

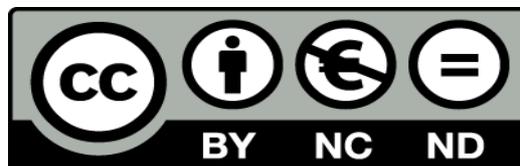


UNIVERSIDAD DE LA RIOJA

TESIS DOCTORAL

Título
Técnicas de computación científica aplicada al ámbito de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica
Autor/es
Rosario López Gómez
Director/es
Juan Félix San Juan Díaz
Facultad
Facultad de Ciencias, Estudios Agroalimentarios e Informática
Titulación
Departamento
Matemáticas y Computación
Curso Académico
2014-2015

Tesis presentada como compendio de publicaciones. La edición en abierto de la misma NO incluye las partes afectadas por cesión de derechos



Técnicas de computación científica aplicada al ámbito de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica, tesis doctoral

de Rosario López Gómez, dirigida por Juan Félix San Juan Díaz (publicada por la Universidad de La Rioja), se difunde bajo una Licencia

Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 3.0 Unported. Permisos que vayan más allá de lo cubierto por esta licencia pueden solicitarse a los titulares del copyright.

- © El autor
- © Universidad de La Rioja, Servicio de Publicaciones, 2015
publicaciones.unirioja.es
E-mail: publicaciones@unirioja.es

Técnicas de computación científica
aplicada al ámbito de la Mecánica
Celeste y de la Astrodinámica



TESIS DOCTORAL

2015

Rosario López Gómez

Departamento de Matemáticas y Computación
Facultad de Ciencias, Estudios Agroalimentarios e Informática
Universidad de La Rioja

Técnicas de computación científica
aplicada al ámbito de la Mecánica
Celeste y de la Astrodinámica

*Memoria que presenta para optar al título de
Doctor Ingeniero Informático*

Rosario López Gómez

Dirigida por el Doctor

Juan Félix San Juan Díaz

**Departamento de Matemáticas y Computación
Facultad de Ciencias, Estudios Agroalimentarios e
Informática**

Universidad de La Rioja

*A mis compañeros de trabajo, por su comprensión,
a toda la gente de la Fundación Rioja Salud,
a mis amigos,
pero sobre todo a mis padres y a ti, Manu,
por el constante apoyo y cariño*

Agradecimientos

Con mi más sincero agradecimiento para todos los que habéis hecho posible este trabajo, en especial a Juan Félix San Juan, capitán de este barco, siempre dando lo mejor de ti. Eres todo un ejemplo a seguir. Te agradezco tu ayuda, tu fidelidad y, sobre todo, tu amistad. A Iván Pérez y Montserrat San Martín, también compañeros incondicionales en esta singladura. Siempre estaré agradecida de tener amigos como vosotros.

El doctorando, así como su director de Tesis, quieren mostrar su agradecimiento al Dr. D. Eliseo Vergara González y al Servicio Informático de la Universidad de La Rioja por las facilidades proporcionadas para la puesta en marcha de *Astrody^{Web}Tools*.

Finalmente, dar las gracias a la Dra. Dña. María Íñiguez por su implicación en el diseño de las especificaciones y protocolos de la plataforma web de análisis bioinformático, fruto del acuerdo de colaboración entre el Grupo de Computación Científica de la Universidad de La Rioja y el Centro de Investigación Biomédica de La Rioja.

Este trabajo ha sido financiado a través de los Proyectos de I+D+I *Fomenta 2010/16* (Consejería de Educación, Cultura y Turismo, Gobierno de La Rioja) y *ESP2014-57071-R* (Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad, Ministerio de Economía y Competitividad, Gobierno de España).

Índice

Agradecimientos	VII
Introducción	XIX
Antecedentes	XIX
Publicaciones	XXIV
Continuación de los trabajos	XXV
Estructura del documento	XXVII
1. Computación científica: Manipulación algebraica	3
1.1. Introducción	3
1.2. Transformaciones de Lie	4
1.2.1. Conceptos básicos de mecánica hamiltoniana	4
1.2.2. Teoría de perturbaciones basada en transformaciones de Lie	6
1.3. MathATESAT	8
1.4. Ecuación generalizada de Kepler	11
1.4.1. Teoría analítica de primer orden	12
1.4.2. La ecuación de Kepler	14
1.4.3. La ecuación generalizada de Kepler	15
1.4.4. Resultados numéricos	16
2. El proyecto $Astrody_{Tools}^{Web}$	33
2.1. Introducción	33
2.2. $Astrody_{Tools}^{Web}$: proyecto colaborativo	35
2.3. Arquitectura básica del sistema	36
2.4. Aplicaciones integradas en $Astrody_{Tools}^{Web}$	38
2.4.1. Orbit Propagator Programs	38
2.4.2. Zonal Earth Repeating Ground-track Orbit Finder	43
2.4.3. Repeating Ground-track Orbit Finder	46
2.4.4. DSST	47
2.5. Ejemplos de utilización	59

2.5.1. PPKBJ6 OPP	59
2.5.2. DSST Web	64
3. De las estrellas al conocimiento del genoma humano	73
3.1. Introducción	73
3.2. $Bioinfo_{Tools}^{Web}$: secuenciación masiva paralela	75
3.3. Ejemplo de análisis bioinformático: análisis de DNA exoma	77
3.3.1. Protocolo de análisis de exoma	81
3.4. Limitaciones en la secuenciación de exoma	85
4. Resultados	91
4.1. PPKBZ9 ^{A,S.A.} : dos propagadores analíticos	92
4.1.1. La ecuación generalizada de Kepler	93
4.2. El método de Lie-Deprit revisado	94
4.3. Revisión de la eliminación de la paralaje	95
4.4. $Astrody_{Tools}^{Web}$: un proyecto de e-Ciencia	96
4.5. El proyecto $Bioinfo_{Tools}^{Web}$	96
5. Conclusiones y trabajos futuros	101
5.1. Conclusiones	101
5.2. Líneas de trabajo futuras	104
A. Artículo I	109
B. Artículo II	111
C. Artículo III	123
D. Artículo IV	125
Bibliografía	127

Índice de figuras

1.	Visualización científica. Espacio fásico de un oscilador armónico perturbado utilizando la técnica <i>painting by number</i>	XXII
1.1.	Coefficiente del término e^{29} del desarrollo en serie de potencias de la ecuación de Kepler.	10
1.2.	Tiempo de proceso y número de términos en función del orden del desarrollo para la inversión de la ecuación de Kepler.	11
1.3.	Tiempo de proceso y número de términos en función del orden del desarrollo para la función $(r/a)^4 \cos 5f$	11
1.4.	Representación gráfica de ε^* ($-J_2/2 \leq \varepsilon^* \leq J_2/4$).	16
1.5.	Parámetro $\varepsilon^*(a = 7\,200, i)$	17
1.6.	El método de Newton-Raphson utilizando S_1 como valor inicial del proceso iterativo.	19
1.7.	Gráficas de $f_{gk}(E)$ para $i_1 = 0^\circ$, $M = \pi$ y tres valores de excentricidad: 0.91, 0.92 y 0.925.	20
1.8.	El método de Halley utilizando S_1 como valor inicial del proceso iterativo.	21
1.9.	El método de Danby utilizando S_1 como valor inicial del proceso iterativo.	22
1.10.	El método de Newton-Raphson utilizando S_2 como valor inicial del proceso iterativo.	24
1.11.	El método de Halley utilizando S_2 como valor inicial del proceso iterativo.	25
1.12.	El método de Danby utilizando S_2 como valor inicial del proceso iterativo.	26
1.13.	El método de Newton-Raphson utilizando S_3 como valor inicial del proceso iterativo.	27
1.14.	El método de Halley utilizando S_3 como valor inicial del proceso iterativo.	28
1.15.	El método de Danby utilizando S_3 como valor inicial del proceso iterativo.	29

1.16. Tiempo empleado en la convergencia del método con un error de 10^{-14} (MNR en verde, MH en azul y MD en rojo). Los casos 1, 2, 3 y 4 corresponden a las inclinaciones 0° , 53° , 55° y 90° , respectivamente.	30
2.1. Roles y modos de colaboración en el proyecto <i>Astrody^{Web}_{Tools}</i>	36
2.2. Esquema de la arquitectura de <i>Astrody^{Web}_{Tools}</i>	37
2.3. Suite OPP alojada en <i>Astrody^{Web}_{Tools}</i>	39
2.4. Interfaz web de la suite OPP.	40
2.5. Ejecución del modelo <i>ppkbj2or3</i> de la suite OPP para un satélite de tipo Quasi-Spot.	40
2.6. Resultado de la ejecución del modelo <i>ppkbj2or3</i> de la suite OPP para un satélite de tipo Quasi-Spot.	41
2.7. Traza de la órbita para un satélite de tipo Quasi-Spot.	42
2.8. Test de la energía para un satélite de tipo Quasi-Spot.	42
2.9. Evolución del semieje mayor para un satélite de tipo Quasi-Spot.	42
2.10. Evolución de los términos de largo periodo ($e \cos g$, $e \sin g$) para un satélite de tipo Quasi-Spot.	42
2.11. Error del semiejemayor (km) para un satélite de tipo Quasi-Spot.	43
2.12. Error de posición (km) para un satélite de tipo Quasi-Spot.	43
2.13. Ejecución de ZERGOF para una órbita cuasi-circular.	44
2.14. Resultado de la ejecución de ZERGOF para una órbita cuasi-circular.	45
2.15. ZERGOF: traza de una órbita cuasi-circular.	46
2.16. ZERGOF: evolución de los términos de largo periodo ($e \cos g$, $e \sin g$) para una órbita cuasi-circular.	46
2.17. Fichero <i>pmef.txt</i>	51
2.18. Encapsulado de DSST en <i>Astrody^{Web}_{Tools}</i>	52
2.19. Interfaz web del propagador semianalítico DSST (parte 1 de 3).	53
2.20. Interfaz web del propagador semianalítico DSST (parte 2 de 3).	54
2.21. Interfaz web del propagador semianalítico DSST (parte 3 de 3).	55
2.22. Página de ejecución de DSST Web.	55
2.23. Nuevo formato <i>.csv</i> del fichero de datos de usuario de DSST Web.	56
2.24. Plantilla Excel para la creación del fichero <i>pmef.csv</i> (1 de 2).	57
2.25. Plantilla Excel para la creación del fichero <i>pmef.csv</i> (2 de 2).	58
2.26. Página de salida de resultados de DSST Web.	59
2.27. Proceso de evaluación del propagador PPKBJ6.	61
2.28. Ejemplo de cómo se muestra OPP tras introducir los datos.	62

2.29. Ejemplo de salida para la órbita sun-synchronous cuasi-circular calculada mediante ZERGOF ($a = 7\,266.466\text{ km}$, $e = 0.00114$, $i = 99.0028^\circ$, $\omega = 90^\circ$).	64
2.30. Comportamiento de la evolución de los términos de largo periodo obtenida a través del gráfico ($e \sin g$, $e \cos g$) para el caso de una órbita sun-synchronous cuasi-circular.	64
2.31. Condiciones iniciales en DSST Web para el caso de una órbita GTO (parte 1 de 3).	65
2.32. Condiciones iniciales en DSST Web para el caso de una órbita GTO (parte 2 de 3).	66
2.33. Condiciones iniciales en DSST Web para el caso de una órbita GTO (parte 3 de 3).	67
2.34. Resultado de la ejecución de DSST Web para el caso de una órbita GTO.	68
2.35. Evolución temporal de la excentricidad, inclinación y argumento del perigeo en DSST Web.	69
3.1. Esquema del proceso de análisis de ultrasecuenciación.	78
3.2. Proceso de análisis de exoma.	79
3.3. Interfaz de creación/edición para un análisis de DNA exoma.	85
3.4. Interfaz de visualización para un análisis de DNA exoma.	86

Índice de tablas

1.1. Valores seleccionados para inicializar los métodos de Newton-Raphson, Halley y Danby.	16
1.2. Número de iteraciones (%) empleado por los métodos MNR, MH y MD, utilizando como valores iniciales S_2 y S_3 , para las inclinaciones 0° , 53° , 55° y 90°	30
2.1. Modelo de movimiento medio en DSST.	49
2.2. Modelo de movimiento de corto periodo en DSST.	49
2.3. Parámetros de entrada a cualquiera de los OPPs.	62
2.4. Elementos keplerianos medios.	65

*El genio es un uno por ciento de inspiración
y un noventa y nueve por ciento de sudor*



THOMAS A. EDISON

Introducción

Antecedentes

Hoy en día la computación científica se ha convertido en una herramienta indispensable tanto para el avance científico como tecnológico. Los modelos matemáticos que describen fenómenos físicos, como por ejemplo el movimiento de un satélite artificial o el de un resto de basura espacial, así como los cálculos matemáticos, numéricos, simbólicos, estadísticos o de inteligencia computacional empleados en la resolución de este problema, pueden ser aplicados a otras ramas de la Ciencia y de la Tecnología.

Es difícil delimitar el ámbito de la computación científica, pero en un sentido amplio del término hace referencia al conjunto de teorías, técnicas y herramientas empleadas en la resolución de problemas en los campos científico y tecnológico utilizando el computador como herramienta principal. Tradicionalmente, la computación científica ha jugado un papel crucial en el desarrollo de disciplinas tan diversas como la Astrofísica, la Astrodinámica, la Mecánica Celeste, la Mecánica Cuántica, la Relatividad, la Química, la Biología y en el de otras áreas científicas y tecnológicas, así como en el avance de la Informática. En este sentido, cabe destacar que los problemas que motivaron la construcción de los primeros computadores, el desarrollo de los primeros compiladores o el nacimiento de Internet procedían de las áreas científicas y técnicas.

Una de las primeras aplicaciones de las técnicas de computación científica se encuentra en la teoría de sistemas dinámicos. Tanto el análisis cualitativo como el cuantitativo de un sistema dinámico requieren el uso de potentes herramientas de visualización y de complejas técnicas analíticas y numéricas. Dichas técnicas caracterizan y proporcionan valiosa información sobre la evolución del flujo del sistema dinámico, sus puntos de equilibrio, bifurcaciones, etcétera.

En particular, la búsqueda de soluciones analíticas a los problemas de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica ha contribuido al desarrollo de los sistemas de computación científica, tanto los de carácter general, que permiten tratar una amplia variedad de problemas, como los de carácter específico, diseñados para resolver eficientemente un único tipo de problema. Los prime-

ros sistemas de carácter específico datan de 1959 [70], aunque la contribución clave se presentó en 1965 [41]. En este trabajo, los autores propusieron una aproximación algebraica al problema, la cual les permitió representar sobre estructuras de datos fijas los objetos matemáticos manipulados, así como definir operaciones sobre ellas. El objeto matemático fundamental que aparece en este tipo de problemas es frecuentemente conocido como *serie de Poisson* [41, 44]. Una serie de Poisson se define como una serie de Fourier multivariada cuyos coeficientes son series de Laurent en la forma

$$\sum_{i_0, \dots, i_{n-1}, j_0, \dots, j_{m-1}} C_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{j_0, \dots, j_{m-1}} x_0^{i_0} \dots x_{n-1}^{i_{n-1}} \begin{pmatrix} \text{sen} \\ \text{cos} \end{pmatrix} (j_0 y_0 + \dots + j_{m-1} y_{m-1}),$$

donde $C_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{j_0, \dots, j_{m-1}} \in \mathbb{R}$.

Una de las principales dificultades que caracterizan la resolución de los problemas de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica es la aparición de series de Poisson formadas por cientos o miles de términos. Esta dificultad hizo necesario el desarrollo de sistemas especializados que fuesen capaces de manipular dichas series de forma eficiente. Tradicionalmente, estos sistemas han sido denominados *Procesadores de Series de Poisson* (PSP). Entre ellos cabe destacar: MAO (Mechanized Algebraic Operations, [123]), TRIGMAN (Trigonometric Manipulator, [75]), Broucke's Processor [15], MAO!! [47], PSPC (Poisson Series Processor in C, [1]), etcétera. A la vez que se crearon este tipo de sistemas altamente especializados, se comenzaron a desarrollar otros de propósito general que integraban una gran variedad de herramientas de tratamiento simbólico, gráfico, numérico, etcétera. MACSYMA [12], Magma [14], Scratchpad [146], MuPAD [57], REDUCE [68], *Mathematica* [153] o Maple [25] son algunos ejemplos de este tipo de sistemas de carácter general. Sin embargo, inicialmente, estos sistemas generales se mostraron ineficientes en comparación con los de propósito específico.

Utilizando PSPC como sistema de cómputo, San Juan [125] implementó la aplicación ATESAT (Automatización de Teorías analíticas y cálculo de Efemérides para el problema del SATélite artificial) [2, 124, 126, 127]. Este programa permite construir de forma automática una teoría analítica, junto con su correspondiente programa de cálculo de efemérides, para describir el movimiento de un satélite artificial sometido a la atracción gravitacional de un planeta a partir de las características seleccionadas por el usuario. Tanto PSPC como ATESAT se encuentran instalados en el Centre National d'Études Spatiales (CNES).

Sin embargo, la Mecánica Celeste y la Astrodinámica han evolucionado mucho desde entonces. Los computadores son cada vez más potentes, tal y como pronostica la ley de Moore. Los sistemas de cálculo simbólico y manipulación algebraica de propósito general son cada más eficientes, permitiendo abordar problemas cada vez más complejos. Por el contrario, la mayoría de los PSP se han quedado obsoletos, bien porque sus diseños están fuertemente

ligados a las plataformas en las que fueron implementados, bien porque están programados en lenguajes muy poco flexibles e inadecuados para este tipo de problemas no numéricos.

En nuestro caso, PSPC también se quedó obsoleto, poniéndose de manifiesto sus limitaciones. Por ejemplo, PSPC no disponía de aritmética racional o de múltiple precisión y no permitía el tratamiento de pequeños divisores ni de funciones especiales, entre otras limitaciones. En consecuencia, el desarrollo de ATESAT se detuvo y se consideró la necesidad de reemplazar PSPC por un sistema de carácter general, ya que las limitaciones que este tipo de sistemas presentaban inicialmente habían desaparecido.

Surge entonces MathATESAT [133] como un entorno que implementa y extiende las funcionalidades proporcionadas por ATESAT, utilizando *Mathematica* como motor de cálculo. Actualmente, MathATESAT permite construir órdenes altos de teorías analíticas, esto es, proporciona la función generatriz, el Hamiltoniano transformado y los cambios de coordenadas después de aplicar una o varias transformaciones de Lie, con el objetivo de realizar análisis cualitativos o cuantitativos en los casos de sistemas keplerianos u osciladores armónicos perturbados [116, 117, 136, 140].

Cuando se necesita realizar el análisis cualitativo de un sistema dinámico, el cálculo de órbitas periódicas, la determinación de líneas de bifurcación, la representación gráfica de su espacio fásico, etcétera, MathATESAT hace uso de las capacidades numéricas así como de las herramientas de visualización científica que incorpora *Mathematica*. La visualización científica es utilizada para simplificar el análisis y la comprensión de un sistema dinámico. La figura 1, por ejemplo, representa el espacio fásico de un oscilador armónico perturbado después de normalizar el problema. Esta técnica de visualización científica recibe el nombre de *painting by number* [29, 67] y su primera implementación se realizó en una Connection Machine. Posteriormente se han desarrollado diferentes aplicaciones que permiten hacer uso de esta técnica en ordenadores personales [115]. La figura 1 ha sido realizada utilizando la función `ParametricPlot3D[]` de *Mathematica*.

Por otra parte, si lo que interesa es el análisis cuantitativo de un sistema dinámico, MathATESAT genera automáticamente los correspondientes programas de evaluación en C/C++ para cada una de las series que componen la teoría analítica, junto con un programa principal que organiza su evaluación. Cuando el sistema dinámico corresponde al problema del satélite artificial, tales programas constituyen un *propagador orbital*, el cual puede ser empleado en diferentes etapas del análisis y diseño de misiones espaciales, o en la propagación de catálogos de basura espacial. A lo largo de esta Tesis Doctoral se utiliza MathATESAT, por un lado, para el desarrollo de teorías analíticas de alto orden aplicada a los sistemas keplerianos perturbados en los que se está trabajando, y por otro, para la implementación de los propagadores orbitales derivados de estas teorías.

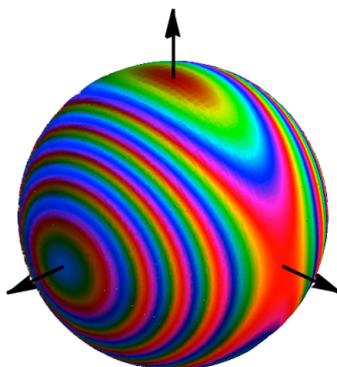


Figura 1: Visualización científica. Espacio fásico de un oscilador armónico perturbado utilizando la técnica *painting by number*.

Conviene destacar que la computación científica ha sido tradicionalmente un valioso aliado de la Informática, ya que ha proporcionado algunos de los problemas que han permitido importantes avances tanto del hardware como del software. Del mismo modo, la computación científica también se puede beneficiar de alguno de los frutos de esta simbiosis, en particular de la World Wide Web (WWW) y de la computación de altas prestaciones (HPC). Es importante recordar que la World Wide Web se desarrolló en el CERN (Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire) como un medio de comunicación entre grupos de investigación de diferentes países.

El uso de Internet ha abierto nuevas vías de colaboración en casi todos los campos científicos y tecnológicos [40, 64, 141]. Desde sus inicios, el movimiento *open access* o de acceso abierto, se ha expandido internacionalmente y ha calado muy profundamente en el ámbito de las universidades, muy preocupadas tanto por la comunicación científica, con el consiguiente impacto de sus investigaciones, como por el acceso a la información científica y otros recursos por parte de sus investigadores. Por ejemplo, a través de Internet es posible ejecutar sofisticadas aplicaciones como servicios web [35, 36, 80, 94, 118, 154]. Así, *Open-Science*, *e-Science*, *e-Research*, *e-Learning* y *e-Collaboration* se han convertido en términos comunes hoy día en el ámbito educativo e investigador, permitiendo aunar esfuerzos para compartir conocimiento, crear y usar software especializado, así como dar solución a determinadas clases de problemas. Las ventajas del acceso abierto para los investigadores, aunque evidentes, no son todavía suficientemente reconocidas por toda la comunidad científica. La publicación rápida de los resultados de las investigaciones, así como la posibilidad de compartirlas y reutilizarlas, les dotan de una mayor visibilidad, con el consiguiente incremento en el impacto de las investigaciones y, en definitiva, en el avance de la Ciencia.

