *Advances in Numerical Analysis*, (Light, W., ed.) Clarendon Press, Oxford, 1991, 147–174.
- [83] Sanz-Serna, J. M.: Numerical ordinary differential equations vs. dynamical systems. En *The dynamics of numerics and the numerics of dynamics*, (Broomhead, D. S., Iserles, A., eds.) Clarendon Press, Oxford, 1992, 81–106.
- [84] Sanz-Serna, J. M.: The numerical integration of Hamiltonian problems. En *Computational ordinary differential equations*, (Cash, J. R., Gladwell, I., eds.) Clarendon Press, Oxford, 1992, 437–449.
- [85] Sanz-Serna, J. M.: Symplectic integrators for Hamiltonian problems: an overview. *Acta Numerica* **1**, (1992) 243–286.
- [86] Sanz-Serna, J. M.: Symplectic Runge-Kutta and related methods: recent results. *Physica D* **60**, (1992) 293–302.
- [87] Sanz-Serna, J. M.: An unconventional symplectic integrator of W. Kahan. *Appl. Num. Math.* **16**, (1994) 245–250.
- [88] Sanz-Serna, J. M.: Solving numerically Hamiltonian systems. En *Proceedings of the International Congress of Mathematicians, Zurich 1994*, Birkbhauser, Basel, 1995, 1468–1472.
- [89] Sanz-Serna, J. M.: Backward error analysis of symplectic integrators. En *Integration algorithms and Classical Mechanics*, (Marsden, J. E., Patrick, G. W., Shadwick, W. T., editores), Fields Institute Communications, **10**, American Mathematical Society, (1996) 193–205.
- [90] Sanz-Serna, J. M.: Geometric integration. En *The state of the art in numerical analysis*, (Duff, I. S. y Watson, G. S., editores), Clarendon Press, Oxford, 1997, 121–143.

- [91] Sanz-Serna, J. M., *Diez lecciones de Cálculo Numérico*, Universidad de Valladolid, Valladolid, 1998.
- [92] Sanz-Serna, J. M., Abia, L.: Order conditions for canonical Runge-Kutta schemes. *SIAM J. Numer. Anal.* **28**, (1991) 1081–1096.
- [93] Sanz-Serna, J. M., Calvo, M. P., *Numerical Hamiltonian problems*, Chapman and Hall, London, 1994.
- [94] Sanz-Serna, J. M., Griffiths, D. F.: A new class of results for the algebraic equations of implicit Runge-Kutta processes. *IMA J. Numer. Anal.* **11**, (1991) 449–455.
- [95] Sanz-Serna, J. M., Larsson, S.: Shadows, chaos and saddles. *Appl. Numer. Math.* **13**, (1993) 181–190.
- [96] Sanz-Serna, J. M., Palencia, C.: A general equivalence theorem in the theory of discretization methods. *Math. Comp.* **45**, (1985) 143–152.
- [97] Sanz-Serna, J. M., Portillo, A.: Classical numerical integrators for wave-packet dynamics. *J. Chem. Phys.* **104**, (1996) 2349–2355.
- [98] Sanz-Serna, J. M., Spijker, M. N.: Regions of stability, equivalence theorems and the Courant-Friedrichs-Lewy condition. *Numer. Math.* **49**, (1986) 319–329.
- [99] Sanz-Serna, J. M., Vaddillo, F.: Nonlinear instability, the dynamic approach. En *Numerical Analysis*, (Griffiths, D. F., Watson, A. G., eds.) Pitman, Londres 1986, 187–199.
- [100] Sanz-Serna, J. M., Vaddillo, F.: Studies in numerical nonlinear instability III: augmented Hamiltonian systems, *SIAM J. Appl. Math.* **47**, (1987) 92–108.

- [101] Sanz-Serna, J. M., Verwer, J. G.: Stability and convergence in the PDE/stiff ODE interface. *Appl. Numer. Math.* **5**, (1989) 117–132.
- [102] Sanz-Serna, J. M., Verwer, J. G.: Convergence analysis of one-step schemes in the method of lines. *Appl. Math. Comput.* **31**, (1989) 183–196.
- [103] Sanz-Serna, J. M., Verwer, J. G., Hundsdorfer, W. H.: Convergence and order reduction of Runge-Kutta schemes applied to evolutionary problems in partial differential equations. *Numer. Math.* **50**, (1986) 405–418.
- [104] Shampine, L. F., Gordon, M. K., *Computer solution of ordinary differential equations: the initial value problem*, Freeman, San Francisco, 1975.
- [105] Suris, Y. B.: Preservation of symplectic structure in the numerical solution of Hamiltonian systems. En *Numerical Solution of Differential Equations*, (Filippov, S. S., ed.), Akad. Nauk. SSSR, Ins. Prikl. Mat. Moscow, (1988), 148–160.
- [106] Sussman, G. J., Wisdom, J.: Chaotic evolution of the solar system. *Science*, **257**, (1992) 52–62.
- [107] Verwer, J. G., Sanz-Serna, J. M.: Convergence of method of lines approximations to partial differential equations. *Computing* **35**, (1984) 297–313.
- [108] Warming, R. F., Hyett, B. J.: The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite difference methods. *J. Comput. Phys.* **14**, (1974) 159–179.

**CONTESTACIÓN
DEL
EXCMO. SR. D. AMABLE LIÑÁN MARTÍNEZ**

Excelentísimo Señor Presidente,
Excelentísimos Señores Académicos,
Señoras y señores:

Es para mi un gran honor cumplir con el encargo de dar, en nombre de mis compañeros de la Academia, la bienvenida a la misma al Profesor Jesús María Sanz Serna, mi admirado amigo desde hace muchos años. Tengo también la tarea, especialmente grata, de intentar resumirles los méritos excepcionales que acompañan a quien se incorpora hoy a la Academia. Éstos se derivan de la actividad investigadora, docente y de gestión de una persona de gran honestidad intelectual y extraordinariamente dotada con cualidades polifacéticas para llevarla a cabo.

Más difícil es para mí la tarea de glosar adecuadamente el Discurso de Ingreso que acaban de escuchar, que contiene en su versión escrita una exposición magistralmente elocuente de los métodos de integración numérica que él ha contribuido a desarrollar. Por ello me limitaré a señalar cómo estos métodos pueden ayudar a los que, como el que les habla, se dedican a la Mecánica de Fluidos en la elección de técnicas numéricas para el análisis de los flujos turbillónarios, especialmente cuando como ocurre frecuentemente el movimiento resulta ser turbulento.

Jesús María Sanz Serna nació en Valladolid el 12 de junio de 1953. Siguió sus estudios de bachillerato, que terminó en 1970, en

el colegio San José de Valladolid. Allí tuvo profesores de ciencias que él juzga excepcionales y que tendrán una gran influencia en su actividad profesional posterior. En particular, la Física estaba a cargo de un jesuita, el padre Oñate, que en sus clases hacía hincapié en las observaciones experimentales, con experimentos montados específicamente para cada demostración. Éstos atrajeron enseguida la atención de Jesús Sanz Serna, hasta el punto de pasar las tardes en el Laboratorio de Física ayudando al padre Oñate en el montaje de los experimentos.

Aunque había tenido dudas entre dedicarse en sus estudios universitarios a la Física o la Matemática, en el curso selectivo se decidió por esta última; porque, en el primer año en la Universidad, la enseñanza de la física se hacía sin el apoyo del laboratorio. Juzgó que de dedicarse a la teoría prefería formarse en sus aspectos más básicos. Afortunadamente no abandonó su preocupación por la comprensión y análisis de los fenómenos físicos. Esta preocupación le ha llevado a ilustrar con una gran variedad de aplicaciones físicas los métodos de análisis numérico que él y sus colaboradores han desarrollado; mostrando con ello su profundo conocimiento de los aspectos fundamentales de los fenómenos físicos.

Así pues, siguió en Valladolid sus estudios de licenciatura en Ciencias Matemáticas, que completó en 1975, obteniendo el Premio Extraordinario de Licenciatura. Siguió sus estudios de doctorado en Matemáticas, también en la Facultad de Ciencias de Valladolid, con una tesis dedicada al análisis funcional que terminó en 1977, obteniendo el Premio Extraordinario de Doctorado.