En este contexto surge *Astrody_TWeb* [130, 133] como un proyecto web sin

ánimo de lucro que tiene como objetivo proporcionar acceso libre a aplicaciones y herramientas no comerciales, altamente especializadas en los ámbitos de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica.

Este proyecto permite, por un lado, alojar diferentes aplicaciones científicas desarrolladas por diversos investigadores o grupos de investigación en un entorno web, facilitando de este modo que científicos y estudiantes de cualquier parte del mundo puedan ejecutarlas en tiempo real con la única ayuda de un navegador web. Si originariamente estas aplicaciones fueron creadas para su uso en un sistema UNIX con una serie de ficheros de entrada y valores introducidos a través de una consola de texto, el uso de este nuevo entorno web facilita su ejecución. De este modo, se estaría hablando de un entorno en el que, a través de la petición de un cliente web (un navegador), se cumplimentan una serie de campos de un formulario, recogiendo así las funciones y parámetros necesarios que luego son enviados al servicio web. El servicio web opera sobre la aplicación o aplicaciones solicitadas y una vez terminada la ejecución devuelve una respuesta con los resultados, mostrándolos en el navegador y facilitando también su almacenamiento por parte del usuario. Por otro lado, con este proyecto se pretende acercar al estudiante a las teorías y métodos sobre los que se sustentan este tipo de aplicaciones, creando contenidos e-Learning que muestren de una manera didáctica todo este conocimiento demandado en los estudios de máster y doctorado de algunas universidades. Cuando estos cursos estén disponibles, *Astrody^{Web}_{Tools}* constituirá una herramienta aún más valiosa en los laboratorios universitarios.

Teniendo como horizonte las necesidades del investigador, en un entorno global y virtual, sin barreras geográficas, este repositorio de software se convierte en un servicio a la carta, puesto que está a disposición de los investigadores que quieran utilizarlo como plataforma de trabajo y difusión de la producción científica.

El único requisito necesario para que una nueva aplicación sea alojada en *Astrody^{Web}_{Tools}* es que pueda ser ejecutada desde una línea de comandos en un entorno UNIX, independientemente del lenguaje de programación en el que esté implementada. Esta flexibilidad no sólo permite la integración de nuevas aplicaciones basadas en sofisticados diseños orientados a objetos, sino también la reutilización de aplicaciones heredadas, que han quedado obsoletas desde el punto de vista tecnológico. Puesto que la Tesis Doctoral cuenta con un capítulo dedicado a este proyecto, únicamente destacar aquí que en la actualidad 65 usuarios, pertenecientes a 40 organizaciones de 15 naciones, utilizan *Astrody^{Web}_{Tools}*.

Finalmente, el diseño y las técnicas aplicadas en este proyecto pueden ser extendidas a otros ámbitos. De hecho, al mismo tiempo que se continúa con el desarrollo de *Astrody^{Web}_{Tools}* se ha comenzado a construir *Bioinfo^{Web}_{Tools}* en colaboración con el Centro de Investigación Biomédica de La Rioja (CIBIR).

Esta infraestructura ya está dando apoyo bioinformático en la aplicación de técnicas cuantitativas de análisis en el modelado de sistemas biológicos. Este nuevo proyecto permitirá crear un marco de colaboración en el que podrán participar investigadores y estudiantes de los ámbitos de la Biología y de las Ciencias de la Computación.

Publicaciones

En el primero de los artículos que se integran en esta Tesis Doctoral, “*PPKBZ9^{A,SA} Two orbit propagators based on an analytical theory*” [134], se diseñan dos propagadores de órbitas a partir de una teoría analítica que se ha implementado en MathATESAT [133]. El modelo de perturbaciones que se considera incluye los ocho primeros armónicos zonales del potencial terrestre. La eliminación de los términos de largo periodo producidos por el argumento del perigeo se realiza mediante una combinación de dos transformaciones de Lie: la eliminación de la paralaje [45] y la eliminación del perigeo [7]. Para finalizar, los términos de corto periodo se integran utilizando el método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky [13, 79]. Con este trabajo se ha extendido el modelo previo de perturbaciones (modelo que incluía hasta el armónico J_6 y que fue desarrollado para el Centre National d’Études Spatiales, CNES, en el estudio de órbitas de Marte) incluyendo los armónicos J_7 , J_8 y J_9 y se ha construido una teoría analítica de segundo orden en forma cerrada de la excentricidad. Excepto para la inclinación crítica, la teoría es válida para cualquier valor de excentricidad e inclinación, incluso los cercanos a cero [108].

El primer propagador de órbitas, $PPKBZ9^A$, es completamente analítico, mientras que en el segundo, $PPKBZ9^{SA}$, las transformaciones de variables se realizan de forma numérica. Estos propagadores son aplicados a los casos de satélites en órbita alrededor de la Tierra y de Marte.

En el segundo artículo, “*A Note about Certain Arbitrariness in the Solution of the Homological Equation in Deprit’s Method*” [138], se revisa el método de Lie-Deprit, que es utilizado para la construcción de las transformaciones de Lie. En él se analiza cierta arbitrariedad que surge cuando se invierte el operador de Lie, proceso que permite obtener la función generatriz de la transformación de Lie. Esta arbitrariedad es intrínseca a todos los métodos de perturbaciones, si es seleccionada de forma adecuada puede ser utilizada con diversos propósitos: para demostrar la equivalencia entre los diferentes métodos de perturbaciones, para eliminar determinados términos de la función generatriz [78, 84], o para eliminar a la vez varios ángulos o combinar simultáneamente diferentes efectos. Por su importancia, esta generalización del método de Lie-Deprit ha sido incluida también en MathATESAT.

Una de las consecuencias derivadas de la arbitrariedad de todos los mé-

todos de perturbaciones es la de poder combinar simultáneamente diferentes efectos. De ahí que en el artículo tercero, “*Deprit’s Elimination of the Parallax Revisited*” [139], se revise la construcción de la eliminación de la paralaje utilizando el método descrito en [138], en el cual se considera que las funciones arbitrarias son no nulas. El efecto que se consigue con esta versión extendida de la eliminación de la paralaje es equivalente al que se obtiene con la eliminación de la latitud [18, 26, 27, 28, 46], o cuando la eliminación de la paralaje se combina con la eliminación del perigeo [7]. La versión extendida de la eliminación de la paralaje se ha aplicado al problema principal de la teoría del satélite artificial hasta orden 6 en forma cerrada de la excentricidad. También se muestran resultados de las comparaciones numéricas hasta el cuarto orden de esta transformación frente a la combinación de la eliminación de la paralaje y del perigeo.

La implementación de estos avances y desarrollos teóricos se realiza en los sistemas software en los que el Grupo de Computación Científica lleva años trabajando. Para poner estos programas y su conocimiento a disposición de la comunidad científica se ha hecho uso de la tecnología web y se ha creado *Astrody_{Tools}^{Web}*, presentado en el último de los cuatro artículos que forman parte de esta Tesis Doctoral y que lleva por título “*Astrody_{Tools}^{Web} an e-Science project in Astrodynamics and Celestial Mechanics fields*” [92]. *Astrody_{Tools}^{Web}* [130, 133] es un proyecto que permite unificar y difundir rápidamente el uso de las aplicaciones que fueron desarrolladas en el seno del Grupo de Computación Científica al que pertenece el doctorando, fundamentalmente por el Dr. San Juan, al cual se ha ido sumando seguidamente el trabajo de los miembros del Grupo, así como aplicaciones desarrolladas por otros expertos del ámbito de la Astrodinámica, como Zonal Earth Repeating Ground-track Orbit Finder (ZERGOF), desarrollada por el Dr. Lara. Draper Semianalytical Satellite Theory (DSST) Standalone, desarrollada por el equipo del Dr. Cefola, entre otras. Se trata por tanto de un proyecto abierto a la comunidad científica, con un entorno que hace posible el uso inmediato de aplicaciones de forma gratuita a través de Internet, y que brinda la posibilidad de utilizarlas sin tener en cuenta la posición geográfica en la que esté el usuario, la potencia de cálculo de su computador o el sistema operativo que tenga instalado.

Con este fin, se ha construido una infraestructura web alojada en los servidores de la Universidad de La Rioja que permite que todo investigador pueda solicitar la inclusión de sus programas y ofrecer su uso abierto. Dicha infraestructura web, como ya se ha comentado, está siendo aplicada también por este doctorando al campo de la Bioinformática con importantes resultados [93].

Continuación de los trabajos

El doctorando, junto con otros miembros del Grupo de Computación Científica, ha continuado trabajando en la línea de investigación presentada en esta Tesis Doctoral con posterioridad a la publicación de los artículos que incorpora, e incluye en la misma contenidos adicionales de dichos trabajos.

Se está trabajando en dos vías. Por una parte, se continúa con el desarrollo de teorías analíticas de alto orden aplicadas a sistemas keplerianos perturbados. La determinación de la posición y velocidad de un satélite utilizando cualquiera de los propagadores orbitales de la familia PPKB depende de la resolución precisa de la ecuación de Kepler. En este sentido, se está investigando en la ecuación generalizada de Kepler. Al igual que la ecuación clásica de Kepler, la generalizada tampoco puede ser invertida mediante funciones elementales, debido a que también es trascendente en E . Sin embargo, se puede obtener una solución analítica aproximada aplicando el teorema de la función inversa de Lagrange [43, 129], utilizando técnicas de perturbaciones basadas en transformaciones de Lie no canónicas. El objetivo que se persigue es determinar el grado de precisión de la expresión analítica en función del valor de la excentricidad, de modo que pueda ser utilizada para generar soluciones precisas en el proceso de evaluación de los propagadores analíticos de la familia PPKB. Además, se está trabajando en la inclusión de los términos tesorales no resonantes m-daily para mejorar las prestaciones de dichos propagadores. Para abordar el primer problema ha sido necesario implementar las transformaciones de Lie no canónicas en MathATESAT. El segundo problema requiere la mejora de los métodos de evaluación de series de Poisson y la investigación en técnicas de paralelización [135], ya que la inclusión de los armónicos tesorales m-daily incrementa significativamente el número de términos de las series de Poisson.

Parte de este trabajo ha sido presentado en el 25th AAS/AIAA Space Flight Mechanics Meeting, que tuvo lugar en Williamsburg, Virginia (USA), entre el 11 y el 15 de enero de 2015 [137], y nuevos avances serán presentados en el 2015 AAS/AIAA Astrodynamics Specialist Conference que se celebrará en Vail, Colorado (USA), entre el 9 y el 13 de agosto de 2015.

Por otra parte, se continúa trabajando para incrementar el número de aplicaciones disponibles en $Astrody_{Tools}^{Web}$, así como para la creación del entorno de e-Learning que permita compartir el conocimiento que hay detrás de cada aplicación. Como ya se ha expuesto, el modelo propuesto en este proyecto se está aplicando con éxito al ámbito de la Bioinformática en una colaboración entre el Grupo de Computación Científica (GRUCACI) y el Centro de Investigación Biomédica de La Rioja (CIBIR). De forma análoga a $Astrody_{Tools}^{Web}$, este nuevo proyecto, $Bioinfo_{Tools}^{Web}$, está dotando a la Plataforma de Genómica del CIBIR de todas las herramientas necesarias para automatizar los procesos de análisis bioinformáticos del servicio de ultrase-

cuenciación mediante el tratamiento computacional y estadístico de los datos generados por el ultrasecuenciador de un modo totalmente transparente, integrado y eficiente. Un ejemplo de este servicio es el análisis de secuencia que incluye la realización de alineamientos, la muestra de estadísticas de DNA y proteínas, la búsqueda de patrones, el análisis de mutaciones, etcétera, lo cual implica la integración de varios programas informáticos, así como scripts desarrollados por el propio doctorando.

Estructura del documento

En el Capítulo 1 se introducen algunos conceptos básicos de mecánica hamiltoniana y de teoría de perturbaciones basada en transformaciones de Lie, junto con MathATESAT, aplicación en la que se implementan los métodos y algoritmos anteriores, y que permite desarrollar las teorías analíticas necesarias para comprender los tres primeros artículos que integran esta Tesis Doctoral. Seguidamente, se aborda el problema de las incertidumbres numéricas detectadas en la resolución de la ecuación generalizada de Kepler. Esta ecuación trascendente, que generaliza la ecuación clásica de Kepler, relaciona el tiempo con una generalización de la anomalía verdadera, y es una pieza clave en el correcto funcionamiento de los propagadores orbitales de la familia PPKB. En el Capítulo 2 se describen brevemente el proyecto $Astrody_{Tools}^{Web}$ y las aplicaciones que actualmente incorpora. En el capítulo 3, aunque no es el objeto central de esta Tesis Doctoral, se presenta uno de los módulos que conforman la plataforma $Bioinfo_{Tools}^{Web}$, que, a modo de ejemplo, permite ilustrar la aplicación del modelo $Astrody_{Tools}^{Web}$ y, en general, las técnicas de computación científica, a otras ramas de la Ciencia, en este caso la Biología. En el Capítulo 4 se procede al resumen y discusión de los resultados más relevantes, tanto de los artículos incorporados como de las líneas actuales de trabajo recogidas en los capítulos precedentes. En el Capítulo 5 se presentan las conclusiones de la investigación realizada, junto con las vías previstas de continuación. Por último, los Apéndices A, B, C y D recogen los cuatro artículos que componen esta Tesis Doctoral.

*La frase más excitante que se puede oír en Ciencia,
la que anuncia nuevos descubrimientos,
no es ¡Eureka! sino “Es extraño...”*



ISAAC ASIMOV

Capítulo 1

Computación científica: Manipulación algebraica

Resumen

En este capítulo se introducen algunos conceptos básicos de mecánica hamiltoniana y de teoría de perturbaciones basada en transformaciones de Lie empleados en los tres primeros artículos de esta Tesis Doctoral. Se describe el método de Lie-Deprit, que ha sido empleado para construir las eliminaciones de la paralaje y del perigeo, y se introduce el método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky, que se aplica para integrar el Hamiltoniano transformado. A lo largo de los tres artículos presentados se han estudiado estas técnicas [134], se ha revisado y extendido el método de Lie-Deprit, y finalmente todo ello ha sido aplicado hasta obtener el orden 6 de las eliminaciones clásica y extendida de la paralaje y del perigeo utilizando MathATESAT [138, 139]. El capítulo continúa describiendo brevemente MathATESAT, entorno que implementa y amplía las funcionalidades proporcionadas por ATESAT [124, 125, 126], y que utiliza *Mathematica* como motor de computación simbólica de carácter general. Para finalizar, se aborda el problema de las incertidumbres numéricas detectadas en la resolución de la ecuación generalizada de Kepler. Esta ecuación trascendente, que generaliza la ecuación clásica de Kepler, relaciona el tiempo con una generalización de la anomalía verdadera, y constituye una pieza clave para el correcto funcionamiento de los propagadores orbitales de la familia PPKB.

1.1. Introducción

Uno de los campos que ha supuesto un impulso para la computación científica es el de la manipulación algebraica de expresiones matemáticas. En particular, se ha aplicado a la búsqueda de soluciones analíticas en los

problemas de los ámbitos de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica. En estos problemas, el principal objeto matemático que aparece, aunque no el único, es la serie de Poisson. Tradicionalmente, una serie de Poisson se define como una serie de Fourier multivariada cuyos coeficientes son series de Laurent en la forma

$$\sum_{i_0, \dots, i_{n-1}, j_0, \dots, j_{m-1}} C_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{j_0, \dots, j_{m-1}} x_0^{i_0} \cdots x_{n-1}^{i_{n-1}} \begin{pmatrix} \text{sen} \\ \text{cos} \end{pmatrix} (j_0 y_0 + \cdots + j_{m-1} y_{m-1}),$$

donde $C_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{j_0, \dots, j_{m-1}} \in \mathbb{R}$.

La necesidad de un tratamiento eficiente de estos objetos matemáticos por medio del computador llevó al desarrollo de sistemas de cómputo especializados, llamados Procesadores de Series de Poisson, ya que en sus inicios, los sistemas de carácter general no podían ni manipular ni almacenar las series de Poisson que se generan a lo largo de la resolución de este tipo de problemas. Es importante destacar que estas series pueden contener cientos o miles de términos. Sin embargo, hoy en día, las capacidades tanto de los sistemas de carácter general como de los computadores permiten resolver estos problemas, y otros que involucran a objetos matemáticos más complejos, sin demasiado esfuerzo.

1.2. Transformaciones de Lie

1.2.1. Conceptos básicos de mecánica hamiltoniana

Definición Un *sistema Hamiltoniano* es un sistema dinámico definido por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{X}}, \\ \dot{\mathbf{X}} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{x}}, \end{aligned} \tag{1.1}$$

donde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ son las coordenadas y $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n) \in \mathbb{R}^n$ los momentos o momentos conjugados. El espacio \mathbb{R}^{2n} de coordenadas y momentos se denomina *espacio fásico*.

La función $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, t)$ recibe el nombre de *función de Hamilton* o *Hamiltoniano*; cuando \mathcal{H} no depende del tiempo se dice que el sistema es *autónomo*. El número de grados de libertad del sistema viene representado por n . Las ecuaciones (1.1) son llamadas *ecuaciones de Hamilton*.

Las ecuaciones de Hamilton se expresan matricialmente de la siguiente forma

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathcal{J} \nabla_{\mathbf{z}} \mathcal{H}(\mathbf{z}, t),$$

donde $\mathbf{z} = (\mathbf{x}, \mathbf{X})$ y \mathcal{J} es una matriz cuadrada $2n \times 2n$, formada por submatrices nulas $\mathbf{0}$ e identidad \mathbf{I} de orden $n \times n$

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

La matriz \mathcal{J} es una matriz ortogonal y hemisimétrica.

Cabe observar que la derivada de una función $F(\mathbf{x}, \mathbf{X}, t)$ bajo la acción del flujo inducido por las ecuaciones de Hamilton de \mathcal{H} es

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \nabla_{\mathbf{x}} F \dot{\mathbf{x}} + \nabla_{\mathbf{X}} F \dot{\mathbf{X}} + \frac{\partial F}{\partial t} \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} F \nabla_{\mathbf{X}} \mathcal{H} - \nabla_{\mathbf{X}} F \nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{H} + \frac{\partial F}{\partial t} \\ &= \{F, \mathcal{H}\} + \frac{\partial F}{\partial t}. \end{aligned}$$

Definición Sean $f(\mathbf{x}, \mathbf{X})$ y $g(\mathbf{x}, \mathbf{X})$ dos funciones diferenciables en $\mathbf{x}, \mathbf{X} \in \mathbb{R}^n$. Se define el *paréntesis de Poisson* de f con g , $\{f, g\}$, como

$$\{f, g\} = \nabla_{\mathbf{x}} f \nabla_{\mathbf{X}} g - \nabla_{\mathbf{X}} f \nabla_{\mathbf{x}} g = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial X_i} - \frac{\partial f}{\partial X_i} \frac{\partial g}{\partial x_i} \right).$$

Propiedades

1. Antisimétrica:

$$\{f, g\} = -\{g, f\}.$$

2. Linealidad. Sean α y β dos constantes, entonces

$$\{\alpha f + \beta g, h\} = \alpha \{f, h\} + \beta \{g, h\}.$$

3. Identidad de Jacobi. Sean f, g y h tres funciones arbitrarias, entonces

$$\{\{f, g\}, h\} + \{\{g, h\}, f\} + \{\{h, f\}, g\} = 0.$$

4. Regla del producto:

$$\{f, g * h\} = \{f, g\} * h + g * \{f, h\}.$$

Definición Se dice que $F(\mathbf{x}, \mathbf{X}, t)$ es una integral primera del sistema Hamiltoniano con Hamiltoniano \mathcal{H} si es una constante del movimiento, esto es si $\dot{F} = 0$ bajo la acción del flujo inducido por \mathcal{H} .

Teorema $F(\mathbf{x}, \mathbf{X}, t)$ es una integral primera del sistema Hamiltoniano con Hamiltoniano \mathcal{H} si $\{\mathcal{H}, F\} = 0$.

Conviene observar que un Hamiltoniano \mathcal{H} describe la evolución de un sistema dinámico en el espacio de las fases (\mathbf{x}, \mathbf{X}) . Sobre \mathcal{H} es posible aplicar cambios de coordenadas, aunque en un caso general no se puede garantizar que estos cambios mantengan la forma de las ecuaciones de Hamilton.

Definición Una transformación de coordenadas es canónica si conserva la estructura de las ecuaciones de Hamilton.

Formalmente, dado el sistema Hamiltoniano

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathcal{J} \nabla_{\mathbf{z}} \mathcal{H}(\mathbf{z}, t),$$

con $\mathbf{z} = (\mathbf{x}, \mathbf{X})$ y sea $\mathbf{Z} : z_i \rightarrow Z_i(z_i)$ una transformación de coordenadas. Las ecuaciones de Hamilton transformadas quedan

$$\dot{\mathbf{Z}} = (\mathcal{J} \mathcal{J}^T) \nabla_{\mathbf{Z}} \mathcal{H}(\mathbf{Z}, t),$$

donde J es el Jacobiano de \mathbf{Z} . Entonces la estructura de las ecuaciones de Hamilton se conserva si $\mathcal{J} \mathcal{J}^T = J$.

Teorema El paréntesis de Poisson es invariante bajo transformaciones canónicas.

1.2.2. Teoría de perturbaciones basada en transformaciones de Lie

Definición Una transformación de Lie es una transformación canónica

$$\phi : (\mathbf{x}', \mathbf{X}', \varepsilon) \rightarrow (\mathbf{x}, \mathbf{X}),$$

definida por la solución del sistema de ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{d\varepsilon} &= \nabla_{\mathbf{X}} \mathcal{W}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \varepsilon), \\ \frac{d\mathbf{X}}{d\varepsilon} &= -\nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{W}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \varepsilon), \end{aligned} \tag{1.2}$$

que satisface las condiciones iniciales $\mathbf{x}(\mathbf{x}', \mathbf{X}', 0) = \mathbf{x}'$ y $\mathbf{X}(\mathbf{x}', \mathbf{X}', 0) = \mathbf{X}'$. La función \mathcal{W} es la generadora de ϕ y puede ser expresada como el siguiente desarrollo en serie de potencias en el parámetro ε :

$$\mathcal{W}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \varepsilon) = \sum_{i \geq 0} \frac{\varepsilon^i}{i!} W_{i+1}(\mathbf{x}, \mathbf{X}).$$

En el caso Hamiltoniano, la teoría de perturbaciones trata de transformar el Hamiltoniano

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \varepsilon) = \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_n(\mathbf{x}, \mathbf{X}) \equiv \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_{n,0}(\mathbf{x}, \mathbf{X}),$$

en un nuevo Hamiltoniano

$$\mathcal{K}(\mathbf{x}', \mathbf{X}', \varepsilon) = \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{K}_n(\mathbf{x}', \mathbf{X}') \equiv \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_{0,n}(\mathbf{x}', \mathbf{X}'),$$

el cual satisface algunos prerequisites específicos. Uno de los métodos más utilizados para construir esta transformación fue propuesto por Deprit [42].