Desde 1975 a 1981 fue Profesor no numerario en la Universidad de Valladolid. Afortunadamente para su actividad posterior se propuso pasar el curso 1978-1979 en la Universidad de Dundee (Escocia), donde hizo un Master en Análisis Numérico. Esta Universidad de Dundee se había convertido entonces en un centro de excelencia en este campo, lo que favorecía una gran concentración de especialistas de prestigio en análisis numérico. Jesús Sanz Serna ha mostrado su satisfacción por haber tenido la oportunidad de esta

estancia (luego seguida por muchísimas visitas de varias semanas) que le marcó enormemente; primero, por lo que significó en su actividad investigadora en matemáticas y, también, por lo que pudo aprender de sus colegas escoceses sobre el talante humano de los grandes investigadores. A su regreso a España obtuvo por oposición, en Enero de 1981, una plaza de Profesor Agregado de Análisis Numérico de la entonces recién creada Universidad del País Vasco. (Es verdaderamente notable que a esa plaza compitió con Alfredo Bermúdez de Castro, creador de una Escuela sobresaliente de Matemática Aplicada, con vocación clara de ocuparse de sus aplicaciones industriales). Permaneció en Bilbao hasta 1982, cuando fue nombrado Catedrático de Análisis Numérico en la Universidad de Valladolid (ahora, después de la creación con la LRU de las áreas de conocimientos, Catedrático de Matemática Aplicada en el Departamento de Matemática Aplicada).

Desde su primera estancia en Dundee su labor docente e investigadora ha estado centrada en el análisis numérico; en tanto que su labor investigadora, caracterizada por su rigor y relevancia, ha estado dedicada esencialmente a la solución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales de evolución. Pero también ha hecho incursiones en otros campos de la Matemática, como: Polinomios ortogonales, ecuaciones diferenciales estocásticas y espacios topológicos. Me parece especialmente significativa su colaboración con los profesores Doblare y Enrique Alarcón al estudio de los métodos de elementos finitos y elementos de contorno para problemas elípticos de análisis estructural y resistencia de materiales.

Su labor docente tuvo como objetivo la formación de investigadores cualificados en el Análisis Numérico. En esta tarea ha tenido un éxito notable, que se refleja en las quince tesis doctorales que ha dirigido y en el prestigio y en las aportaciones de los muchos que componen su Escuela. Sus aportaciones al análisis numérico están dedicadas, como decía antes, a la solución numérica de ecuaciones diferenciales no lineales ordinarias y en derivadas parciales. Incluyen los siguientes campos:

Integración geométrica, que es el tema de su discurso y que nadie puede exponer más claramente que él, dada su sobresaliente contribución a su creación.

Examen crítico de las ideas de estabilidad y convergencia en Análisis Numérico; especialmente en problemas no lineales derivados de la Física o de la Ingeniería, en los que las inestabilidades numéricas pueden coexistir con las propias del sistema que se analiza. Éste es el caso, por ejemplo, de la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky que encontramos al analizar la propagación de llamas; las cuales, debido a inestabilidades, tienen frecuentemente una estructura celular o caótica.

Diseño y análisis de métodos numéricos para ecuaciones en derivadas parciales específicas, como la de Korteweg-de Vries, no-lineal de Schrödinger, de Dirac y el sistema de ecuaciones de Boussinesq de la convección natural.

Diseño y análisis de métodos de nodos móviles para ecuaciones en derivadas parciales dependientes del tiempo.

Sus contribuciones al análisis numérico están recogidas en casi cien artículos, publicados en las revistas más prestigiosas de este campo y en muchos capítulos de libros. También ha escrito dos libros: uno de texto y otro, con su colaboradora M.P. Calvo, publicado en 1994 por Chapman and Hall con el título "Numerical Hamiltonian Problems". Además, ha participado como conferenciante invitado en más de medio centenar de congresos nacionales e internacionales, impartiendo más de cuarenta conferencias plenarias y frecuentemente ciclos de varias conferencias.

El impacto de sus publicaciones se refleja, en particular, en las casi 2200 citas que tiene en las revistas recogidas en el Science Citation Index. Se refleja, además, en su nombramiento como Editor de *Advances in Computational Mathematics*, desde 1992, Senior Editor de *Applied Numerical Analysis*, desde 1992, Consulting Editor de los *Proceedings A* de la Royal Society de Edinburgo, desde 1993. Miembro del Editorial Board de *Nonlinearity* desde 1994 del *IMA Journal of Numerical Analysis* desde 1995.