El método de Lie-Deprit proporciona un algoritmo que permite construir una transformación de Lie. Este método busca una función generatriz \mathcal{W} de ϕ de modo que los términos \mathcal{H}_n , \mathcal{K}_n y \mathcal{W}_n verifican la siguiente ecuación en derivadas parciales, llamada *ecuación homológica*,

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}(\mathcal{W}_n) + \mathcal{K}_n = \tilde{\mathcal{H}}_{0,n}, \quad (1.3)$$

donde $\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}$ es el operador de Lie asociado a \mathcal{H}_0 , un operador lineal dado en términos del paréntesis de Poisson por

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0} : F \rightarrow \{F, \mathcal{H}_0\}.$$

La parte derecha de la ecuación (1.3), $\tilde{\mathcal{H}}_{0,n}$, se calcula a partir de las funciones \mathcal{H}_n , $(\mathcal{W}_i)_{1 \leq i \leq n-1}$ y $(\mathcal{H}_{p,q})_{p+q \leq n-1}$, donde $\mathcal{H}_{p,q}$ es una función que se obtiene a partir de la formula recursiva

$$\mathcal{H}_{i,j} = \mathcal{H}_{i+1,j-1} + \sum_{k=0}^i \binom{i}{k} \{\mathcal{H}_{i-k,j-1}, \mathcal{W}_{k+1}\},$$

con $i \geq 0$ y $j \geq 0$ (para más detalles, véanse las referencias [42, 69, 76]).

Una vez que la función generatriz \mathcal{W} ha sido calculada, las transformaciones directa e inversa de ϕ pueden ser obtenidas de dos maneras diferentes: o bien a través de los propios algoritmos clásicos recurrentes [42, 76], o bien teniendo en cuenta la propia definición de la transformación de Lie, la cual permite aplicar un método de integración numérica al problema inicial y calcular una aproximación para las transformaciones directa e inversa, sin necesidad de usar su expresión explícita [11, 77].

1.3. MathATESAT

En esta sección no se pretende dar una descripción detallada de MathATESAT [133], pero puede ser de utilidad proporcionar algunos detalles de cómo se ha llevado a cabo su implementación. MathATESAT es un entorno que incorpora y amplía las funcionalidades proporcionadas por ATESAT [2, 124, 126, 127] utilizando *Mathematica* como motor de cálculo. *Mathematica* no es tan eficiente como PSPC [1], pero a diferencia de los Procesadores de Series de Poisson clásicos, *Mathematica* no impone ninguna restricción en el número y tipo de variables (polinómicas o trigonométricas), en los límites de los exponentes, en los valores de los coeficientes o en el tipo de aritmética de los objetos matemáticos que manipula.

MathATESAT permite el desarrollo de teorías analíticas de alto orden aplicadas a sistemas keplerianos u osciladores armónicos perturbados. Esto es, proporciona la función generatriz, el Hamiltoniano transformado y los cambios de variables después de aplicar una o varias transformaciones de Lie, con el objetivo de realizar un análisis cuantitativo o cualitativo, en combinación con los recursos gráficos de *Mathematica*.

La inversión de la ecuación de Kepler

$$E - e \operatorname{sen} E = M, \quad (1.4)$$

y los desarrollos de los coeficientes

$$\left(\frac{r}{a}\right)^n \cos mf \quad \text{y} \quad \left(\frac{r}{a}\right)^n \operatorname{sen} mf,$$

en función de la anomalía media M y de la excentricidad e son importantes herramientas analíticas que aparecen en muchos problemas del ámbito de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica. El problema del satélite artificial y las teorías planetarias [19, 65, 102] son algunos ejemplos.

Además del interés intrínseco de estas funciones, su cálculo ha sido tradicionalmente utilizado como un test para medir la eficiencia de los sistemas, tanto generales como especializados, de computación científica. Cabe destacar que, aunque los primeros órdenes de estos desarrollos han sido obtenidos con anterioridad por muchos autores, en esta sección se ha seguido el trabajo de Deprit y Deprit [47], con el fin de reproducir en MathATESAT los resultados que estos autores obtuvieron utilizando el Procesador de Series de Poisson MAO!!.

MAO!! fue una reimplementación de Mechanized Algebraic Operations (MAO) [123], desarrollado por Miller en 1984. MAO!! fue codificado en una extensión de Common Lisp, y ejecutado en una Connection Machine modelo CM-2, con 2^{16} procesadores, perteneciente al U. S. Naval Research Laboratory.

Así, se ha reproducido la inversión de la ecuación de Kepler y el desarrollo de $(r/a)^4 \cos 5f$ utilizando el mismo método propuesto por Deprit y Deprit. En el caso de la ecuación de Kepler, el método propuesto [43] aplica el teorema de la función implícita de Lagrange, el cual se basa en el uso de transformaciones de Lie no canónicas y en que cualquier función $G(E)$ analítica, en un entorno de $E = M$, se puede expresar como un desarrollo en serie de potencias de e en la forma

$$G(E) = G(M) + \sum_{j \geq 1} \frac{e^j}{j!} \frac{d^{j-1}}{dM^{j-1}} \left[\sin^j M \frac{d}{dM} G(M) \right]. \quad (1.5)$$

Aunque en [47] los desarrollos que se muestran son de orden 30, inusualmente altos para las aplicaciones en Mecánica Celeste, se presenta aquí el desarrollo de orden 200 en el caso de la ecuación de Kepler, y 120 para el desarrollo de $(r/a)^4 \cos 5f$, como un test para MathATESAT y, por extensión, para *Mathematica*. Los ejemplos han sido desarrollados utilizando exclusivamente aritmética racional, y han sido ejecutados en un computador Mac Pro 2×3 GHz Quad-Core Intel Xeon.

La figura 1.1 muestra el coeficiente del término e^{29} del desarrollo en serie de potencias de la ecuación de Kepler; como puede comprobarse, este coeficiente e^{29} coincide con el mostrado en la figura 5 de la página 193 de [47].

La figura 1.2 (a) muestra los tiempos empleados por las versiones 6 y 7 de *Mathematica* en función del orden del desarrollo. Conviene notar que *Mathematica* 7 es aproximadamente un 15% más eficiente que la versión 6 cuando se incrementa el orden. Por otro lado, el tiempo empleado para el desarrollo de orden $n = 30$ es de alrededor de 10.13 segundos, mientras que el tiempo requerido por MAO!!, ejecutado en la Connection Machine, es de alrededor de 400 segundos (para más detalles véase la figura 8 en la página 198 de [47]). Además, la figura 1.2 (b) muestra la eficacia de *Mathematica* para manipular series de Poisson con miles de términos; por ejemplo, para el caso $n = 200$ el número de términos es de 10 101.

Por otro lado, para el desarrollo de la función $(r/a)^n \cos mf$ se siguen los mismos pasos propuestos en [47]:

1. Por medio de transformaciones de Lie se obtienen los desarrollos de $\cos(E - M)$ y de $\sin(E - M)$ en series de e y de M .
2. A partir de la relación $\cos E = \cos M \cos(E - M) - \sin M \sin(E - M)$ se obtiene el desarrollo de $e \cos E$ en series de e y de M .
3. A continuación se calcula $r/a = 1 - e \cos E$.
4. A partir de la ecuación de Kepler se obtiene que $a/r = \partial E / \partial M$.

$$\begin{aligned}
e^{29} = & \frac{1}{30601861255040514307758489600000} \operatorname{sen} M \\
& - \frac{129140163}{197426745697337815859200000} \operatorname{sen} 3 M \\
& + \frac{11920928955078125}{14635087932080914095314829312} \operatorname{sen} 5 M \\
& - \frac{1341068619663964900807}{200005757089298206477516800000} \operatorname{sen} 7 M \\
& + \frac{984770902183611232881}{222967968042797603225600000} \operatorname{sen} 9 M \\
& - \frac{13109994191499930367061460371}{21544421800842254737421107200000} \operatorname{sen} 11 M \\
& + \frac{1192533292512492016559195008117}{42536422529868041404651929600000} \operatorname{sen} 13 M \\
& - \frac{1539470708370208740234375}{2746965366287266471739392} \operatorname{sen} 15 M \\
& + \frac{1667711322168688287513535727415473}{293912381724235269285504614400000} \operatorname{sen} 17 M \\
& - \frac{33600614943460448322716069311260139}{1051896945118315700600753356800000} \operatorname{sen} 19 M \\
& + \frac{173185820137589432516494811541}{164463253395999398297600000} \operatorname{sen} 21 M \\
& - \frac{5843211045545439551605946764725979847}{28241146243937388918302834688000000} \operatorname{sen} 23 M \\
& + \frac{88817841970012523233890533447265625}{374138705439682528389675953946624} \operatorname{sen} 25 M \\
& - \frac{7509466514979724803946715958257547}{51333915282493292190629888000000} \operatorname{sen} 27 M \\
& + \frac{3053134545970524535745336759489912159909}{81842841814930553085241614925824000000} \operatorname{sen} 29 M.
\end{aligned}$$

Figura 1.1: Coeficiente del término e^{29} del desarrollo en serie de potencias de la ecuación de Kepler.

5. Seguidamente se calcula $\cos f = (a/r)(\cos E - e)$ como la multiplicación de dos series de Poisson.

Para finalizar, cualquier múltiplo de $\cos jf$, con $j \geq 2$, se puede obtener como la relación de inducción

$$\cos jf = 2 \cos f \cos(j-1)f - \cos(j-2)f.$$

En la figura 1.3 se muestra el tiempo empleado en el proceso de cálculo en función del orden del desarrollo de $(r/a)^4 \cos 5f$. En este caso el tiempo se

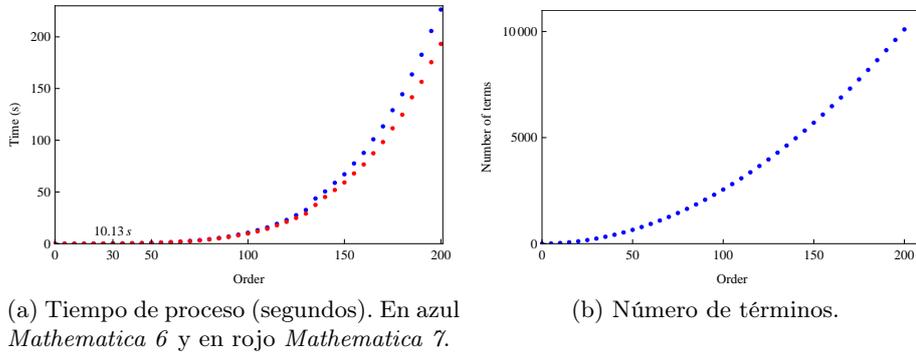


Figura 1.2: Tiempo de proceso y número de términos en función del orden del desarrollo para la inversión de la ecuación de Kepler.

incrementa notablemente respecto al primer ejemplo. Para el desarrollo de orden $n = 30$ el tiempo empleado es de alrededor de 16.86 segundos, mientras que el tiempo utilizado por MAO!!, ejecutado en la Connection Machine, es de alrededor de 1200 segundos (para más detalles, véase la figura 10 en la página 199 de [47]).

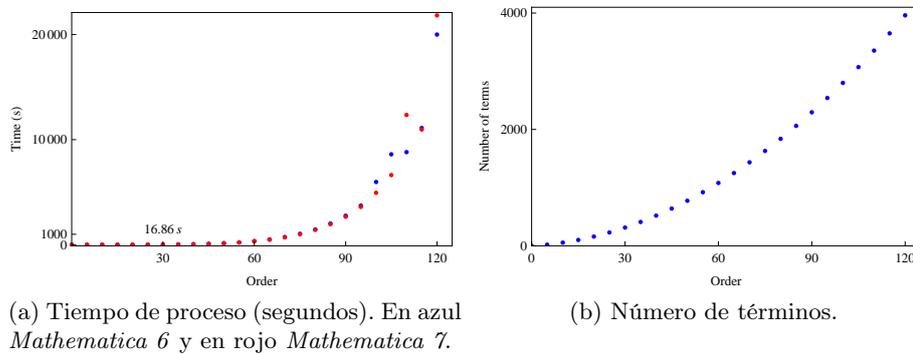


Figura 1.3: Tiempo de proceso y número de términos en función del orden del desarrollo para la función $(r/a)^4 \cos 5f$.

1.4. Ecuación generalizada de Kepler

En esta sección se introduce una ecuación trascendente que generaliza a la ecuación de Kepler (1.4). Esta ecuación aparece cuando se aplica el método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky [79] para obtener una solución analítica aproximada en el problema zonal del satélite artificial [3, 128, 133, 134, 138, 137].

El caso más simple en el que aparece esta ecuación trascendente es el

problema principal del satélite artificial. En este problema, el achatamiento terrestre, representado por el armónico zonal J_2 , es la única perturbación considerada. Esta ecuación, al igual que la ecuación de Kepler, no puede ser invertida en términos de funciones elementales, debido a que también es trascendente en la anomalía excéntrica E y, por tanto, es habitualmente resuelta utilizando métodos numéricos [34, 37, 38, 58, 96, 103, 105, 106, 113, 142, 145, 147]. Es importante destacar que los problemas de convergencia en la solución de la ecuación generalizada de Kepler se traducen en problemas de convergencia en la determinación de la posición y velocidad del satélite en la familia de propagadores orbitales PPKB.

La ecuación de Kepler ha sido estudiada durante más de tres centurias debido a su importancia en Mecánica Celeste y en Astrodinámica. Durante este tiempo se han desarrollado multitud de algoritmos para resolver este problema; una revisión histórica puede verse en [33].

En esta sección se aplican tres métodos numéricos para la resolución de la ecuación generalizada de Kepler, Newton-Raphson, Halley y uno propuesto por Danby y Burkardt, así como tres valores para inicializar estos métodos, dos de ellos propuestos en [37], y que han sido ampliamente utilizados en la literatura, y el tercero es la propia solución de la ecuación clásica de Kepler.

1.4.1. Teoría analítica de primer orden

El Hamiltoniano del problema principal del satélite artificial en coordenadas polares nodales $(r, \theta, \nu, R, \Theta, N)$ viene dado por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \left(R^2 + \frac{\Theta^2}{r^2} \right) - \frac{\mu}{r} + J_2 \frac{\mu}{r} \left(\frac{\alpha}{r} \right)^2 P_2(s \operatorname{sen} \theta), \quad (1.6)$$

donde P_2 es el polinomio de Legendre de grado 2, s es el seno de la inclinación de la órbita del satélite, μ es la constante gravitacional, α es el radio ecuatorial de la Tierra, y $J_2 > 0$ es una constante que representa el achatamiento terrestre.

La integración analítica de \mathcal{H} comienza aplicando una transformación de Lie, φ , llamada eliminación de la paralaje [45]. El Hamiltoniano transformado, \mathcal{K} , de primer orden, tiene un grado de libertad y sólo depende de los términos de corto periodo a través de las variables (r, R) . A continuación, \mathcal{K} se transforma en la ecuación de un oscilador armónico perturbado sustituyendo las variables r y dr/dt por u y v , respectivamente, y el tiempo t por una nueva variable t^* :

$$u = \frac{1}{r} - \frac{1}{p}, \quad r^2 \frac{dt^*}{dt} = \Theta, \quad v = \frac{du}{dt^*}, \quad (1.7)$$

donde $p = \Theta^2/\mu$. Finalmente, el método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky [13, 79] se aplica para integrar la ecuación de este oscilador armónico.

El método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky considera que la solución del oscilador perturbado se puede expresar a través de un desarrollo en serie de la forma

$$u = \delta \cos \psi + \sum_{i \geq 1} \frac{\epsilon^i}{i!} u_i(\delta, \psi), \quad (1.8)$$

donde u_i son funciones 2π -periódicas en la variable ψ , y la relación de δ y ψ con el tiempo t^* viene dada por los siguientes desarrollos

$$\frac{d\delta}{dt^*} = \sum_{i \geq 0} \frac{\epsilon^i}{i!} A_n(\delta), \quad \frac{d\psi}{dt^*} = \sum_{i \geq 1} \frac{\epsilon^i}{i!} B_n(\delta). \quad (1.9)$$

Utilizando la relación de ψ con t^* y de t^* con t , se obtiene la relación entre ψ y t :

$$r^2 d\psi = \Theta \frac{d\psi}{dt^*} dt. \quad (1.10)$$

A continuación, se introduce la variable auxiliar E , que tiene un significado similar al de la anomalía excéntrica en el movimiento elíptico, para integrar la ecuación (1.10). Esta anomalía generalizada se define mediante las relaciones

$$\cos \psi = \frac{\sqrt{1-e^2} \sin E}{1-e \cos E}, \quad \sin \psi = \frac{\cos E - e}{1-e \cos E}, \quad (1.11)$$

donde $e = \delta p$. Teniendo en cuenta las relaciones entre u y r dadas en la ecuación (1.7), se obtiene

$$M = E - e \sin E + J_2 \frac{\alpha^2 (3s^2 - 2)}{4a^2 (1 - e^2)^3} [2(e^2 + 2)E - 8e \sin E + e^2 \sin 2E], \quad (1.12)$$

con

$$M = \frac{\Theta}{a\eta} \frac{d\psi}{dt^*} (t - T), \quad \frac{d\psi}{dt^*} = 1 + \frac{\epsilon}{4} \left(\frac{\alpha}{a\eta^2} \right)^2 (3s^2 - 2), \quad (1.13)$$

donde $\eta = \sqrt{1 - e^2}$, $a = p/\eta$ y el tiempo T corresponde al instante en el que $\psi = 0$ (véase [133] para más detalles). Esta ecuación puede ser considerada como un caso perturbado de la ecuación clásica de Kepler, y juega el mismo papel en la determinación precisa de la posición y velocidad en los propagadores de órbitas de la familia PPKB [134].

1.4.2. La ecuación de Kepler

La expresión de la ecuación de Kepler (EK) viene dada por la ecuación trascendente

$$E - e \operatorname{sen} E = M, \quad (1.14)$$

donde M y E son las anomalías media y excéntrica, respectivamente, y e es la excentricidad de la órbita. Por otro lado, la anomalía media se relaciona con el tiempo a través de la expresión

$$M = \frac{2\pi}{P}(t - T), \quad (1.15)$$

donde P es el periodo orbital y T es la época de paso por el perigeo.

La solución de la ecuación de Kepler en el caso elíptico, $0 \leq e < 1$, se reduce a, dados un par de valores para e y M , buscar un cero de la función

$$f_k(E) = E - e \operatorname{sen} E - M = 0, \quad (1.16)$$

con $0 \leq M \leq 2\pi$. Es importante destacar que tanto la anomalía media como la excéntrica pertenecen al mismo intervalo $[0, \pi]$ o $[\pi, 2\pi]$.

Desafortunadamente, invertir la ecuación de Kepler, es decir, encontrar la anomalía excéntrica como una función de la anomalía media y de la excentricidad, no es una tarea fácil. En la práctica, los métodos numéricos [149] proporcionan una solución aproximada a este problema. Algunos de los métodos más utilizados para resolver la ecuación de Kepler son los métodos de Newton-Raphson, Halley y uno propuesto por Danby y Burkardt [37], el cual es conocido en la literatura como el método de Danby. Los procesos iterativos que definen estos tres métodos son

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad (1.17)$$

para el método de Newton-Raphson (MNR),

$$x_{n+1} = x_n - \frac{2f(x_n)f'(x_n)}{2[f'(x_n)]^2 - f(x_n)f''(x_n)}, \quad (1.18)$$

para el método de Halley (MH) y, finalmente,

$$x_{n+1} = x_n - \delta_{n3}, \quad (1.19)$$

donde

$$\delta_{n1} = \frac{f}{f'}, \quad \delta_{n2} = -\frac{f}{f' + \frac{1}{2}\delta_{n1}f''}, \quad \delta_{n3} = -\frac{f}{f' + \frac{1}{2}\delta_{n2}f'' + \frac{1}{6}\delta_{n2}^2f'''},$$

para el método de Danby (MD). El orden de convergencia de estos métodos es cuadrático, cúbico y cuártico, respectivamente.

1.4.3. La ecuación generalizada de Kepler

El primer orden de la ecuación generalizada de Kepler (EGK) [137] es

$$M = E - e \operatorname{sen} E + \frac{\varepsilon^*}{(1 - e^2)^3} [2(e^2 + 2)E - 8e \operatorname{sen} E + e^2 \operatorname{sen} 2E], \quad (1.20)$$

donde ε^* es un pequeño parámetro que depende del achatamiento terrestre, J_2 , del radio ecuatorial de la Tierra, α , de la inclinación ($s = \operatorname{sen} i$) y del semieje mayor de la órbita, a :

$$\varepsilon^* = J_2 \left(\frac{\alpha}{2a} \right)^2 (3s^2 - 2). \quad (1.21)$$

Para más detalles acerca de la obtención de la ecuación generalizada de Kepler se puede consultar [4, 134].

La figura 1.4 (a) representa el parámetro ε^* en función del semieje mayor y la inclinación. Las unidades de a y de i son respectivamente el radio medio terrestre y el radián. Como se puede observar, el valor de ε^* puede aumentar o disminuir cuando el valor del semieje mayor, a , crece, aunque ello nunca supone un cambio en el signo de ε^* . Sin embargo, el signo del ε^* sí depende de la inclinación: ε^* toma valores positivos cuando la inclinación pertenece al intervalo (r_1, r_2) , alcanzando su máximo, $J_2/4$, para $i = \pi/2$, toma valores negativos para inclinaciones pertenecientes a los intervalos $[0, r_1)$ y $(r_2, \pi]$, alcanzando su mínimo, $-J_2/2$, para $i = 0$ e $i = \pi$, y toma el valor cero para las inclinaciones $r_1 = \arcsin(\sqrt{2/3})$ y $r_2 = \pi - \arcsin(\sqrt{2/3})$, es decir, para las raíces de la ecuación $\varepsilon^* = 0$. Esto es, para los valores r_1 y r_2 , se recupera la ecuación de Kepler. En la figura 1.4 (b) se muestra la gráfica del parámetro ε^* para $a = \alpha$. Los valores positivos de ε^* están representados en rojo y los negativos en azul.