Para poner un ejemplo del reconocimiento de la labor de Sanz Serna por su contribución a los métodos de integración geométrica, quiero resaltar aquí sus aportaciones a una conferencia internacional, organizada en 1991 por el Centro de Estudios Nolineales de Los Alamos, dedicada a la Matemática Experimental (con el subtítulo: Temas Computacionales en Ciencias Nolineales). Los trabajos presentados, publicados en 1992 en *Physica D*, incluían una fracción importante que estaban dedicados a los métodos simplécticos de integración, iniciados por una conferencia de Sanz-Serna sobre los métodos Runge-Kutta simplécticos. Pero también se incluían otros trabajos sobre otras técnicas numéricas, repletos de aportaciones de Sanz Serna y sus colaboradores, como los dedicados al papel de los invariantes puntuales en la integración de ecuaciones diferenciales ordinarias y a las técnicas shadowing para ecuaciones con soluciones de tipo caótico. El objetivo de la conferencia era señalar el papel que tenía la matemática experimental en los estudios de fenómenos no lineales; entendiendo la matemática experimental como la ciencia del diseño y análisis de modelos matemáticos que permitan llevar a cabo experimentos computacionales para nuestro mejor conocimiento de los fenómenos físicos, con el mismo nivel y eficacia con que se llevan a cabo los estudios teóricos y experimentales tradicionales.

Su aportación al descubrimiento y desarrollo de los métodos de integración geométrica, que nos ha resumido en su Discurso y que nos describe magistralmente en la versión escrita del mismo, le valieron el reconocimiento de la comunidad científica con el premio más distinguido en su campo: el Premio Dahlquist de SIAM (la Sociedad Americana de Matemática Industrial y Aplicada); premio creado para honrar a Germund Dahlquist, uno de los grandes investigadores de los métodos numéricos, siendo Sanz Serna el elegido en la primera edición del premio. No menor fue la distinción de recibir la invitación a impartir una de las conferencias especiales en el Congreso Internacional de Matemáticas, celebrado en Zurich en 1994.

Otros premios de gran relieve han reconocido la importancia de la labor docente e investigadora de Jesús Sanz Serna. Entre ellos, el Premio de esta Real Academia de Ciencias en 1995 y, también en 1995, el Premio Iberdrola de Ciencia y Tecnología, en su tercera edición, que incluía además una beca de dos millones de pesetas para la persona de su equipo que él designase; fue elegido entre 25 candidatos por un Jurado que incluía tres Premio Nobel. La Comunidad de Castilla y León le reconoció también, en 1998, con el Premio de Investigación Científica y Técnica. Desde 1999, ha sido Académico Correspondiente de nuestra Academia.

Sanz Serna ha hecho en su discurso un homenaje a los científicos que han contribuido de un modo fundamental a la creación y al desarrollo de los métodos numéricos para el Análisis Matemático. Curiosamente algunos de estos científicos han jugado también un papel esencial en el desarrollo de la Mecánica de Fluidos; por lo que yo quiero utilizar esta ocasión para contribuir también a este homenaje, y mostrar cómo los métodos numéricos de integración geométrica pueden ser esenciales para proporcionarnos herramientas para el análisis de la dinámica de los fluidos y, en particular, del comportamiento caótico de los flujos turbulentos.

Sanz Serna nos ha recordado cómo los métodos numéricos de integración de las ecuaciones diferenciales nacen con la aportación pionera de Euler. Este año celebramos el nacimiento, hace trescientos años, de Euler, cuyas importantísimas contribuciones a las ciencias no se limitan a las matemáticas. En particular debemos a Euler el descubrimiento, en 1755, de las leyes que gobiernan el movimiento de los fluidos siempre que, como supuso Euler, esté justificado despreciar las fuerzas viscosas frente a las fuerzas de presión. La incorporación de las fuerzas de viscosidad a las ecuaciones del movimiento sólo pudo hacerse en 1823 y 1845 gracias a Navier y a Stokes.

Dado que en una gran variedad de flujos de interés práctico, como por ejemplo el flujo del aire alrededor de vehículos y del agua alrededor de barcos, las fuerzas viscosas son, en la mayor parte del dominio fluido, pequeñísimas frente a las de presión, las

ecuaciones de Euler siguen siendo esenciales para la descripción de esos flujos. Quiero anticiparles aquí que las ecuaciones de Euler admiten una formulación Hamiltoniana y que, por ello, los métodos de integración simpléctica pueden ser, como veremos, utilísimos para obtener soluciones numéricas de las mismas que, sin estar enmascaradas por inestabilidades numéricas, reflejen con la precisión adecuada el carácter caótico de los flujos turbulentos.