Finalmente, como en el caso de la ecuación de Kepler, la solución de la generalizada para el caso elíptico consiste en, dados un par de valores para e y M , buscar un cero de la función

$$f_{gk}(E) = E - e \operatorname{sen} E - M + \frac{\varepsilon^*}{(1 - e^2)^3} [2(e^2 + 2)E - 8e \operatorname{sen} E + e^2 \operatorname{sen} 2E] = 0. \quad (1.22)$$

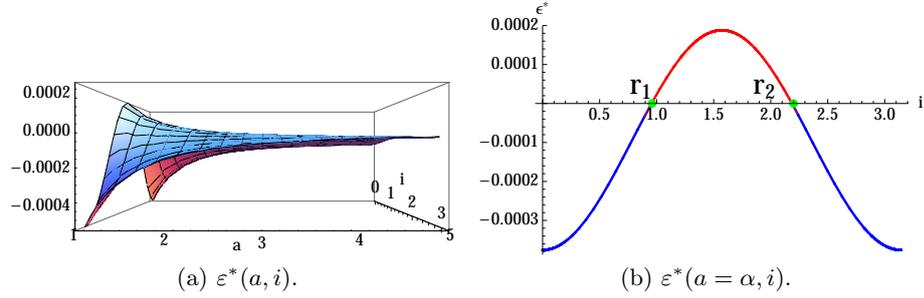


Figura 1.4: Representación gráfica de ε^* ($-J_2/2 \leq \varepsilon^* \leq J_2/4$).

1.4.4. Resultados numéricos

En este apartado se estudia el comportamiento de los métodos de Newton-Raphson, Halley y Danby aplicados a la resolución de la ecuación generalizada de Kepler. En la tabla 1.1 se muestran los valores tomados para inicializar estos procesos iterativos. S_1 es una simple función de M que ha sido frecuentemente utilizada en la resolución de la ecuación Kepler, S_2 ofrece dos modos de determinación del valor inicial para distintas regiones de M (véase la referencia [37] para más detalles), mientras que S_3 es la solución de la propia ecuación de Kepler.

Tabla 1.1: Valores seleccionados para inicializar los métodos de Newton-Raphson, Halley y Danby.

Valores iniciales	
(S_1)	$E_0 = M$
(S_2)	$E_0 = M + e^2(\sqrt[3]{6M} - M)$ si $M < 0.1$ $E_0 = M + 0.85e$ si $M \geq 0.1$
(S_3)	$E_0 = \text{solución de la EK}$

A continuación, los métodos de Newton-Raphson, Halley y Danby son empleados para resolver la EGK en una malla de puntos equidistantes en el plano $M-e$ ($0 \leq M \leq \pi$, $0 \leq e < 1$). Los puntos se encuentran a una distancia entre sí de $\Delta M = 1/1000$ rad y de $\Delta e = 1/1000$; el número de puntos considerado en la malla es de 3 142 000. El número máximo permitido de iteraciones es 20, y se considera que el proceso converge si el error es inferior a 10^{-14} . Los valores de α y J_2 corresponden a los de la Tierra, el semieje mayor de la órbita es igual a 7 200 km, el cual corresponde a una órbita de tipo LEO (Low Earth Orbit), mientras que para la inclinación se consideran cinco valores que pertenecen al intervalo $[0, \pi/2]$, como puede verse en

la figura 1.5. Los dos primeros valores, $i_1 = 0^\circ$ e $i_2 = 53^\circ$, corresponden a cantidades negativas del parámetro ε^* , el tercer valor es r_1 , para el que la ecuación generalizada se reduce a la clásica de Kepler, y los dos últimos valores son $i_4 = 55^\circ$ e $i_5 = 90^\circ$, los cuales corresponden a cantidades positivas de ε^* . Conviene recordar que los valores máximo y mínimo de ε^* se alcanzan en i_5 e i_1 , respectivamente. Finalmente, se necesita un criterio adicional de convergencia para determinar la relación entre las anomalías E y M : el proceso iterativo converge, al igual que en la ecuación clásica de Kepler, si la raíz de la ecuación (1.22) pertenece al intervalo $[0, \pi]$. El resultado de este estudio se muestra representando sobre el plano $M-e$ las regiones en las que el número de iteraciones del método numérico es el mismo, y analizando qué cantidad de iteraciones es predominante en cada caso.

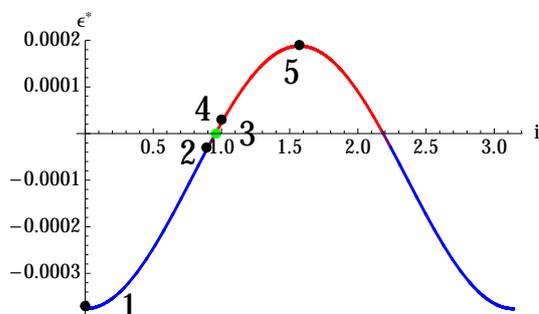


Figura 1.5: Parámetro $\varepsilon^*(a = 7200, i)$.

La figura 1.6 muestra los resultados cuando se utiliza el valor de S_1 para inicializar el método de Newton-Raphson. En la figura 1.6 (c) se pueden observar los resultados para $i_3 = r_1$, este valor de la inclinación hace que el parámetro ε^* se anule, y por lo tanto la ecuación generalizada se reduce a la clásica. En el 94.05 % de los casos el método utiliza entre 2 y 6 iteraciones para converger. Como se puede observar, el número de iteraciones se incrementa cerca de $M \approx 0$ y $e \approx 1$; esta región representa el 0.08 % de los casos. Para un análisis más detallado de esta combinación, véase [37]. Las figuras 1.6 (a) y (b) ilustran el caso $\varepsilon^* < 0$. Los valores de inclinación considerados son $i_1 = 0^\circ$ e $i_2 = 53^\circ$. El porcentaje de los casos en los que MNR converge a la solución utilizando entre 2 y 6 iteraciones es del 86.72 % y 91.72 % para i_1 e i_2 , respectivamente. Es importante destacar que aparecen dos regiones donde el método diverge (regiones de color rojo en las figuras); estas regiones alcanzan su tamaño máximo, que representa el 10.48 % de los casos, para $i_1 = 0^\circ$, aunque van disminuyendo a medida que crece la inclinación, desapareciendo al alcanzar el valor $i_3 = r_1$. Para $i_2 = 53^\circ$, la región en la que el método diverge representa el 3.58 % de los casos. Las figuras 1.6 (d) y (e) muestran los casos en los que el parámetro ε^* es positivo. Los valores de inclinación analizados son $i_4 = 55^\circ$ e $i_5 = 90^\circ$, respectivamente. El porcentaje de los casos en los que MNR converge a la solución utilizando entre 2

y 6 iteraciones es del 93.80 % y 92.49 % para i_4 e i_5 , respectivamente. Para el valor $i_4 = 55^\circ$, MNR no converge en el 0.1 % de los casos, también comprendidos en la región cercana a $M \approx 0$ y $e \approx 1$, mientras que para $i_5 = 90^\circ$ los casos en los que el método diverge representan el 0.09 %. Para valores elevados de excentricidad, $e > 0.9$, es posible detectar pequeños cambios en la forma de las regiones en el plano M - e respecto al caso de la ecuación de Kepler. Finalmente, la figura 1.6 (f) muestra los porcentajes de casos en los que el método de Newton-Raphson converge, en función del número de iteraciones; los colores rojo, verde, azul, negro y magenta representan las inclinaciones 0° , 53° , r_1 , 55° y 90° , respectivamente. Como se puede observar, el comportamiento cualitativo para las cinco inclinaciones consideradas es aproximadamente el mismo; el máximo porcentaje se encuentra alrededor del 37 %, que corresponde a la cuarta iteración.

El uso de S_1 como valor inicial en el método de Newton-Raphson presenta algunos problemas de convergencia para las inclinaciones $i_1 = 0^\circ$ e $i_2 = 53^\circ$. Sin embargo, cuando estos problemas son eliminados, las regiones en las que MNR diverge (en color rojo) no desaparecen. Los casos que permanecen en esa región corresponden a raíces de la ecuación generalizada que no verifican la restricción impuesta de pertenecer al intervalo $[0, \pi]$, como puede verse en la figura 1.7. En esta figura se resuelve la EGK para $i_1 = 0^\circ$, $M = \pi$ y varios valores de excentricidad, 0.91, 0.92 y 0.925. El valor de la anomalía excéntrica para $e = 0.925$ es 5.19 radianes, y por lo tanto no verifica la restricción impuesta en este estudio por la que el método iterativo converge si la raíz de la ecuación (1.22) pertenece al intervalo $[0, \pi]$.

En la figura 1.8 se muestra el comportamiento del método de Halley cuando se utiliza el valor de S_1 para inicializar el proceso iterativo. La figura 1.8 (c) muestra el plano M - e para $i_3 = r_1$. MH es convergente en todo el plano para este valor de la inclinación; en el 97.99 % de los casos el método de Halley utiliza entre 4 y 5 iteraciones para converger a la solución de la ecuación de Kepler. Las figuras 1.8 (a) y (b) representan el caso $\varepsilon^* < 0$, para el que el método converge a la solución utilizando mayoritariamente entre 4 y 5 iteraciones. Para las inclinaciones $i_1 = 0^\circ$ e $i_2 = 53^\circ$ el método converge en un 86.09 % y 93.40 % de los puntos del plano, respectivamente. Las regiones en las que el método diverge son ligeramente menores que para el método de Newton-Raphson, alrededor del 10.42 % de los puntos del plano para la inclinación $i_1 = 0^\circ$, y el 3.52 % para $i_2 = 53^\circ$. Las figuras 1.8 (d) y (e) ilustran el caso $\varepsilon^* > 0$. El método converge a la solución utilizando entre 4 y 5 iteraciones en el 97.16 % de los puntos del plano para $i_4 = 55^\circ$, y en el 94.30 % de los casos para $i_5 = 90^\circ$. Para valores elevados de excentricidad, $e > 0.9$, se observa un cambio en la forma de las regiones en el plano M - e respecto al caso de la ecuación de Kepler, como en MNR. Finalmente, la figura 1.8 (f) muestra los porcentajes de casos en los que el método de Halley converge, en función del número de iteraciones; los colores

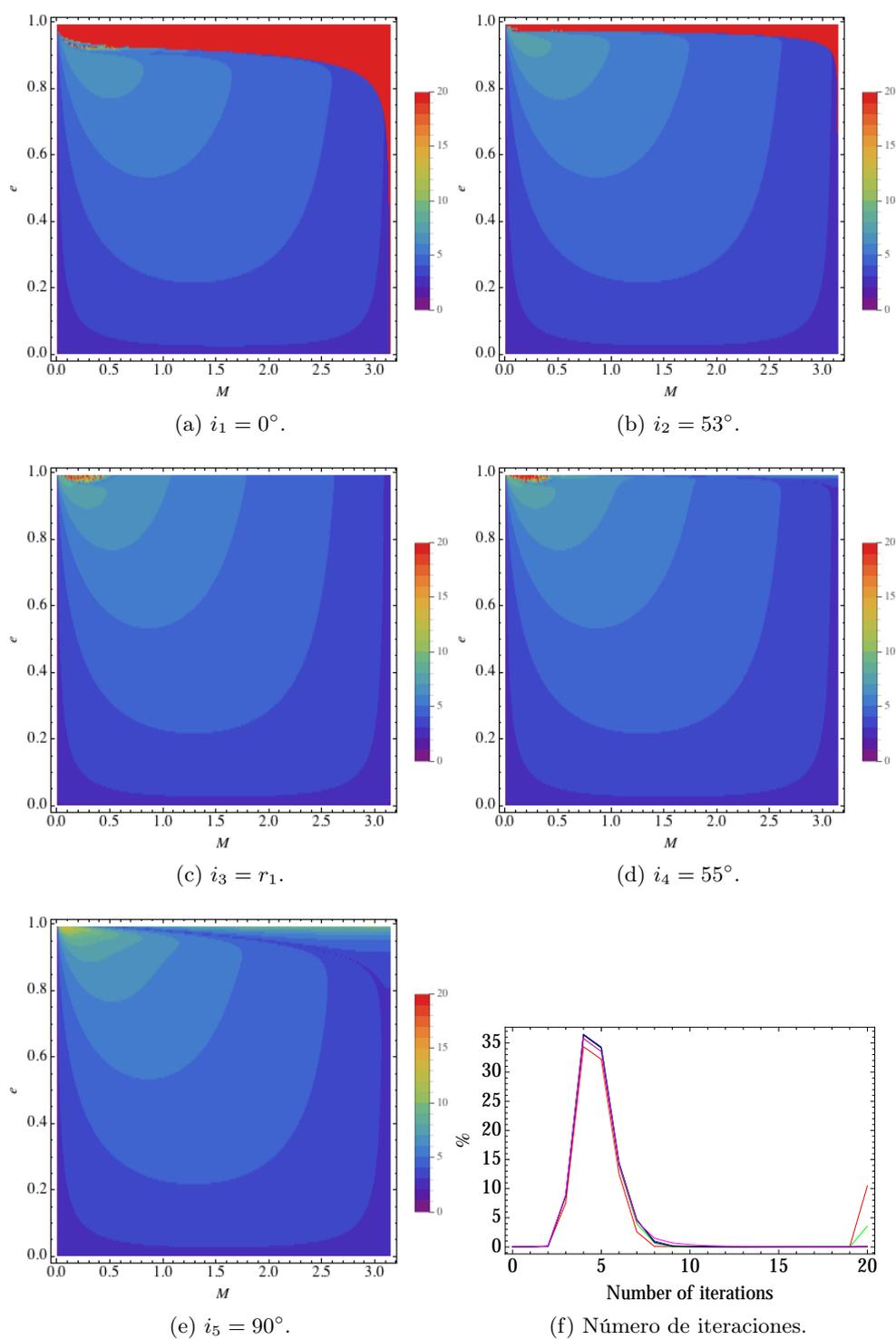


Figura 1.6: El método de Newton-Raphson utilizando S_1 como valor inicial del proceso iterativo.

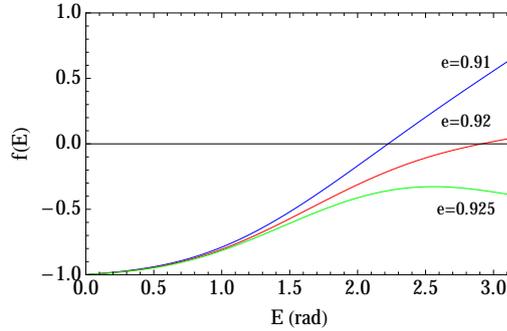


Figura 1.7: Gráficas de $f_{gk}(E)$ para $i_1 = 0^\circ$, $M = \pi$ y tres valores de excentricidad: 0.91, 0.92 y 0.925.

rojo, verde, azul, negro y magenta representan las inclinaciones 0° , 53° , r_1 , 55° y 90° , respectivamente. Como se puede observar, el comportamiento cualitativo para las cinco inclinaciones consideradas es aproximadamente el mismo; entre el 16 % y el 19 % de los puntos del plano utilizan 4 iteraciones para que el proceso iterativo converja, y entre el 68.95 % y el 79.81 % emplean 5 iteraciones.

La figura 1.9 ilustra la combinación del método de Danby y S_1 . La figura 1.9 (c) representa el plano $M-e$ para $i_3 = r_1$. MD es convergente en todo el plano para este valor de la inclinación; en el 95.91 % de los casos el método converge utilizando entre 3 y 4 iteraciones. Para un análisis más detallado de este caso, véanse las referencias [37, 38]. El caso $\varepsilon^* < 0$ se muestra en las figuras 1.9 (a) y (b). Para la mayoría de los puntos del plano el método converge a la solución utilizando entre 4 y 5 iteraciones, lo cual sucede en un 87.44 % de los casos para $i_1 = 0^\circ$ y en un 93.04 % para $i_2 = 53^\circ$. El tamaño de las regiones en las que el método diverge es el mismo que para el método de Halley. Las figuras 1.9 (d) y (e) representan el caso $\varepsilon^* > 0$. En el 95.63 % de los puntos del plano, para el valor $i_4 = 55^\circ$, y en el 94.22 %, para $i_5 = 90^\circ$, el método utiliza entre 3 y 4 iteraciones para converger a la solución. El cambio en las formas de las regiones en el plano $M-e$ con respecto al caso de la ecuación de Kepler también se produce para valores altos de excentricidad ($e > 0.9$). Finalmente, la figura 1.9 (f) muestra los porcentajes de casos en los que el método de Danby converge, en función del número de iteraciones; los colores rojo, verde, azul, negro y magenta representan las inclinaciones 0° , 53° , r_1 , 55° y 90° , respectivamente. Como se puede observar, el comportamiento cualitativo para las cinco inclinaciones consideradas es aproximadamente el mismo; entre el 76.01 % y el 82.12 % de los puntos del plano utilizan 3 iteraciones, y entre el 11.43 % y el 14.28 % utilizan 4 iteraciones.

Los resultados de las combinaciones de los tres métodos numéricos y la condición inicial S_2 se muestran en las figuras 1.10, 1.11 y 1.12. Los planos

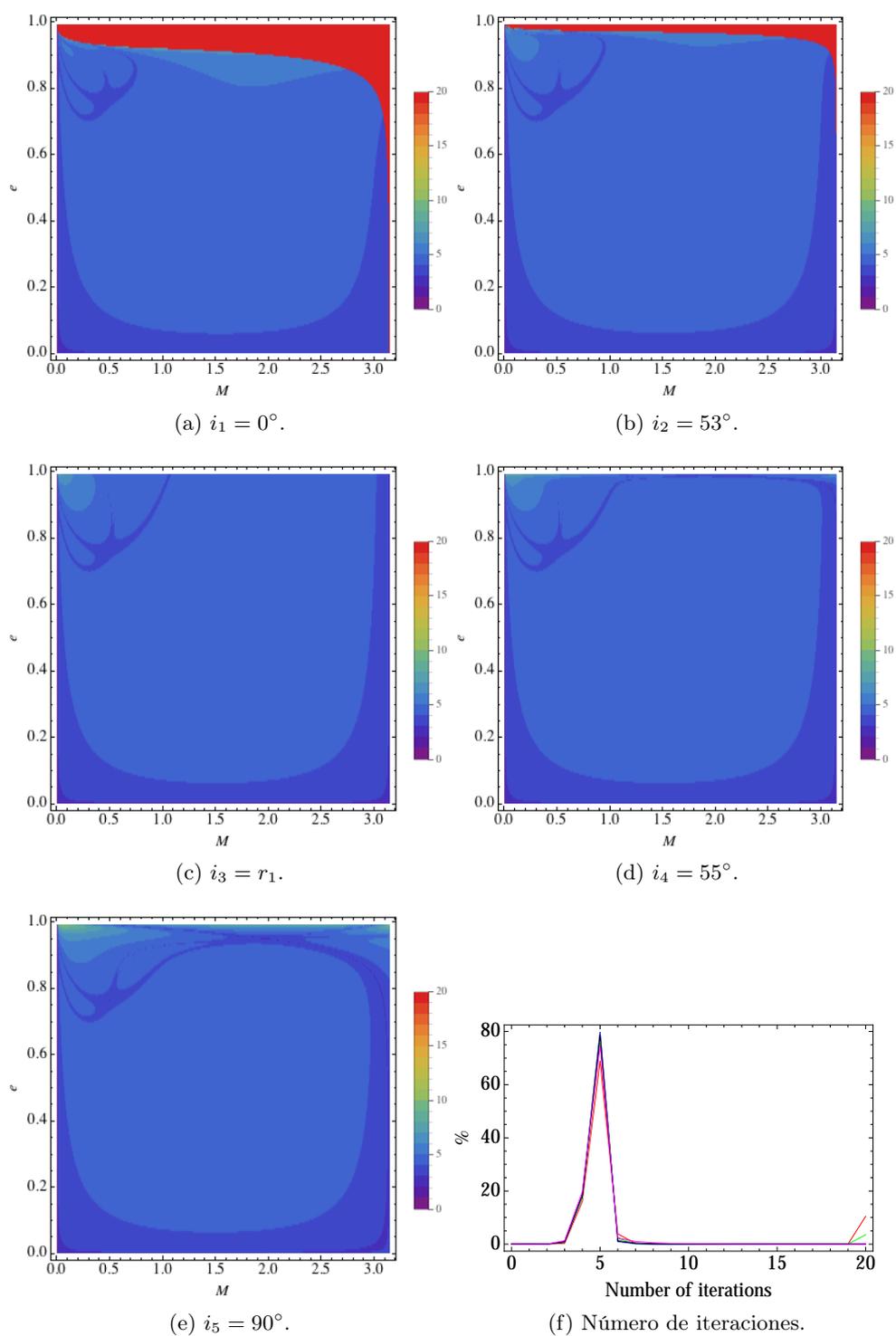


Figura 1.8: El método de Halley utilizando S_1 como valor inicial del proceso iterativo.

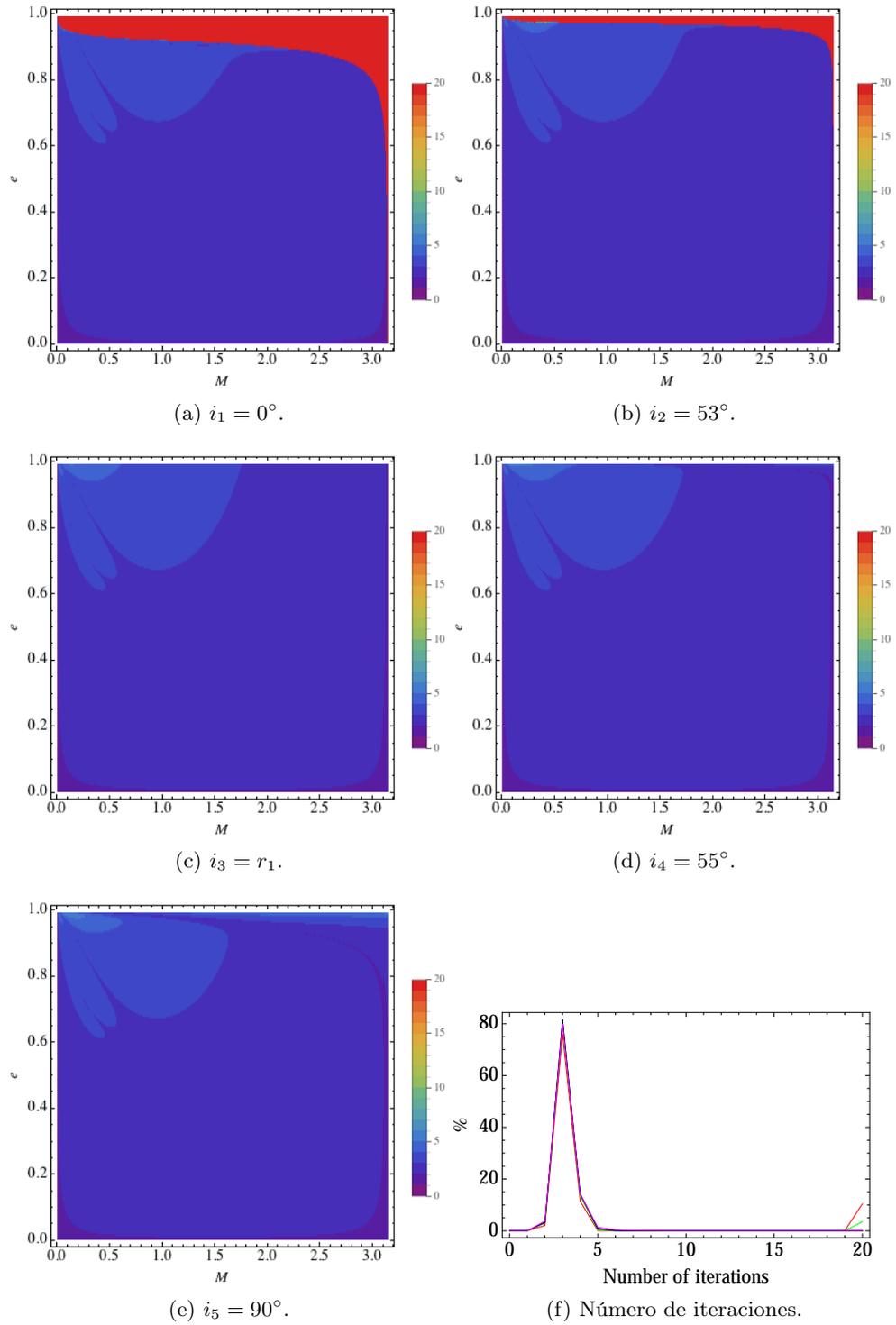


Figura 1.9: El método de Danby utilizando S_1 como valor inicial del proceso iterativo.

$M-e$ para el caso de la ecuación de Kepler, $i_3 = r_1$, se pueden ver en las figuras 1.10, 1.11 y 1.12 (c). Los tres métodos siempre convergen: el método de Newton-Raphson emplea entre 3 y 5 iteraciones para el 99.67% de los puntos del plano, el método de Halley entre 4 y 5 iteraciones en el 85.16% de los puntos del plano y el método de Danby entre 2 y 3 iteraciones en el 93.36% de los puntos del plano. Los casos en los que $\varepsilon^* < 0$ se presentan en las figuras 1.10, 1.11 y 1.12 (a) y (b). El tamaño de las regiones en las cuales los métodos divergen para la condición S_2 es aproximadamente el mismo que el obtenido para S_1 . El método de Newton-Raphson necesita entre 3 y 5 iteraciones para converger en el 89.25% de los casos para $i_1 = 0^\circ$, y en el 96.13% para $i_2 = 53^\circ$. El método de Halley utiliza entre 4 y 5 iteraciones para converger en el 80.77% de los casos para $i_1 = 0^\circ$, y en el 83.42% para $i_2 = 53^\circ$. El método de Danby emplea entre 2 y 3 iteraciones para converger en el 89.25% de los casos para $i_1 = 0^\circ$, y en el 96.35% para $i_2 = 53^\circ$. Para finalizar, en las figuras 1.10, 1.11 y 1.12 (d) y (e) se analiza el caso $\varepsilon^* > 0$. El cambio en las formas de las regiones en el plano $M-e$ con respecto al caso de la ecuación de Kepler también tiene lugar para valores elevados de excentricidad ($e > 0.9$). El método de Newton-Raphson necesita entre 3 y 5 iteraciones para converger en el 98.53% y en el 94.62% de los casos para $i_4 = 55^\circ$ e $i_5 = 90^\circ$, respectivamente. El método de Halley utiliza entre 4 y 5 iteraciones para converger en el 85.15% y en el 84.53% de los casos para $i_4 = 55^\circ$ e $i_5 = 90^\circ$, respectivamente. El método de Danby emplea entre 2 y 3 iteraciones para converger en el 99.86% y en el 98.63% de los casos para $i_4 = 55^\circ$ e $i_5 = 90^\circ$, respectivamente. Las figuras 1.10, 1.11 y 1.12 (f) muestran los porcentajes de casos en los que los tres métodos convergen, en función del número de iteraciones; los colores rojo, verde, azul, negro y magenta representan las inclinaciones 0° , 53° , r_1 , 55° y 90° , respectivamente. El comportamiento es aproximadamente similar para todas las inclinaciones: entre el 63.38% y el 67.73% de los casos converge en la cuarta iteración para MNR; MH converge entre el 53.00% y el 56.45% de las ocasiones en la cuarta iteración, y entre el 27.77% y el 28.99% en la quinta iteración; para MD entre el 82.84% y el 93.36% de los casos convergen en la tercera iteración. Para finalizar, hay que destacar que los tres métodos presentan serios problemas de convergencia para excentricidades superiores a 0.99.

Para concluir este estudio, la propia solución de la ecuación clásica de Kepler, S_3 , es utilizada para inicializar los tres procesos iterativos. Este valor constituye una condición intuitiva, ya que la ecuación generalizada de Kepler puede ser considerada como una versión perturbada de la ecuación clásica. Los resultados se muestran en las figuras 1.13, 1.14 y 1.15, en las que no se ha considerado el caso $i_3 = r_1$ por corresponder a la ecuación clásica de Kepler, cuya solución está siendo precisamente utilizada en la inicialización de los procesos iterativos. Las regiones en las que los métodos divergen para el caso $\varepsilon^* < 0$ representan unos porcentajes globales similares a los obtenidos con S_1

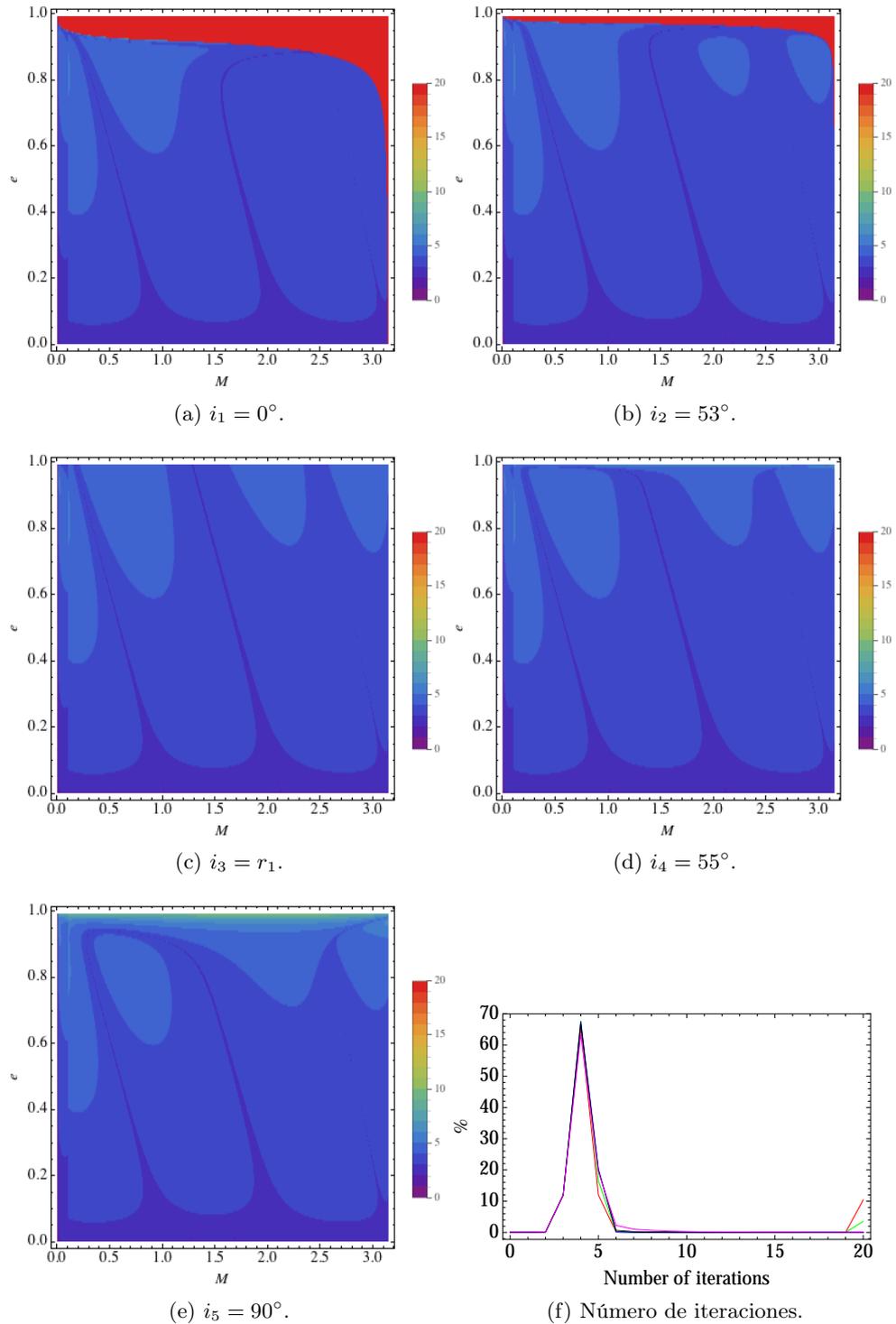


Figura 1.10: El método de Newton-Raphson utilizando S_2 como valor inicial del proceso iterativo.

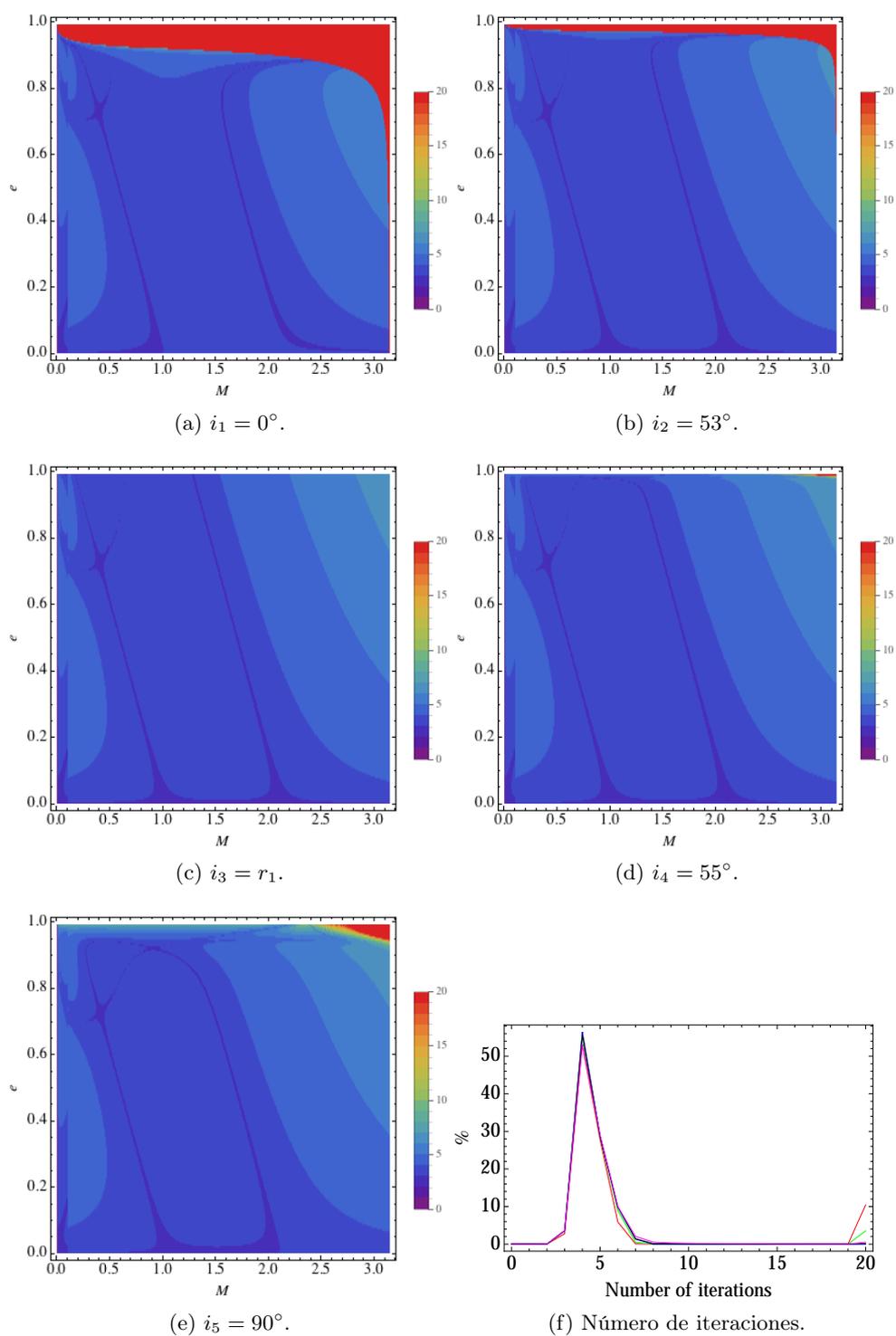


Figura 1.11: El método de Halley utilizando S_2 como valor inicial del proceso iterativo.

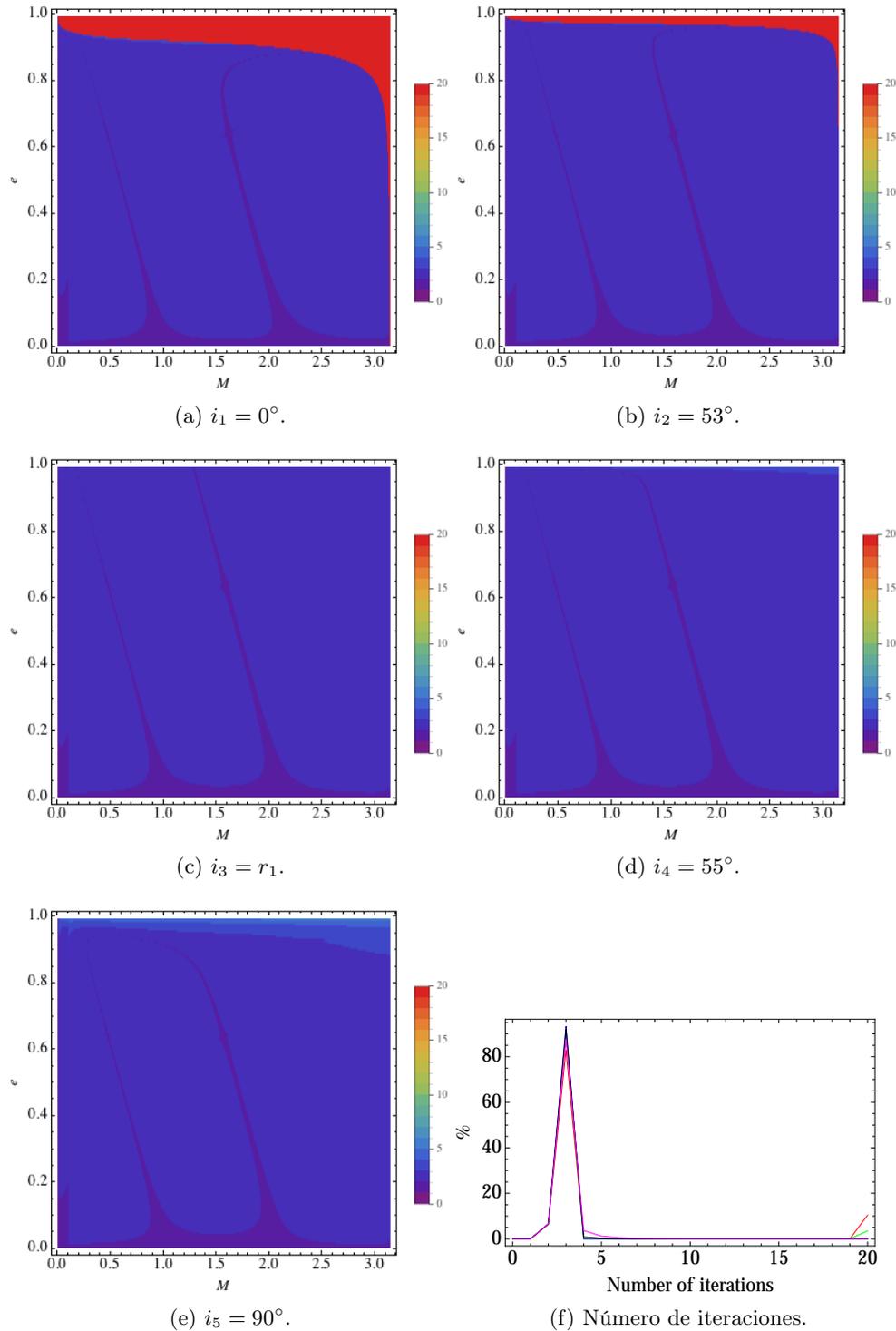


Figura 1.12: El método de Danby utilizando S_2 como valor inicial del proceso iterativo.

y S_2 : un 10.42 % para $i_1 = 0^\circ$ y un 3.52 % para $i_2 = 53^\circ$. MNR utiliza para converger entre 2 y 4 iteraciones en el 88.05 %, 95.98 %, 97.88 % y 90.67 % de los casos para $i_1 = 0^\circ$, $i_2 = 53^\circ$, $i_4 = 55^\circ$ e $i_5 = 90^\circ$, respectivamente. MH necesita entre 3 y 4 iteraciones para converger en un 84.64 %, 94.62 %, 95.86 % y 90.27 % de los casos para $i_1 = 0^\circ$, $i_2 = 53^\circ$, $i_4 = 55^\circ$ e $i_5 = 90^\circ$, respectivamente. MD requiere para converger entre 2 y 3 iteraciones en un 89.25 %, 96.34 %, 98.92 % y 95.33 % de los casos para $i_1 = 0^\circ$, $i_2 = 53^\circ$, $i_4 = 55^\circ$ e $i_5 = 90^\circ$, respectivamente.

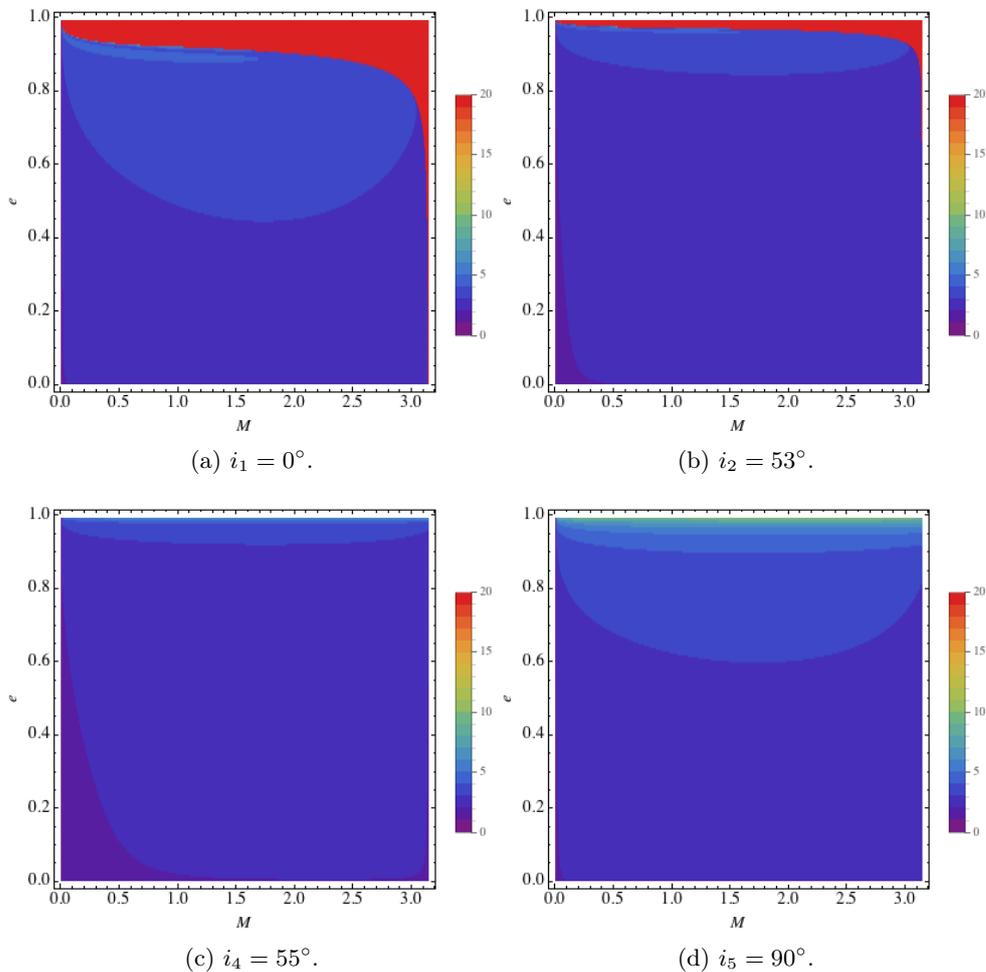


Figura 1.13: El método de Newton-Raphson utilizando S_3 como valor inicial del proceso iterativo.