Cuando, en 1755, Euler escribió el sistema de ecuaciones, no lineales y en derivadas parciales, que describen el movimiento de los fluidos ideales, lo hizo con una metodología y un lenguaje que seguimos utilizando hoy. Estas ecuaciones se basan en el principio de conservación de la masa y en las ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento que resultan de la forma apropiada de la segunda ley de Newton. Euler añadió a estas ecuaciones una relación que servía para determinar la densidad del fluido en función de la presión y de una propiedad que llamó la calidad térmica local del fluido. Esta relación terminó siendo finalmente encontrada en la Termodinámica de los fluidos, cuando se identifica la calidad térmica con la temperatura; pero entonces las ecuaciones de Euler deben complementarse con la ley de conservación de la energía.

Euler no olvidó añadir a sus ecuaciones las condiciones iniciales y de contorno en la superficie de separación del fluido con los sólidos que lo limitan y que definen cada flujo particular. Señaló que el problema de la dinámica de fluidos quedaba así reducido a un problema de análisis que, sin embargo, no podría abordarse adecuadamente apoyándose únicamente en los métodos entonces disponibles. Por eso, como nos ha recordado Sanz Serna, algunos años después Euler fue pionero en la introducción de los métodos de integración numérica que pudiesen ayudarnos en el análisis de las soluciones de sus ecuaciones.

Ya en 1755 Euler había descubierto que, cuando estaba justificado suponer constante la densidad del fluido, sus ecuaciones admitían soluciones irrotacionales, para las que la velocidad deriva de un potencial que satisface la ecuación que, escrita por primera

vez por él, recibió posteriormente el nombre de Laplace; por la utilización que éste hizo de ella en sus estudios del potencial gravitatorio. Euler era consciente de que sus ecuaciones admitían también otro tipo de soluciones con vorticidad, cuya obtención era mucho más compleja; si bien él la inició describiendo el movimiento bidimensional circulatorio correspondiente a un torbellino axis-simétrico.

La descripción de las soluciones con vorticidad arranca, de un modo efectivo, con el estudio publicado en 1858 por Helmholtz de la dinámica no viscosa de filamentos de vorticidad o torbellinos que, como él demostró, se mueven ligados al fluido. Cuando estos torbellinos tienen su vorticidad concentrada en líneas de torbellinos, con una intensidad definida por la circulación constante de la velocidad alrededor de cada torbellino lineal, el movimiento fluido asociado corresponde a soluciones singulares de las ecuaciones de Euler. (Estos torbellinos lineales juegan un papel fundamental a la dinámica del Helio superfluido).

La ausencia en las ecuaciones de Euler de efectos disipativos, asociados a la viscosidad y conducción de calor, elimina de ellas este mecanismo regularizador que sí tienen las ecuaciones de Navier Stokes. Mientras que estas ecuaciones son de tipo parabólico, y representan flujos irreversibles, las de Euler son de tipo hiperbólico y, como en 1859 nos mostró Riemann, sus soluciones pueden presentar discontinuidades de las derivadas de las magnitudes fluidas en las superficies características. También pueden presentar discontinuidades de las magnitudes fluidas (esto es, de la velocidad, presión y densidad) en ondas de choque, que se mueven con velocidad supersónica respecto al fluido.

Estas discontinuidades aparecen también en las capas de torbellinos, que fueron introducidas en 1868 por Helmholtz para explicar la estructura en forma de chorro, que él observó experimentalmente, en la descarga en aire del aire a presión de un depósito. Considerando el flujo del aire como no viscoso, una capa anular de torbellinos rodearía el chorro de aire que sale del depósito separándolo del aire exterior en reposo. Un año después,

Kirchhoff mostró cómo podía explicarse la resistencia al movimiento estacionario de un cuerpo en el seno de un fluido, si se suponía que una capa de torbellinos, con origen en la superficie del cuerpo¹, limitaba su estela, donde el fluido quedaba en reposo respecto al cuerpo.

Ya en 1870 Kelvin, utilizando las ecuaciones de Euler, demostró que las capas planas de torbellinos son inestables; por lo que éstas se ondulan o enrollan concentrando su vorticidad en torbellinos casi lineales. Esta inestabilidad, que llamamos de Helmholtz-Kelvin, de las capas de torbellinos es en buena medida responsable del carácter caótico que encontramos frecuentemente en las soluciones de las ecuaciones de Euler y en las de las ecuaciones, más realistas, de Navier-Stokes; esta respuesta de tipo caótico es característica de los movimientos turbulentos. Como se dice frecuentemente, los torbellinos, que hemos de tener en cuenta al buscar soluciones realistas de las ecuaciones de Euler, son los tendones y músculos de los flujos turbulentos, determinantes de su estructura y de muchas de sus propiedades.

La aparición de las capas de torbellinos en los flujos reales con valores altos del número de Reynolds (que mide la relación entre las fuerzas de presión y viscosas) está asociada, como nos enseñó Prandtl, al desprendimiento de la capa límite²; la cual se

¹ En el movimiento no viscoso alrededor de cuerpos con superficies angulosas, con esquinas, no aparecen velocidades infinitas si la capa de torbellinos se origina en la esquina y se cumple la condición de Kutta, que exige que la capa de torbellinos salga tangente a una de las partes de la superficie.

² La Teoría de la Capa Límite fue presentada por Prandtl en el Tercer Congreso Internacional de Matemáticas, celebrado en Heidelberg en 1904, en un trabajo que revolucionó nuestro conocimiento de la Dinámica de Fluidos. Analizó los casos tan comunes en la práctica en que los efectos de la viscosidad pueden desprejarse en la mayor parte del campo fluido; pero no en la capa límite adyacente al cuerpo, ni en las capas de torbellinos que se originan por desprendimiento de la capa límite, ni en el interior de las ondas de choque que descubrió Riemann. Ludwig Prandtl acababa de incorporarse a Göttingen junto a Carl Runge, ambos procedentes de la Escuela Técnica Superior de Hamburgo, para dirigir los Institutos de Mecánica y Matemática Aplicada; creados gracias a

prolonga en el seno del fluido como las capas de torbellinos de Helmholtz y Kirchhoff. Estas capas de torbellinos que se enrollan posteriormente de manera que la vorticidad se concentra en torno a líneas que, para simplificar el análisis del flujo, tratamos a menudo como torbellinos lineales (a los que denominamos puntuales cuando el movimiento es bidimensional, plano).

Éste es el caso de los torbellinos cuya dinámica analizó von Kármán en un trabajo, presentado en el Quinto Congreso Internacional de Matemáticas celebrado en Londres en 1912, donde describió, utilizando las ecuaciones de Euler, la estructura de la estela en el movimiento bidimensional alrededor de cilindros. Los torbellinos se generan por enrollamiento de las capas de torbellinos originadas por el desprendimiento de la capa límite a ambos lados del cilindro. Se sitúan en su estela en dos filas, al trespelillo, con una relación apropiada entre la distancia transversal y longitudinal de los torbellinos, para la cual el flujo es marginalmente estable; siendo inestable, como demostró von Kármán, para cualquier otra disposición de los torbellinos³. La configuración de esta estela, denominada calle de torbellinos de Kármán, es la que se observa experimentalmente y explica los tonos eólicos y, también la resistencia del aire al movimiento del cilindro.

Los flujos con altos números de Reynolds se comportan como no viscosos en la mayor parte del campo fluido y, entonces, pueden ser descritos mediante las ecuaciones de Euler, que admiten una formulación Hamiltoniana. Por ello, para su análisis son muy útiles los métodos de integración numérica desarrollados por Sanz Serna.

las gestiones de Felix Klein, quien estaba muy interesado en que la Universidad jugase un papel relevante en las aplicaciones de las ciencias que requería el desarrollo tecnológico alemán.

³ Nuestro académico correspondiente Javier Jiménez ha podido demostrar, teniendo en cuenta las propiedades simplécticas del flujo, de tipo Hamiltoniano, que la propiedad de estabilidad marginal de la configuración de la calle de torbellinos de Kármán, que éste supuso lineales, se mantiene también para torbellinos con vorticidad distribuida, si ésta se encuentra suficientemente concentrada.

Como él nos dice, cuando un sistema es Hamiltoniano el flujo de sus soluciones es una transformación simpléctica del espacio de las fases, en la que se conserva una colección de áreas multidimensionales. Al elegir el método numérico tenemos que asegurar que el flujo asociado al mismo tiene las mismas propiedades de conservación que el del problema original.

Las ecuaciones generales de la Mecánica de Fluidos, debido a los efectos de la viscosidad y conducción de calor, no son de tipo Hamiltoniano y no corresponden a flujos reversibles, En cambio sí lo son las Ecuaciones de Euler, que no incluyen los efectos disipativos anteriores, pero que tienen un espacio de las fases con infinitos grados de libertad. Para la descripción de los flujos no viscosos, Euler elige un sistema de referencia y busca determinar en función del tiempo y de las tres coordenadas espaciales que caracterizan los puntos del espacio euclídeo, las variables fluidas dependientes fundamentales representadas por los valores locales de la densidad, de la presión y de las tres componentes de la velocidad. La formulación Euleriana conduce a un sistema cerrado de ecuaciones que, en principio, puede resolverse sin necesidad de conocer las trayectorias de las partículas fluidas. Una vez conocido el campo de velocidades pueden calcularse, si se desea, estas trayectorias de las partículas fluidas; estando éstas definidas por su posición en el espacio como función del tiempo y de las coordenadas que caracterizan su posición inicial.