En la tabla 1.2 se compara el número de iteraciones (%) requerido por los tres métodos numéricos para converger, utilizando como valores iniciales S_2 y S_3 , para los casos en los que la inclinación toma los valores 0° , 53° , 55° y 90° . Como se puede observar, empleando S_3 los tres métodos convergen

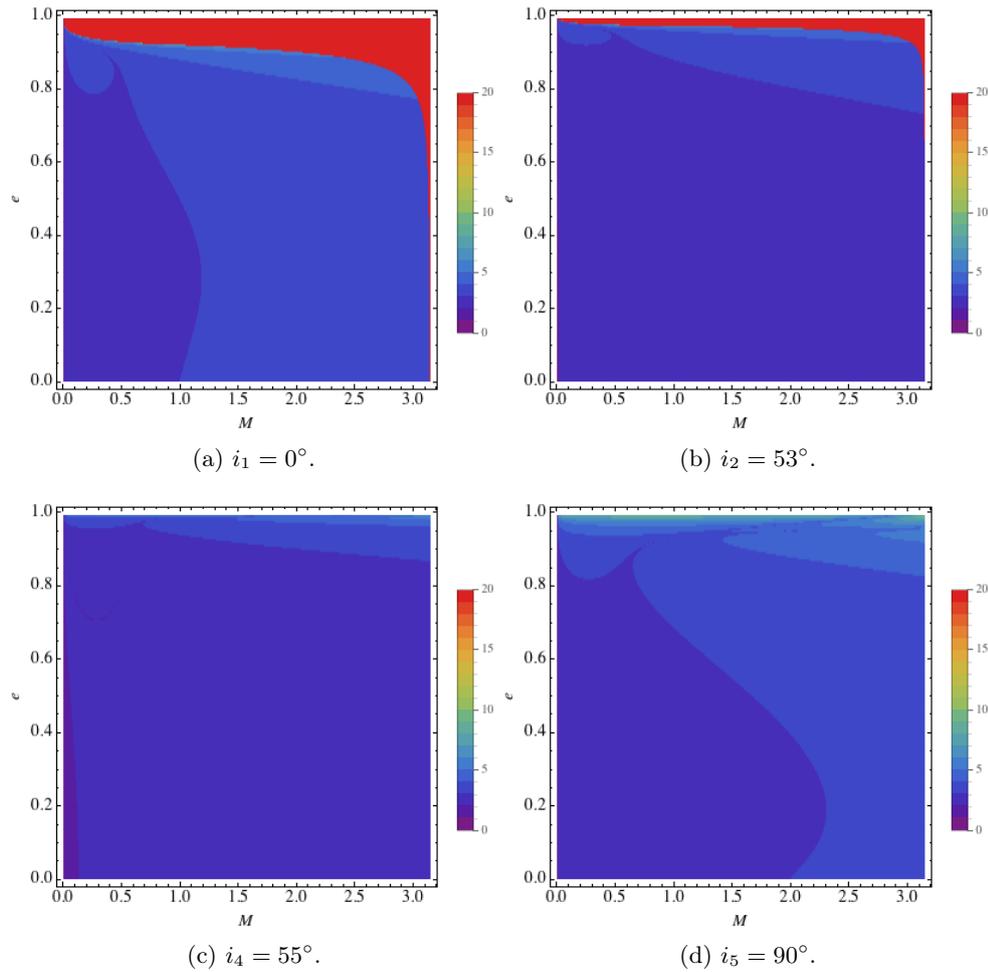


Figura 1.14: El método de Halley utilizando S_3 como valor inicial del proceso iterativo.

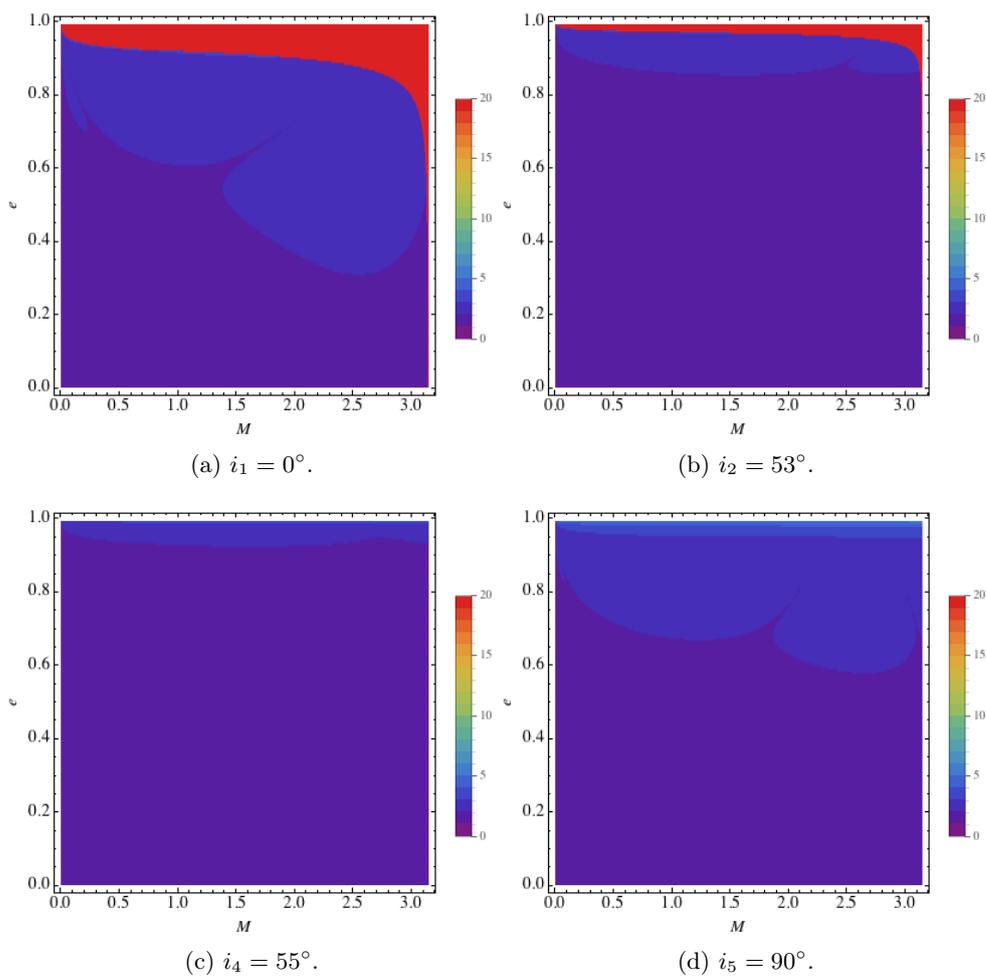


Figura 1.15: El método de Danby utilizando S_3 como valor inicial del proceso iterativo.

en una iteración menos. En general, MD es el método que menos iteraciones requiere, seguido por MNR, que necesita una iteración más, y por MH, que resulta algo más lento que MNR en número de iteraciones.

Tabla 1.2: Número de iteraciones (%) empleado por los métodos MNR, MH y MD, utilizando como valores iniciales S_2 y S_3 , para las inclinaciones 0° , 53° , 55° y 90° .

i	V. inic.	MNR		MH			MD	
		3	4	3	4	5	2	3
0°	S_2	11.85	65.44	2.77	53.00	27.77	6.31	82.94
	S_3	52.92	34.81	25.18	59.46	4.30	50.27	38.98
53°	S_2	11.90	67.73	3.56	54.96	28.46	6.57	89.78
	S_3	84.45	9.63	83.62	11.00	1.35	86.87	9.47
55°	S_2	11.89	67.51	3.51	56.45	28.70	6.50	93.36
	S_3	85.81	4.90	89.93	5.93	1.33	93.38	5.54
90°	S_2	11.88	66.74	3.61	55.77	28.76	6.58	92.05
	S_3	64.99	25.24	45.58	44.69	6.03	66.85	28.48

En la figura 1.16 se muestra el tiempo requerido por los tres métodos iterativos para converger a la solución con un error de 10^{-14} , para valores de inclinación 0° , 53° , 55° y 90° , haciendo uso tanto de S_2 como de S_3 para su inicialización. La CPU utilizada ha sido un Intel Core i7 a 1.7 GHz. Como puede observarse, la utilización del valor S_2 para la inicialización de los procesos iterativos reduce el tiempo de cómputo alrededor de un 20% respecto del uso de S_3 en todos los casos, aun a pesar de requerir en general una iteración más.

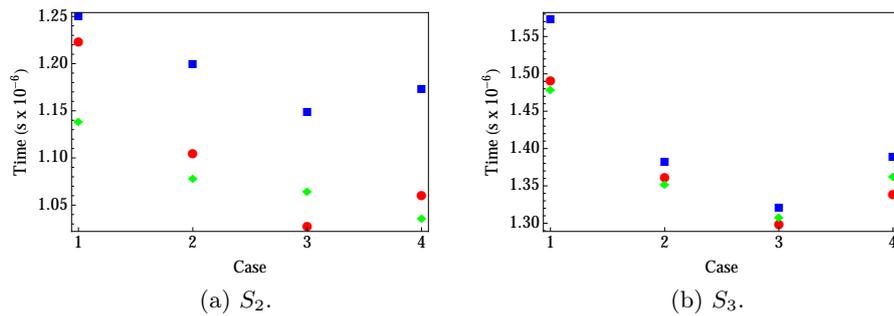
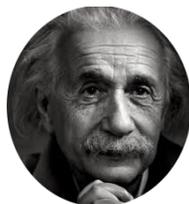


Figura 1.16: Tiempo empleado en la convergencia del método con un error de 10^{-14} (MNR en verde, MH en azul y MD en rojo). Los casos 1, 2, 3 y 4 corresponden a las inclinaciones 0° , 53° , 55° y 90° , respectivamente.

*Hay una fuerza motriz más poderosa que
el vapor, la electricidad y la energía
atómica: la voluntad*



ALBERT EINSTEIN

Capítulo 2

El proyecto *Astrody^{Web}Tools*

Resumen

En este capítulo se presenta el proyecto de investigación Astrodynamics Web Tools, *Astrody^{Web}Tools*, una infraestructura web diseñada para apoyar el uso y la difusión a través de Internet de herramientas de computación científica no comerciales en los campos de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica. A continuación se describe brevemente el proyecto, su diseño y las herramientas disponibles en este momento.

2.1. Introducción

Internet ha abierto nuevas posibilidades y ha incrementado el número de vías de colaboración en prácticamente todos los campos de la Ciencia y de la Tecnología [64, 141], permitiendo la ejecución de aplicaciones sofisticadas como servicios web [35, 80], así como la participación en proyectos de código abierto en los que se desarrolla software altamente especializado para la resolución de determinados tipos de problemas, con el soporte de extensas comunidades de desarrolladores y usuarios. Este tipo de iniciativas está siendo especialmente bien valorado por parte de la comunidad científica, debido a las evidentes ventajas que aporta para el avance del conocimiento.

Es habitual que los distintos grupos de investigación desarrollen software para la resolución de problemas muy concretos en los que centran su actividad. Las condiciones en las que se lleva a cabo esta labor no son las más apropiadas para lograr el mejor rendimiento a partir del esfuerzo invertido.

En primer lugar, el software desarrollado se encuentra diseminado entre los distintos grupos investigadores, de modo que existen equipos que trabajan en temáticas comunes y desconocen la existencia de aplicaciones ya desarrolladas por otros colegas, herramientas que les permitirían contrastar resultados o avanzar más rápidamente en ciertos detalles de sus estudios. La

consecuencia es la innecesaria multiplicidad de esfuerzos para el desarrollo de herramientas ya existentes, o bien la falta de avance por carencia de las mismas, siendo ambas alternativas igualmente negativas.

La multiplicidad de esfuerzos mencionada no sólo se refiere a los recursos humanos, sino también a los materiales. Es frecuente que los cálculos habituales en determinados ámbitos científicos requieran ser llevados a cabo en un entorno HPC (*High Performance Computing*), obligando a los equipos investigadores a invertir una buena parte de sus recursos económicos en costosos servidores de cálculo. Un uso compartido de los mismos no sólo permitiría optimizar las dotaciones económicas de los proyectos de investigación, sino que también liberaría a los usuarios de sus tareas de gestión y mantenimiento.

Por otra parte, las herramientas informáticas desarrolladas por los diversos grupos científicos presentan ciertas características que dificultarían su uso compartido. Por ejemplo, muchas de ellas fueron implementadas en lenguajes hoy obsoletos, de los que no existe ya soporte. Dado que la prioridad suele ser la efectividad del software en la resolución del problema para el que se diseña, frente a los aspectos formales, estas herramientas suelen estar desarrolladas en un entorno de comandos, con rudimentarios procedimientos de entrada y salida de datos, sin capacidades gráficas para el análisis de los resultados, y sin una documentación de los algoritmos y modos de utilización. En estas condiciones no resulta sencillo hacer uso de herramientas distintas de las desarrolladas en el seno de cada equipo.

Los campos de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica son ejemplos de ramas de la Ciencia en las que sucede cuanto se ha expuesto. Los cálculos que se llevan a cabo en estas disciplinas, cuando se desean resultados muy precisos, son extremadamente complejos y computacionalmente intensivos, y no siempre están al alcance de quien los necesita.

En este contexto surge *Astrody^{Web}_{Tools}* [130, 132], un proyecto web enfocado a facilitar el acceso de investigadores y estudiantes a herramientas especializadas, a través de Internet, bien sea con fines investigadores o educativos. La infraestructura web ha sido desplegada con los medios informáticos de la Universidad de La Rioja. Si bien inicialmente se ha orientado hacia las áreas de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica, cabe señalar que el modelo de dicha infraestructura está siendo aplicado a otros campos de la Ciencia [99], concretamente a la Bioinformática.

Este entorno permite alojar en un servicio web aplicaciones científicas desarrolladas por distintos grupos de investigación, con mínimos cambios sobre el código original, facilitando así el acceso por parte de investigadores y estudiantes localizados en cualquier lugar del mundo, con el simple uso de un navegador web, y sin importar la potencia de cálculo de su computador ni su sistema operativo que éste use. La infraestructura oculta toda la complejidad algorítmica de las aplicaciones al usuario, quien simplemente las percibe en

términos de entradas y salidas.

La única condición que se requiere para que una aplicación pueda ser alojada en *Astrody^{Web}_{Tools}* es que sea ejecutada desde una entrada de comandos UNIX, independientemente del lenguaje en el que haya sido programada. Esta flexibilidad permite que puedan coexistir nuevas aplicaciones basadas en sofisticados diseños orientados a objetos junto con herramientas programadas en lenguajes que han quedado ya obsoletos.

El portal *Astrody^{Web}_{Tools}* permite que los usuarios registrados seleccionen cualquiera de las aplicaciones alojadas para ejecutarla a través de una interfaz web, en la que se introducen los datos necesarios, que posteriormente son convertidos al formato específico requerido por la aplicación. A continuación, el servidor de aplicaciones ejecuta los cálculos y guarda los resultados en ficheros. Posteriormente, estos resultados pueden ser procesados por otros módulos capaces de generar gráficos e informes, los cuales se integran finalmente en la página web, mostrándose al usuario. Adicionalmente, *Astrody^{Web}_{Tools}* también almacena todas estas salidas, haciendo posible su descarga a través de un fichero comprimido.

2.2. *Astrody^{Web}_{Tools}*: proyecto colaborativo

El proyecto *Astrody^{Web}_{Tools}* surge del interés por desarrollar una plataforma Open-Science [6] que proporcione acceso abierto a la investigación y al conocimiento para promover así el trabajo colaborativo en las comunidades científicas de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica. El doctorando y su director constituyen el equipo de soporte que articula la colaboración entre los autores de las aplicaciones y los usuarios registrados. Los servicios de soporte prestados incluyen todas las operaciones necesarias para alojar las aplicaciones en el entorno, así como los procesos de reingeniería cuando son necesarios. Cabe señalar que el proyecto *Astrody^{Web}_{Tools}* no modifica los derechos de propiedad intelectual de las distintas aplicaciones, que permanecen en manos de sus propietarios originales, tan solo se cede su uso.

La figura 2.1 muestra los distintos roles y modos de colaboración del proyecto. La integración de una nueva aplicación es bastante directa, y sólo se requiere de un ejecutable de la aplicación si ésta proviene de un lenguaje compilado (C, C++, Fortran,...), o de un script o paquete de scripts procedentes de un lenguaje interpretado (Perl, Python,...). Todos ellos deben poder ser ejecutados desde una shell UNIX. Inicialmente, en el proceso de integración de una aplicación en el sistema se deben definir con precisión las entradas y salidas. A partir de ellas, el equipo de soporte, en coordinación con el desarrollador de la aplicación, lleva a cabo cualquier operación de reingeniería que pudiera ser necesaria, y diseña e implementa los componentes web que permitan la introducción de los datos y la obtención de los resultados, gráficos e informes. Finalmente se comprueba y valida todo el proceso

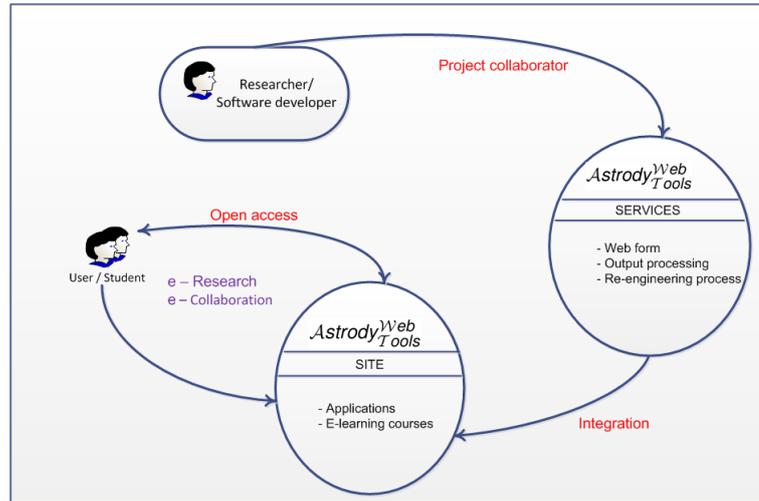


Figura 2.1: Roles y modos de colaboración en el proyecto *Astrody^{Web}_{Tools}*.

de integración. A partir de ese momento, la aplicación queda a disposición de investigadores y estudiantes.

El servicio de reingeniería ofrece también la adaptación de las aplicaciones obsoletas a los entornos de computación actuales cuando resulta posible. En los casos en los que se estime conveniente, también se podrán llevar a cabo otras modificaciones más profundas, como la paralelización del código para su ejecución sobre arquitecturas GPU y multiprocesador [135].

Otro de los objetivos del proyecto es la creación de comunidades de usuarios de las aplicaciones alojadas en *Astrody^{Web}_{Tools}*, de forma que puedan establecerse colaboraciones basadas en la interacción con los investigadores responsables de las mismas. De este modo, los desarrolladores de las aplicaciones pueden aconsejar a los usuarios e intercambiar con ellos datos e información, e incluso ofrecer la posibilidad de adaptar el código de sus programas si se desea dar respuesta a problemas concretos no contemplados previamente en la aplicación.

2.3. Arquitectura básica del sistema

La figura 2.2 muestra un esquema de la arquitectura básica de uso del sistema, que incluye los componentes principales y su modo de interactuar. El entorno se compone de un servidor web, un servidor de aplicaciones y diversas herramientas software de código libre. Los usuarios registrados pueden utilizar tanto las aplicaciones disponibles como las herramientas software de código libre, como por ejemplo Gnuplot, Octave, R, \LaTeX , etcétera. Se trata de un diseño genérico, por lo que puede ser aplicado a otros campos científicos.

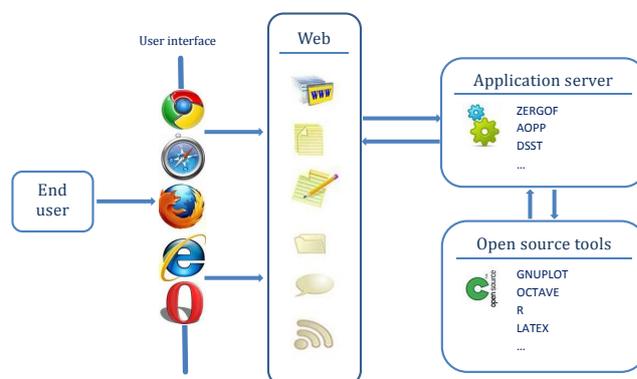


Figura 2.2: Esquema de la arquitectura de $Astrody_{Tools}^{Web}$.

El servidor web ha sido desarrollado utilizando Drupal [52, 114], un CMS (*Content Management System*) que proporciona recursos avanzados para la gestión de la seguridad, la conectividad con bases de datos, la gestión de contenidos y los sistemas de menús. Drupal puede ser utilizado bajo los términos de la GNU Public License, y puede descargarse gratuitamente desde <http://drupal.org>. Se trata de un CMS programado en el lenguaje de propósito general PHP, que es desarrollado y mantenido por una activa comunidad de usuarios y desarrolladores de código abierto a nivel mundial.

El contenido de un portal web basado en Drupal, junto con sus configuraciones, se almacena en bases de datos y se presenta al usuario en un front-end mediante la construcción dinámica de cada página.

Merece la pena destacar la notable popularidad de Drupal, derivada entre otros factores de su flexibilidad y capacidad de adaptación. Existen miles de módulos adicionales que permiten que un desarrollador de contenidos pueda integrar la funcionalidad deseada para su web.

Actualmente, Drupal es uno de los CMS más profesionales, altamente valorado por la calidad de su codificación, de fácil configuración e instalación y, como se ha mencionado, con incontables funcionalidades, módulos, plugins y temas con los que poder diseñar lo que se necesite. Es de valorar, igualmente, la completa documentación existente, así como el soporte ofrecido por la comunidad.

Es interesante destacar que Drupal dispone de su propio equipo de seguridad¹, así como una sección² encargada de informar a la comunidad de Drupal acerca de las vulnerabilidades descubiertas, así como de las actualizaciones recomendadas [50].

Las webs de instituciones o empresas tan representativas como el Go-

¹<http://drupal.org/security-team>

²<http://drupal.org/security>

bierno de Bélgica, MTV, Discovery Magazine, Warner Brothers, New York Observer, The Economist, Examiner.com, o The White House están basadas en Drupal, de ahí que se haya optado por este CMS para la realización de este proyecto.

Haciendo uso de este framework se ha implementado un servicio que proporciona una interfaz web para cada una de las aplicaciones integradas en *Astrody^{Web}_{Tools}*. Cada interfaz es capaz de recibir las solicitudes y enviarlas para su procesamiento al servidor de aplicaciones, el cual las procesa y devuelve los resultados, incluyendo un post-procesado e interpretación a través de otros componentes software. Por ejemplo, se utiliza Gnuplot [61] para la representación gráfica y visualización de los datos, Octave [60] para los cálculos numéricos, R [148] para los cálculos estadísticos, L^AT_EX [87] para el procesado de los textos y la generación de informes, así como otras aplicaciones cuyas salidas también se integran en la página web resultante. Finalmente, las gráficas, los informes en formato pdf y otros resultados de cada cálculo pueden ser descargados por cada usuario en un archivo comprimido.