Estas trayectorias de las partículas fluidas, junto con los valores que en ellas tienen la presión y densidad del fluido, constituyen las variables dependientes fundamentales de la descripción Lagrangiana del flujo. Ésta, por su mayor complejidad frente a la descripción Euleriana, es de uso poco frecuente en Mecánica de Fluidos. Ambas descripciones, Lagrangiana y Euleriana, de los flujos no viscosos, admiten una formulación Hamiltoniana que es más directa en el primer caso. La simplicidad de la descripción Euleriana de los flujos no viscosos, con un número más reducido de variables dependientes, está asociada a la invariancia del Ha-

miltoniano ante cambios en el etiquetado usado para la posición inicial de las partículas.

La no linealidad de las ecuaciones y los infinitos grados de libertad de los flujos, tanto viscosos como no viscosos, hace inviable la obtención de soluciones generales e incluso de descripciones cualitativas de carácter general de la estructura de las soluciones, las cuales son frecuentemente de tipo caótico; por ello, el esfuerzo fue dirigido pronto a la búsqueda de soluciones particulares. Así por ejemplo ya Kirchhoff, en 1876, observó que la descripción de los movimientos bidimensionales de fluidos no viscosos, no limitados por fronteras, con vorticidad concentrada en líneas perpendiculares al flujo (lo que llamamos torbellinos puntuales, con una intensidad determinada por la circulación de la velocidad a su alrededor), tenía una dinámica de tipo Hamiltoniano, como un sistema dinámico de partículas discretas con $2N$ grados de libertad, correspondientes a las $2N$ coordenadas de los N torbellinos, en el movimiento bidimensional plano.

Dado que existen integrales primeras del sistema de ecuaciones que determina la dinámica de los N torbellinos⁴, es posible reducir a cuadraturas el problema cuando N es menor o igual que 3; pero no cuando N es igual o mayor que 4. En cierto modo, el problema asociado a la dinámica bidimensional de estos torbellinos puntuales es análogo al de la dinámica tridimensional de masas gravitatorias tratadas como puntuales; en este caso el problema de los dos cuerpos puede ser resuelto mediante cuadraturas, en tanto que el problema de los tres cuerpos no admite un tratamiento tan simple. Poincaré abordó no sólo la dinámica de los tres cuerpos (lo que le llevó a enfrentarse, él por primera vez, con los problemas del caos determinístico), sino también con los problemas asociados a la dinámica de torbellinos; recogidos en una monografía "Théorie des Tourbillons", que publicó en 1883.

⁴ Véase el artículo de H. Aref, publicado en 1982 en Ann. Rev. Fluid Mechanics, Vol. 15, pp 345-389, con el título "Integrable, chaotic, and turbulent motion in two-dimensional flows".

Cuando para la determinación de la estructura de las soluciones caóticas es necesario proceder a la integración de las ecuaciones para tiempos muy grandes, la utilización de los métodos simplécticos se hace imprescindible. Este es el caso de la dinámica del sistema solar (que como demostró Laxar es de carácter caótico) cuando se pretende calcular su respuesta en períodos de cientos de millones de años; como hicieron Sussman y Wisdom utilizando las técnicas de integración geométrica.

La dinámica de torbellinos puntuales cuando N es igual o mayor que cuatro puede ser o no de tipo caótico. El análisis de la respuesta caótica fue abordado por Pullin y Saffmann⁵ haciendo uso de los métodos de integración simpléctica propuestos por Sanz Serna y comparándolos con los métodos de integración que no mantienen las simetrías asociadas a la geometría simpléctica.

Uno de los objetivos era someter el método de integración simpléctica a pruebas de tipo muy estricto, analizando un sistema dinámico de cuatro torbellinos con una función hamiltoniana fuertemente no lineal y con respuesta de tipo caótico. Así se podría asegurar la disponibilidad de herramientas de cálculo, para tiempos grandes, de la dinámica caótica de flujos con torbellinos, que pudiese utilizarse para la evaluación de valores medios estadísticos temporales, y para la validación de los modelos de cierre para las ecuaciones que describen estos valores medios en los flujos turbulentos.