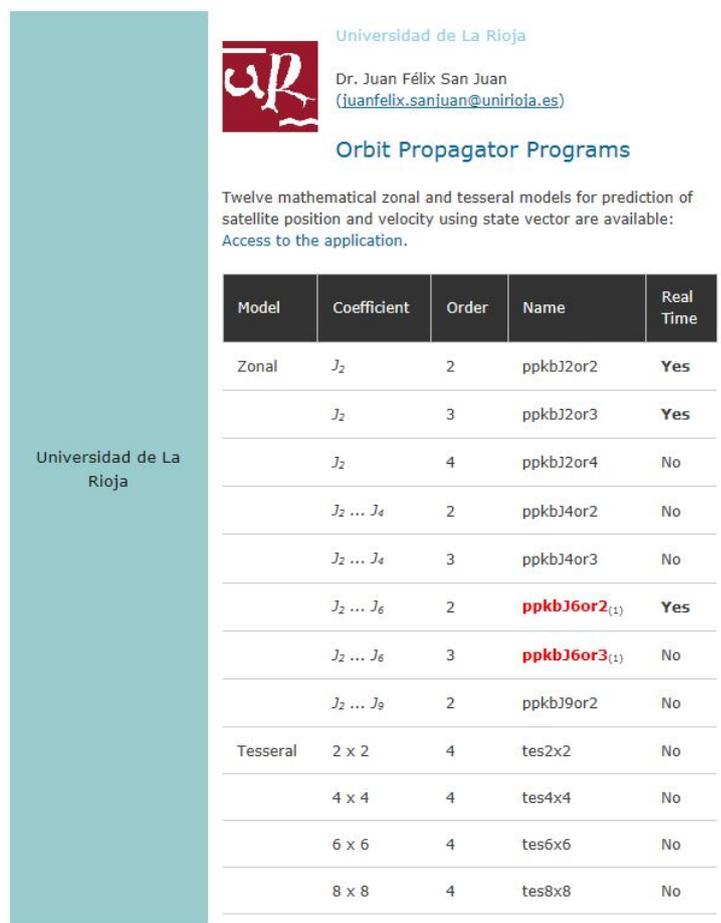
2.4. Aplicaciones integradas en *Astrody^{Web}_{Tools}*

Actualmente hay cuatro aplicaciones disponibles en *Astrody^{Web}_{Tools}* (<http://taastrody.unirioja.es>), a las cuales tiene acceso cualquier usuario registrado. Estas aplicaciones pueden ser utilizadas en modo individual o combinado; por ejemplo, los propagadores de la suite OPP o el propagador semi-analítico DSST pueden combinarse con ZERGOF para estudiar la evolución a largo plazo de las órbitas que repiten la traza. A continuación se describen las aplicaciones integradas en *Astrody^{Web}_{Tools}*.

2.4.1. Orbit Propagator Programs

Orbit Propagator Programs (OPP) es una suite que incluye doce propagadores orbitales analíticos que permiten calcular la posición y velocidad de un orbitador en cualquier instante, mediante una función del tiempo, a partir de su posición y velocidad en un instante inicial [126, 128]. Sus modelos implementan una aproximación analítica mediante transformaciones de Lie y métodos clásicos de promedios. La suite de propagadores ha sido generada por medio de MathATESAT [133]. OPP, que ha sido desarrollada en C/C++, no ha requerido de ningún proceso de reingeniería para ser integrada en el proyecto *Astrody^{Web}_{Tools}*. Como puede verse en la figura 2.3, los doce propagadores se muestran ordenados en función del tipo de coeficientes, zonales o tesorales, del número de coeficientes considerados, y finalmente del orden de la aproximación analítica utilizada.

Cada modelo implementa una aproximación analítica a la solución del



Universidad de La Rioja

Dr. Juan Félix San Juan
(juanfelix.sanjuan@unirioja.es)

Orbit Propagator Programs

Twelve mathematical zonal and tesseral models for prediction of satellite position and velocity using state vector are available:
Access to the application.

Model	Coefficient	Order	Name	Real Time
Zonal	J_2	2	ppkJ2or2	Yes
	J_2	3	ppkJ2or3	Yes
	J_2	4	ppkJ2or4	No
	$J_2 \dots J_4$	2	ppkJ4or2	No
	$J_2 \dots J_4$	3	ppkJ4or3	No
	$J_2 \dots J_6$	2	ppkJ6or2₍₁₎	Yes
	$J_2 \dots J_6$	3	ppkJ6or3₍₁₎	No
	$J_2 \dots J_9$	2	ppkJ9or2	No
Tesseral	2×2	4	tes2x2	No
	4×4	4	tes4x4	No
	6×6	4	tes6x6	No
	8×8	4	tes8x8	No

Figura 2.3: Suite OPP alojada en *Astrody^{Web}_{Tools}*.

sistema de ecuaciones diferenciales

$$\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla_{\mathbf{x}}\mathcal{V},$$

donde \mathcal{V} es el campo de gravedad del planeta y se expresa mediante el desarrollo en serie

$$\mathcal{V} = -\frac{\mu}{r} \left[1 + \sum_{n \geq 2} \left(\frac{\alpha}{r}\right)^n J_n P_n(\sin \beta) + \sum_{n \geq 2} \left(\frac{\alpha}{r}\right)^n \sum_{1 \leq m \leq n} (C_{nm} \cos m\lambda + S_{nm} \sin m\lambda) P_{nm}(\cos \beta) \right],$$

donde los parámetros J_n , C_{nm} y S_{nm} describen la forma del planeta.

La figura 2.4 muestra la interfaz web que permite operar sobre cada uno de los propagadores incluidos en OPP.

Orbit Propagator Programs Application

Introduce the data (osculating Keplerian elements) of your satellite.

- a: semi-major axis
- e: eccentricity
- ω : argument of Perigee
- Ω : argument of the node
- i: inclination
- M: mean anomaly

Initial conditions

a (km): e: ω (deg): Ω (deg):

i (deg): M (deg):

initial time (s): Final time (s): Step (s):

Model:

Figura 2.4: Interfaz web de la suite OPP.

En la figura 2.5 se muestra la aplicación del modelo `ppkbj2or3` a un satélite de tipo Quasi-Spot. El usuario introduce los datos solicitados en los campos de entrada del formulario y selecciona el modelo que quiere aplicar. La solución es facilitada al usuario una vez finaliza la propagación.

Orbit Propagator Programs Application

Introduce the data (osculating Keplerian elements) of your satellite.

- a: semi-major axis
- e: eccentricity
- ω : argument of Perigee
- Ω : argument of the node
- i: inclination
- M: mean anomaly

Initial conditions

a (km): e: ω (deg): Ω (deg):

i (deg): M (deg):

initial time (s): Final time (s): Step (s):

Model:

Figura 2.5: Ejecución del modelo `ppkbj2or3` de la suite OPP para un satélite de tipo Quasi-Spot.

La figura 2.6 muestra los resultados, así como una serie de enlaces que permiten visualizar gráficamente, por un lado, los resultados obtenidos (figuras 2.7, 2.8, 2.9 y 2.10), y por otro, el error cometido por la aproximación analítica al compararla con la integración numérica del problema original (figuras 2.11 y 2.12). Al final de la interfaz web, el usuario dispone de un enlace para la descarga de todos los resultados, tanto las efemérides como los gráficos.

Initial conditions

a (km): e: ω (deg): Ω (deg):

i (deg): M (deg):

Initial time (s): Final time (s): Step (s):

Model:

Results

Plots data	Plots error
<ul style="list-style-type: none"> Trace of the Orbit Test of the energy Orbital elements Long period 	<ul style="list-style-type: none"> Orbital elements Frenet

Orbital elements

T (S), A (KM), E, G (DEG), Ω (DEG), I (DEG), L (DEG)

```

0 7200.00 0.01000 27.000 0.000 98.000 360.000
180 7196.83 0.00957 26.969 359.249 98.002 10.697
360 7193.36 0.00914 25.563 358.499 98.004 22.761
540 7190.08 0.00886 22.880 357.749 98.005 36.094
720 7187.47 0.00883 19.655 357.000 98.007 49.963
900 7185.88 0.00907 16.987 356.252 98.008 63.270
1080 7185.53 0.00948 15.698 355.504 98.008 75.196
1260 7186.45 0.00995 15.990 354.756 98.008 85.543
1440 7188.47 0.01033 17.573 354.007 98.006 94.601
1620 7191.30 0.01056 19.941 353.258 98.005 102.879
1800 7194.54 0.01059 22.543 352.508 98.003 110.931

```

[Download results.](#)

Figura 2.6: Resultado de la ejecución del modelo *ppkbj2or3* de la suite OPP para un satélite de tipo Quasi-Spot.

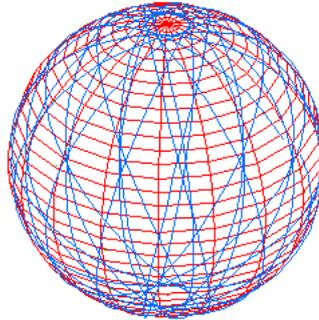


Figura 2.7: Traza de la órbita para un satélite de tipo Quasi-Spot.

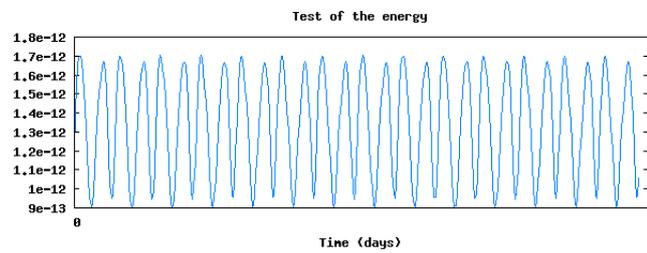


Figura 2.8: Test de la energía para un satélite de tipo Quasi-Spot.

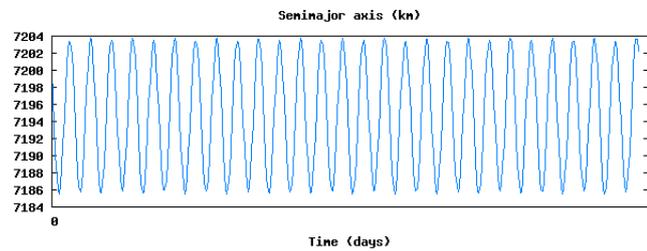


Figura 2.9: Evolución del semieje mayor para un satélite de tipo Quasi-Spot.

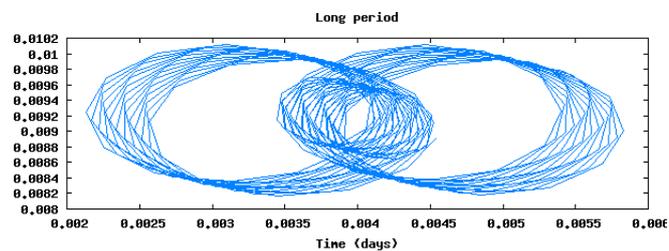


Figura 2.10: Evolución de los términos de largo periodo ($e \cos g$, $e \sin g$) para un satélite de tipo Quasi-Spot.

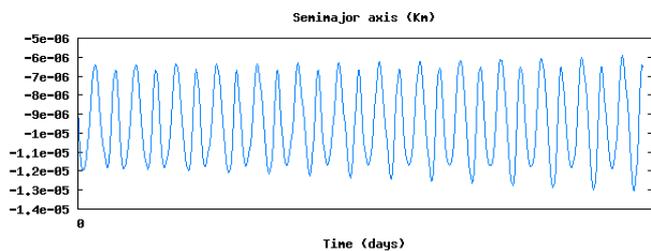


Figura 2.11: Error del semieje mayor (km) para un satélite de tipo Quasi-Spot.

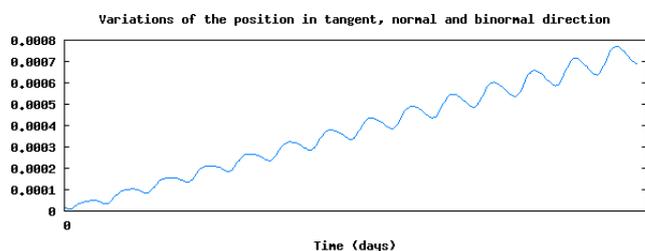


Figura 2.12: Error de posición (km) para un satélite de tipo Quasi-Spot.

2.4.2. Zonal Earth Repeating Ground-track Orbit Finder

Zonal Earth Repeating Ground-track Orbit Finder (ZERGOF) [82] es un programa creado por el Dr. Martín Lara para ayudar a los diseñadores de misión de satélites artificiales en la búsqueda automática de órbitas que repiten la traza en el caso de planetas similares a la Tierra, en una determinada proporción fijada por el usuario entre el número de revoluciones del satélite en su órbita y el número de periodos nodales. Este tipo de órbitas se caracterizan por mantener la excentricidad y el argumento del perigeo casi constantes, o congelados, y son muy convenientes como órbitas nominales para ciertas misiones de satélites artificiales.

Este tipo de órbitas se clasifican en:

1. Cuasi-circulares, con inclinación seleccionada por el usuario.
2. En las proximidades de la inclinación crítica, con excentricidad seleccionada por el usuario.
3. Heliosíncronas, bien cuasi-circulares, bien en las proximidades de la inclinación crítica.

El modelo de fuerzas utilizado por ZERGOF considera un modelo zonal de potencial gravitatorio:

$$\mathcal{V} = -\frac{\mu}{r} \left[1 + \sum_{n \geq 2} \left(\frac{\alpha}{r} \right)^n J_n P_n(\sin \beta) \right].$$

El sistema dinámico se formula en un sistema de referencia inercial, en el que el problema es biparamétrico: la energía determina el tamaño (y periodo) de la órbita, mientras que la componente polar del vector momento angular está relacionada con su inclinación. En el caso de la inclinación crítica, las variaciones en la componente polar del vector momento angular van asociadas a variaciones en la excentricidad con la inclinación fija.

La búsqueda de la órbita deseada comienza con el cálculo de una solución aproximada empleando técnicas analíticas. Posteriormente se refina mediante técnicas numéricas de continuación de familias de órbitas periódicas.

En la figura 2.13, ZERGOF busca las condiciones iniciales de una órbita cuasi-circular, con una inclinación de 54° , que repite la traza cada tres periodos nodales.

ZERGOF: Zonal Earth Repeat Ground-track Orbits Finder Application

Introduce the data

- Gravitational Model
- Order of the potential
- Nodal days
- Nodal periods
- ω (deg)
- Orbits: Direct / Retrograde
- e: eccentricity

Type of periodic orbit

Case 1: Almost circular sun synchronicity

Case 2: Almost circular

Gravitational Model:	WGS84 (n<10) <input type="text"/>	Order of the potential:	<input type="text" value="9"/>
Nodal days:	<input type="text" value="1"/>	Nodal periods:	<input type="text" value="3"/>
		i (deg):	<input type="text" value="54"/>
<input type="button" value="Execute"/>			

Case 3: Critical inclination

Figura 2.13: Ejecución de ZERGOF para una órbita cuasi-circular.

En la figura 2.14 se recoge el resultado de la ejecución del programa.

Se obtiene información sobre la convergencia del método numérico, y si es posible encontrar unas condiciones iniciales que cumplan las especificaciones solicitadas.



Figura 2.14: Resultado de la ejecución de ZERGOF para una órbita cuasi-circular.

Como se puede observar en la figura 2.15, junto a la solución se incorpora un enlace que permite la representación gráfica de la órbita calculada, así como de la evolución de los términos de largo periodo ($e \sin g$, $e \cos g$), como se muestra en la figura 2.16.

El código original de esta aplicación fue escrito en Fortran 77 por el Dr. Martín Lara, si bien el código integrado en *Astrody^{Web}_{Tools}* es una reimplementación en C que ha sido realizada por el equipo de soporte de *Astrody^{Web}_{Tools}*.

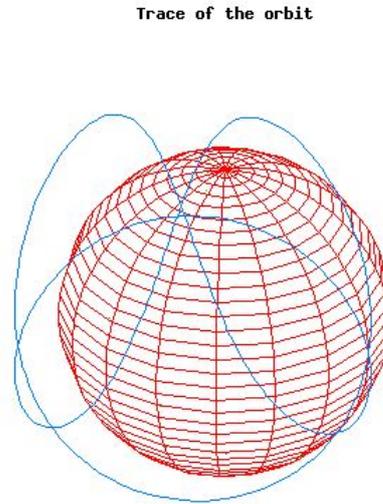


Figura 2.15: ZERGOF: traza de una órbita cuasi-circular.

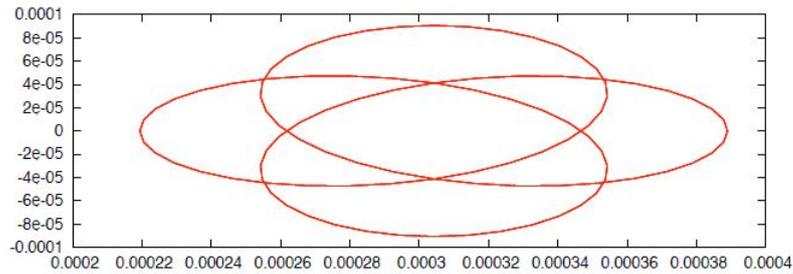


Figura 2.16: ZERGOF: evolución de los términos de largo periodo ($e \cos g, e \sin g$) para una órbita cuasi-circular.

2.4.3. Repeating Ground-track Orbit Finder

Repeating Ground-track Orbit Finder [83] es otro paquete software creado por el Dr Martín Lara para facilitar a los diseñadores de misión de satélites artificiales la búsqueda de órbitas que repiten la traza, u órbitas congeladas, en el caso de un satélite planetario. La búsqueda de la órbita comienza mediante la obtención de una solución aproximada mediante técnicas analíticas. Seguidamente, el usuario selecciona las características de la órbita, y la solución se refina mediante métodos de continuación numérica. Esta aplicación también fue desarrollada en Fortran 77, y no cuenta con interfaz gráfica de usuario, por lo que no ha necesitado ningún proceso de reingeniería para poder ser integrada en el proyecto *Astrody^{Web}_{Tools}*.

2.4.4. DSST

2.4.4.1. Antecedentes

La Draper Semianalytical Satellite Theory (DSST) [21, 101] es un propagador de órbitas semianalítico desarrollado por P. Cefola, W. McClain, L. Early, R. Proulx, M. Slutsky y otros colegas, inicialmente en Computer Sciences Corporation (CSC), y más tarde en el Charles Stark Draper Laboratory (CSDL), a finales de los años 70 y principios de los 80. Durante la etapa en el CSDL, DSST fue mejorado mediante las aportaciones de estudiantes graduados en el Massachusetts Institute of Technology, bajo la dirección del personal del CSDL. La teoría semianalítica de DSST utiliza una estrategia de parámetros medios no singulares, que ofrece significativas mejoras tanto en la velocidad de cómputo frente a los enfoques puramente numéricos, como en la precisión frente a las aproximaciones de tipo analítico. Se han desarrollado modelos de fuerzas muy completos para las ecuaciones de movimiento en parámetros medios, así como para el movimiento de corto periodo [56]. Esta teoría semianalítica ha sido ampliamente utilizada tanto en propagación orbital a largo plazo para el análisis de misión, como para el modelizado del movimiento orbital en procesos de determinación orbital [55]. En la actualidad, el código fuente de DSST es mantenido por Z. Folcik y P. Cefola. En [21] se muestra con mayor detalle la evolución histórica de DSST.

Existen dos versiones de DSST: una de ellas está incluida como opción en el Goddard Trajectory Determination System (GTDS), mientras que la otra, DSST Standalone, constituye una herramienta individual de propagación de órbitas. Ambas versiones están en continua evolución y actualización, lo cual permite a DSST tener en cuenta una amplia variedad de perturbaciones, que pueden ser seleccionadas a través de un sistema de opciones no trivial en tiempo de ejecución. De este modo, DSST constituye una potente herramienta tanto para la determinación orbital precisa a corto plazo como para la evolución a largo plazo.

DSST es la primera de una serie de aplicaciones que han sido incluidas en la Open Source Software Suite for *Space Situational Awareness* (SSA) and Space Object Catalog Work, propuesta en [22]. En este documento se plantean dos grandes retos: el problema de adaptar viejas aplicaciones utilizadas en SSA a los entornos actuales de computación, y la necesidad de incluir técnicas analíticas entre las herramientas destinadas a SSA. Cabe destacar que la adaptación de aplicaciones informáticas complejas del campo científico a los entornos actuales de computación puede requerir de múltiples procesos de reingeniería, como por ejemplo el encapsulado no invasivo de las aplicaciones obsoletas, la migración a plataformas de programación con tecnología orientada a objetos, como Java y C++, o la creación de aplicaciones Web 2.0 para las funciones SSA.

DSST Standalone, programado en Fortran 77 para ser ejecutado mediante comandos, fue integrado en un prototipo inicial de *Astrody^{Web}_{Tools}* en 2011 [132]. De este modo, se le dotó de una interfaz web amigable que contribuyó a simplificar su modo de uso tanto para usuarios expertos como no expertos, y marcó el camino para hacer DSST más accesible a las comunidades que trabajan en dinámica de vuelo espacial. En [91, 131] se describe el prototipo inicial de *Astrody^{Web}_{Tools}*, que fue la base para la integración de DSST. A su vez, ese mismo año el equipo de OREKIT (Orbit Extrapolation Kit) llevaba a cabo una implementación de DSST en Java [24, 23, 107]. En nuestro caso, la integración de DSST en este proyecto no ha sido complicada, aunque ha requerido de un estudio intensivo de la aplicación, así como de sus entradas y salidas, para poder enmascarar su complejidad inherente y facilitar su uso.

Tanto la aplicación web para DSST como la migración de DSST a una plataforma software moderna orientada a objetos fueron reconocidas como *demonstraciones tecnológicas* en Open Source Software for Space Situational Awareness (OS4A) en [22]. Asimismo, Vallado [150] recoge la integración de DSST en el proyecto *Astrody^{Web}_{Tools}*, a través de <http://tastrody.unirioja.es>, en las páginas 699 y 1060 de su obra de referencia para la comunidad espacial.

2.4.4.2. DSST Standalone

DSST Standalone se basa en una teoría semianalítica formulada en elementos equinociales no singulares, que permite desacoplar los efectos de largo y corto periodo mediante la teoría de perturbaciones, y por tanto manejarlos por separado. De este modo, se aúna la precisión de las teorías especiales de perturbaciones con la eficiencia de las teorías generales de perturbaciones.