Las ecuaciones que describen el movimiento bidimensional de los cuatro torbellinos, esto es la evolución temporal de las ocho coordenadas de los torbellinos puntuales, constituyen un sistema Hamiltoniano, con cuatro integrales del movimiento: el Hamiltoniano, o exceso de energía de los torbellinos puntuales, y los valores de la cantidad de movimiento lineal y angular. Así pues, es posible reducir, como hicieron Pullín y Saffman, el sistema a

⁵ Pullin, D.I. y Saffman, P.G. : "Long-Time Symplectic Integration: The Example of Four-Vortex Motion". *Proceedings, Mathematical and Physical Sciences, Royal Soc. London* Vol 432, N° 1886, pp.481-494, 1991.

uno también Hamiltoniano, y de tipo canónico, de 4 grados de libertad. Cuando un parámetro, asociado a las condiciones iniciales, toma valores en un cierto intervalo el movimiento, caracterizado por las secciones de Poincaré, resulta ser cuasi-periódico o caótico. El método de Runge-Kutta de tipo simpléctico propuesto por Sanz Serna produjo imágenes de gran precisión de las secciones de Poincaré y la integración podía extenderse hasta tiempos significativamente muy grandes; lo que no era posible sin utilizar los métodos que no respetaban los invariantes de Poincaré.

He querido resaltar aquí la importancia que tienen para la comunidad científica dedicada a la Mecánica de Fluidos los métodos de integración geométrica que ha potenciado y desarrollado Jesús Sanz Serna. Esta importancia se deriva de la necesidad de disponer de métodos, libres de inestabilidades numéricas, para analizar los flujos que han perdido su estabilidad al aumentar el número de Reynolds, y terminan siendo turbulentos; lo que no nos exime de intentar su descripción con métodos numéricos. Geoffrey Saffman, uno de los científicos más distinguidos de la Mecánica de Fluidos, autor del libro más importante sobre dinámica de torbellinos, publicado por Cambridge University Press con el título *Vortex Dynamics*, ha mostrado, en el trabajo en colaboración con D.I. Pullin que he citado antes, cómo los métodos de integración simpléctica podían jugar un papel esencial en el análisis de los flujos con vorticidad.

Pero aunque he intentado mostrar con más detalle la relevancia del trabajo de Sanz Serna en mi campo de actividad, es también evidente su relevancia para muchos otros campos. Nuestra Academia de Ciencias representa al conjunto de las ciencias y la atención a los aspectos interdisciplinarios debe ser una de las preocupaciones importantes de sus miembros y pocos están tan cualificados como Jesús Sanz Serna para cumplir este objetivo.

No quiero terminar sin resaltar ahora otro de los aspectos más relevantes de la personalidad del Profesor Sanz Serna: su honestidad intelectual y su capacidad como organizador y como gestor. No sólo ha sido y sigue siendo miembro del Comité Científico de las

revistas nacionales e internacionales más importantes de su campo, ha sido también creador de la Sociedad Española de Matemática Aplicada y contribuyó de modo esencial a la reconstitución de la Real Sociedad Matemática Española. Su preocupación por los problemas de la enseñanza e investigación en la Universidad le llevaron a aceptar el reto de contribuir a resolverlos presentándose, en 1998, a Rector de la Universidad de Valladolid; cargo que ha ocupado hasta el pasado año, después de ser reelegido en 2002. Ha sido Vocal y Presidente de la Ponencia de Física y Matemáticas de la Dirección General de Investigación en el período 1991-1994 y Vocal del Comité de Matemáticas y Física de la Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora.

Termino agradeciendo el ofrecimiento que Jesús María Sanz Serna nos hizo, al principio de su Discurso, de intentar contribuir desde la Academia a que ésta juegue un papel importante en la política científica nacional. Estoy seguro de que, con sus excepcionales méritos y cualidades como científico, organizador y gestor, él ayudará a conseguir que esta esperanza se haga realidad.

Gracias, finalmente, por el tesón con que con tu trabajo, y tu preocupación por su relevancia, has aprovechado tus cualidades para enriquecer una trayectoria y una obra ejemplares. Ellas son las buenas razones que te han traído a esta Casa, la cual se honra al acogerte en su seno.

Muchas gracias

Amable Liñán