La teoría semianalítica reemplaza las ecuaciones convencionales del movimiento por dos grupos de fórmulas [21, 95]: las ecuaciones del movimiento en elementos medios

$$\frac{d\bar{a}_i}{dt} = \sum_{j=1}^N \varepsilon^j A_{i,j}(\bar{a}_i) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}), \quad (i = 1, \dots, 5)$$

y las expresiones de las variaciones de corto periodo

$$a_i = \bar{a}_i + \sum_{j=1}^N \varepsilon^j \eta_{i,j}(\bar{a}_i, \bar{\lambda}) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}), \quad (i = 1, \dots, 5).$$

Con ello se logra poder utilizar un paso de integración del orden de una o dos evaluaciones por día, mucho más largo y eficiente que el requerido por las teorías especiales de perturbaciones. Además, el uso de elementos medios en coordenadas equinociales no singulares conlleva una evolución más lineal,

lo cual resulta ventajoso en procesos de determinación orbital basados en la teoría semianalítica. La forma concreta de los parámetros equinociales utilizados en DSST se describe en [20], y constituye la opción (g) de [71]. La teoría semianalítica incluye una completa estrategia de interpolación.

Tabla 2.1: Modelo de movimiento medio en DSST.

Perturbación	Ecuaciones del movimiento
Armónicos zonales	Términos lineales
Segundo orden en J_2	Términos de segundo orden $J_2^2 e$
Armónicos teserales lm ($2 < l < 50$, $1 \leq m < 50$)	Términos lineales y resonantes
Atracción del Sol y de la Luna	Términos lineales
Frenaje atmosférico	Términos lineales y combinados con J_2 . Las variaciones son evaluadas por cuadraturas (Harris-Priester, Jacchia-Roberts, MSISE-90)
Presión de radiación solar	Términos lineales. Las variaciones son evaluadas por cuadraturas
Efecto de marea	Número de Love

Tabla 2.2: Modelo de movimiento de corto periodo en DSST.

Perturbación	Ecuaciones del corto periodo
Armónicos zonales	Términos lineales
Segundo orden en J_2	Términos de segundo orden $J_2^2 e$
Armónicos teserales lm ($2 < l < 50$, $1 \leq m < 50$)	Términos lineales
Atracción del Sol y de la Luna	Términos lineales
Frenaje atmosférico	Términos lineales. Los coeficientes son evaluados por cuadraturas
Presión de radiación solar	Términos lineales. Los coeficientes son evaluados por cuadraturas
Efecto de marea	No

Las tablas 2.1 y 2.2 recogen los modelos de fuerzas actualmente incluidos en la teoría de DSST para las ecuaciones del movimiento medio y para las variaciones de corto periodo, respectivamente. En ellas se hace referencia a los modelos concretos, incluyendo descripciones de los algoritmos junto con

información acerca de su implementación. Tras el desarrollo original, Don Danielson, Beny Neta y Leo Early publicaron un documento resumen de DSST [39].

DSST Standalone es una aplicación programada en Fortran 77 que no incorpora ningún tipo de interfaz gráfica de usuario³ y que se ejecuta, por tanto, mediante comandos. Este modo de ejecución, que podría denominarse *paradigma de caja negra*, constituye, como ya se ha expuesto, un patrón clásico en programación científica. La aplicación lee, por una parte, los ficheros que contienen el modelo físico, en los cuales se especifican las constantes astrodinámicas, las efemérides solares/lunares/planetarias en coordenadas J2000 o como datos verdaderos, los coeficientes de conversión del tiempo y de movimiento polar, los modelos del geopotencial 50x50, los índices geomagnéticos planetarios cuasi-logarítmicos y las temperaturas mínimas exosféricas nocturnas para el modelo de densidad atmosférica de Jacchia-Roberts. Por otra parte, también se leen los ficheros con los datos de usuario, que contienen las condiciones iniciales del satélite y los parámetros de configuración de DSST, así como los tiempos de salida deseados. Una vez almacenados en memoria datos y constantes, DSST lleva a cabo los cálculos y las salidas se guardan en dos ficheros. La figura 2.17 muestra el estricto formato Fortran del fichero de datos de entrada a DSST denominado *pmef.txt*.

³A mediados de los años 90, el Draper Laboratory desarrolló el Radarsat Flight Dynamics System (FDS) para la misión Radarsat 1 SAR. Este sistema accedía tanto a GTDS como a DSST Standalone a través de una interfaz de usuario. El Radarsat FDS fue implementado en la estación de trabajo VAXstation 4000/90. El sistema proporcionaba un entorno multiprocesador a través del uso de módulos (ejecutables) de tipo single-input/single-output, con comunicación entre procesos implementada mediante buzones de correo VAX/VMS e indicadores de eventos. Este sistema aún se utiliza en la actualidad, ya que Radarsat 1 está en fase de prolongación de su misión. Posteriormente se extendió el diseño del sistema para ser aplicado a los requerimientos de gestión orbital de la constelación de satélites Iridium, pero no llegó a implementarse en software.

```

C
C   PMEF FILE
C
C23456789012345678901234567890123456789012345678901234567890123456789012
0.2012020700000000D+08 PME_DATE      1
0.0000000000000000D+06 PME_TIME      2
0.8000000000000000D+04 ELS_KEP(1)    3 ! 8000 Km
0.1000000000000000D+00 ELS_KEP(2)    4
0.6000000000000000D+02 ELS_KEP(3)    5
0.0000000000000000D+03 ELS_KEP(4)    6
0.0000000000000000D+03 ELS_KEP(5)    7
0.0000000000000000D+03 ELS_KEP(6)    8
0.0000000000000000D+00 ELS_EQUIN(1)   9
0.0000000000000000D+00 ELS_EQUIN(2)  10
0.0000000000000000D+00 ELS_EQUIN(3)  11
0.0000000000000000D+00 ELS_EQUIN(4)  12
0.0000000000000000D+00 ELS_EQUIN(5)  13
0.0000000000000000D+00 ELS_EQUIN(6)  14
0.0000000000000000D+00 PGSVEL(1)     15
0.0000000000000000D+00 PGSVEL(2)     16
0.0000000000000000D+00 PGSVEL(3)     17
0.0000000000000000D+00 PGSVEL(4)     18
0.0000000000000000D+00 PGSVEL(5)     19
0.0000000000000000D+00 PGSVEL(6)     20
0.2000000000000000D+01 PME_CD        21
0.0000000000000000D+00 PME_RHO_ONE   22
0.5000000000000000D-04 SMA_SIGMA     27
0.5000000000000000D-04 INC_SIGMA     28
0.5000000000000000D-04 ASC_SIGMA     29
0.2100000000000000D+03 PME_SCMASS    30
0.4000000000000000D-03 PME_SCAREA    31
0.4320000000000000D+05 PME_STEPSIZE  34
0.1400000000000000D+02 DP_SPARE1     35
0.1130000000000000D+03 DP_SPARE2     36
0.0000000000000000D+00 DP_SPARE3     37
0.0000000000000000D+00 DP_SPARE4     38
0.0000000000000000D+00 DP_SPARE5     39
0.0000000000000000D+00 DP_SPARE6     40
1 PME_RETRO                            41
12 PME_KEP_SYS                          42
12 POS_VEL_SYS                          43
1 GEN_METHOD                            44
1 ATMOS_MODEL                           45
840401 JACRB_DATE                        46
123 JACRB_SSS                            47
840401 SLP1950_DATE                      48
456 SLP1950_SSS                          49
840401 SLPTOD_DATE                       50
789 SLPTOD_SSS                           51
840401 TIMECF_DATE                       52
123 TIMECF_SSS                           53
2 HARRIS_MODEL                           54
6 POTNTL_MODEL                           55
30 PME_NMAX                              56
0 PME_MMAX                              57
1 PME_IZONAL                             58
1 PME_IJ2J2                              59 1=On 2=Off
0 PME_NMAXRS                             60
0 PME_MMAXRS                             61
3 PME_ITHIRD                             62
2 PME_INDRG                              63 2 = DRAG OFF
2 PME_ISZAK                              65 1 = on ,2 = off
2 PME_INDSOL                             66 2 = SOLRAD OFF
2 PME_JSHPER                             67
3 PME_JZONAL                             68
3 PME_JMDALY                             69
2 PME_INP_TYPE                           70
12 PME_EQUI_SYS                          71
12 INTEG_FRAME                           72
12 OUTPUT_FRAME                          73
0 PME_NSTATE                             74
1 PME_SPSHPER                            75
1 PME_KSPCF                              76
4 PME_INDSET                             77

```

Figura 2.17: Fichero pmef.txt.

La configuración de este fichero de datos de usuario no es nada trivial para usuarios no expertos. Por esta razón, ciertas opciones de GTDS DSST

no están disponibles en la versión DSST Standalone.

2.4.4.3. DSST Web

El proyecto *Astrody^{Web}_{Tools}* mantiene DSST Standalone en su estado original, y lo conecta de forma dinámica al entorno web. El código permanece como fue programado por sus autores y sólo ha sido necesaria la creación de una interfaz web que simplifique la comunicación del usuario con la aplicación, que enmascare los detalles de complejidad en la implementación de la misma, así como que relegue a un segundo plano el lenguaje de programación en que fue desarrollada. La figura 2.18 muestra el proceso de encapsulado desarrollado para integrar DSST.

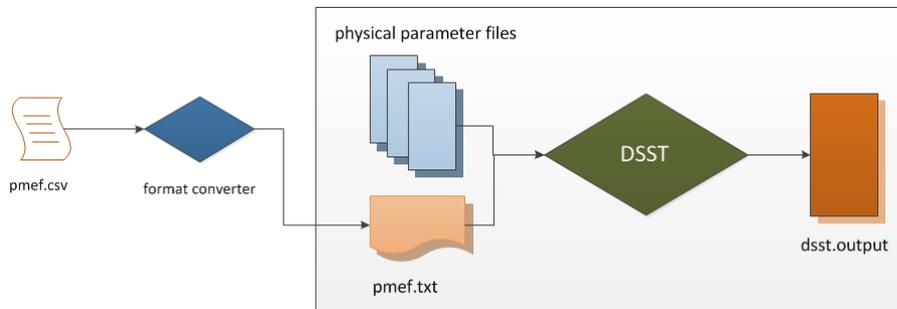


Figura 2.18: Encapsulado de DSST en *Astrody^{Web}_{Tools}*.

Se ha optado por el diseño e implementación de dos formas distintas de uso de DSST Web.

La primera, dirigida quizás a usuarios no experimentados, ha sido la creación de una interfaz web que, mediante formularios, permita de una manera intuitiva y gráfica la introducción de toda la información que necesita DSST para su ejecución. Parte de esta información es controlada a través de la selección de opciones en combos desplegables en algunos casos; en otros se ofrecen valores por defecto para algunos campos de texto, e igualmente se informa al usuario del rango de valores permitidos. De este modo, se guía al usuario en la selección y validación del modelo físico que se quiere integrar, así como de las condiciones iniciales del satélite y tiempo de salida, para proceder finalmente a su ejecución. Las figuras 2.19, 2.20, 2.21 y 2.22 muestran los citados formularios web.

Draper Semianalytical Satellite Theory (DSST) Application

[Download an example file.](#)

[Download our DSST template.](#)

Remember to save the file as .csv format (using ";" as delimiter) before uploading it.

If you need more information please read:

- [How to save a .csv file?](#)
- [How to use a .xlt template?](#)

UPLOAD YOUR FILE (EXTENSION .CSV) TO FILL OUT THE FORM AUTOMATICALLY:

Archivo:

Step 1 / 3

**FILL OUT THE FORM MANUALLY,
OR, IF YOU UPLOADED A FILE, PLEASE CHECK OUT THE FIELDS:**

Initial Conditions

Day	Month	Year	Hour	Minute	Second
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Reference frame			Element type		
Mean of J2000			Mean		
Select the element set:					
<input checked="" type="radio"/> Kepler element set <input type="radio"/> Equinoctial element set <input type="radio"/> Cartesian element set					
a (km):	<input type="text"/>	e:	<input type="text"/>	i (deg):	<input type="text"/>
Ω (deg):	<input type="text"/>	ω (deg):	<input type="text"/>	M (deg):	<input type="text"/>

Figura 2.19: Interfaz web del propagador semianalítico DSST (parte 1 de 3).

La segunda, dirigida a usuarios expertos, ha sido la creación de un nuevo formato reducido del fichero de datos de entrada que requiere la aplicación. Este nuevo fichero **pmef**, en formato **csv** (cuyos campos están separados por “;”), resulta más amigable y fácil de usar y puede ser fácilmente creado con cualquier procesador de texto plano. Se trata de hacer uso del lenguaje natural para la definición de todas las variables que constituyen el modelo a integrar. Además, como puede apreciarse en la figura 2.23, se ha reducido el número de parámetros y su configuración respecto al fichero original **pmef.txt**. La información que falta es calculada internamente a partir de los datos contenidos en **pmef.csv**. De esta forma, un usuario experto podrá trabajar directamente en este nuevo formato, crear el fichero **pmef.csv** y subirlo a través de la interfaz web, a falta únicamente de introducir en el correspon-

Draper Semianalytical Satellite Theory (DSST) Application

Step 2 / 3

Force Models

Central Body Gravity

Model:

Degree: Order:

Resonance

Max degree of resonance: Max order of resonance:

Drag (if you don't use this option, please do not fill out "Spacecraft" fields.)

Atmospheric density model **F10.7**

Drag Coefficient:

Spacecraft mass (kg): Spacecraft area (km²):

Iszak J₂ height correction:

Third Body Gravity

Third body averaging:

Solar Radiation Pressure

Solar radiation pressure:

Solid Earth Tide Indicator

Effects:

Figura 2.20: Interfaz web del propagador semianalítico DSST (parte 2 de 3).

diente formulario la información que describe las condiciones iniciales para la ejecución del modelo.

Cuando el usuario utiliza la interfaz web de DSST y sube el fichero `pmef.csv`, el sistema valida la información que contiene y rellena todos los campos del formulario que hayan pasado la validación. Aquellos campos no validados o no cumplimentados se resaltan al usuario para su cumplimentación manual. Una vez validada toda la información, se procede a la ejecución

Draper Semianalytical Satellite Theory (DSST) Application

Step 3 / 3

Integration

The screenshot shows the 'Integration' settings page for the DSST Application. It is titled 'Step 3 / 3'. The page is divided into several sections:

- Frame:** A dropdown menu set to 'True of reference (J2000)' and a text input field for 'Stepsize (secs)' with the value '45000.0'.
- Analytical Averaging:** A section containing two dropdown menus: 'Zonal harmonic' set to 'Off' and 'J₂² effect included' set to 'Off'.
- Short-periodic model used by the semianalytic orbit generator:** A dropdown menu set to '12 Hour high eccentricity Molniya Orbit (moderate accuracy)'.
- Output parameters:** A section containing a dropdown menu for 'Frame' set to 'Mean of J2000'.
- Buttons:** A 'Save file' button at the bottom left.

Figura 2.21: Interfaz web del propagador semianalítico DSST (parte 3 de 3).

Draper Semianalytical Satellite Theory (DSST) Application

EXECUTION LIST

This is the list which contains all files you created to be executed.
You can add a new one just loading it from the list and modifying the fields you consider. You can create a new blank one as well:

The screenshot shows the 'EXECUTION LIST' page. It features a table with three rows of files:

LIST	
pmef2	Show form Delete Load
pmef1	Show form Delete Load
pmef3	Show form Delete Load

At the bottom of the page, there are two buttons: 'New form' and 'Execute files'.

Figura 2.22: Página de ejecución de DSST Web.

del modelo en DSST (figura 2.22).

```

numVarPmef;NameVar;Value
1; Date; 20120207
2; Time; 000000.0000
3; Reference frame; True of reference (J2000)
4; Kep semimajor axis; 7200.25689
5; Kep eccentricity; 0.00124
6; Kep inclination; 11.6
7; Kep ascending node; 90.0
8; Kep argument of perigee; 100.0
9; Kep mean anomaly; 359.999
10; Potential models; Grace gravity model GGM01
11; Max degree of central body; 2
12; Max order of central body; 0
13; Max degree of resonance; 0
14; Max order of resonance; 0
15; Atmospheric density model; Harris-Priester
16; F10.7; 100
17; Drag coefficient; 0.2
18; Spacecraft mass; 2.1
19; Spacecraft area; 4.0
20; Iszak J2 height correction; Yes
21; Third body averaging; Off
22; Solar radiation pressure; Yes
23; Solid earth tide indicator; No tidal effects
24; Integration frame; True of reference (J2000)
25; Integration stepsize (secs); 45000.0
26; Integration central body zonal harmonic; Off
27; Integration J22 efect; Off
28; Short-periodic model; 12 Hour high eccentricity Molniya Orbit (moderate accuracy)
29; Output reference; Mean of J2000

```

Figura 2.23: Nuevo formato .csv del fichero de datos de usuario de DSST Web.

Finalmente, se ha diseñado también un paso intermedio entre estas dos formas de usar DSST Web. Para usuarios no del todo experimentados, o que simplemente deseen ahorrar parte del tiempo que requieren las tres interfaces que conforman el formulario de datos, se ha creado una plantilla en formato Excel (figuras 2.24 y 2.25), descargable desde la página Web de la aplicación, que resulta mucho más rápida de usar. Así, de manera interactiva, como si de la Web se tratara, se va guiando al usuario para una correcta cumplimentación de los campos. Esta forma de uso puede resultar interesante, ya que permite al usuario guardar en su equipo las distintas configuraciones creadas, pudiendo reutilizarlas en otro momento y cambiar tan solo los parámetros que desee. Una vez que se ha completado la plantilla en Excel, se debe guardar el documento en formato csv para poder subir después este fichero a la interfaz de la aplicación DSST Web.

A	B	D
DSST WEB FORM (http://tastrody.unirioja.es. © 2012)		
Use comma (,) or point (.) as decimal separator in this form but check the configuration of your computer to use it correctly:		
For countries which use comma (,) as decimal separator instead of point (.):		
<p>** Configuration System: Control panels regional and language options must be set to decimal comma and point for thousands separator.</p> <p>** Excel program: Tools menu / Options / International. Check comma (,) as decimal separator and point (.) as thousands separator.</p>		
For countries which use point (.) as decimal separator instead of comma (,) please follow the steps above indicated and make sure you have the right configuration for your country.		
Save the file as CSV format file.		
INITIAL CONDITIONS		
1	Date	20110206
2	Time	000000,0000
3	Reference frame	Mean of J2000
4	Element set	Kepler Reference frame: Please select one...
5	Keper semimajor axis	7200,000000
6	Keper eccentricity	0,010000000000000000
7	Keper inclination	98,00000000000000
8	Keper ascending node	0,000000000000000000
9	Keper argument of perigee	90,000000000000000000
10	Keper mean anomaly	0,000000000000000000
11		
FORCE MODELS		
Central Body Gravity		
12	Potential models	Grace gravity model GGM01
13	Max degree of central body	15
14	Max order of central body	0
Resonance		

Figura 2.24: Plantilla Excel para la creación del fichero pmef.csv (1 de 2).

En cualquiera de los dos modos descritos, la información suministrada es transformada para construir la entrada a la aplicación, que a continuación se ejecuta y genera unos resultados (ficheros de texto y una serie de gráficos). Cabe mencionar que DSST Web puede ejecutar simultáneamente varias instancias de DSST, como se puede apreciar en la figura 2.22, lo cual resulta de gran utilidad en escenarios de vuelos en formación o en propagación de catálogos espaciales.

Dos son los ficheros de salida generados por DSST: `dsst.output` y `SP-GOUT`. El primero contiene los elementos keplerianos y equinocciales para el instante final seleccionado por el usuario. El segundo es un fichero de texto que alberga algunos de los parámetros del modelo de fuerzas utilizado durante la ejecución, así como algunas de sus salidas intermedias: elementos promediados y parámetros de las derivadas parciales, junto con opciones del modelo y coeficientes de Fourier de corto periodo.

Los resultados son post-procesados a través de herramientas de código abierto; por ejemplo, se usa Gnuplot para el diseño de gráficos, \LaTeX para la creación de informes en pdf, etcétera. El post-procesado se efectúa en la

23	Resonance		Reference frame: Please select one...
24	15	Max degree of resonance	0
25	16	Max order of resonance	0
26	Atmospheric drag		
27	17	Atmospheric drag	Off
28	18		
29	19		
30	20		
31	21		
32	Solar Radiation Pressure		
33	22	Solar radiation pressure	Off
34	Spacecraft Characteristics		
35	23		
36	24		
37	Third Body Gravity		
38	25	Third body averaging	Off
39	Solid Earth Tide Indicator		
40	26	Solid earth tide indicator	No tidal effects
41	INTEGRATION		
42	27	Integration frame	Mean of J2000
43	28	Integration stepsize (secs)	43000,0000000000000000
44	Analytical averaging		
45	29	Integration central body zonal harmonic	On
46	30	Integration J2-sqr effect	On
47	Short-periodic model used by the semianalytic orbit generator		
48	31	Short-periodic model	Mean elements only
49	Output parameters		
50	32	Output reference	Mean of J2000

Figura 2.25: Plantilla Excel para la creación del fichero pmef.csv (2 de 2).

misma interfaz web, y se crea un enlace que permite descargar todos los resultados en un fichero zip (figura 2.26).

Draper Semianalytical Satellite Theory (DSST) Standalone

Initial conditions

Start time (s): Final time (s):

Step (s):

Results

Plots data

- [Orbital elements](#)
- [Equinoctial elements](#)

SPGOUT

```

                                GTDS AVERAGED EQUATIONS OF MOTION OPTIONS                                PAGE 1

VOP AVERAGING (DRAPER SEMI-ANALYTICAL) SATELLITE THEORY OPTIONS
VARIABLE  VALUE  DESCRIPTION
-----  -
Primary Computational Options for Partial Derivatives
IANAL     1      Compute element rate partials analytically? (0 = no, 1 = A-matrix only)
IDIFF     0      Compute element rate partials with finite diffs? (2 = D-matrix, 3 = Both A & D )
IQDRT     0      Compute element rate partials by numerical quad? (0 = no )
KVRFLG    0      Compute Short-Periodic partials? (0 = no, 1 = B1, 2 = B1 & B4, 3 = B4)

GM EARTH = 398600.4415
RADIUS OF THE EARTH = 6378.136300
J2 = -0.10826356665511E-02

```

[Download results.](#)

Figura 2.26: Página de salida de resultados de DSST Web.

2.5. Ejemplos de utilización

A continuación se describe el modo de utilización de dos de las aplicaciones disponibles, junto con algunos detalles de su integración en $Astrody_{Tools}^{Web}$.

2.5.1. PPKBJ6 OPP

2.5.1.1. Algoritmo

PPKBJ6 [126, 128] es uno de los doce propagadores de la suite OPP de $Astrody_{Tools}^{Web}$. Se trata de una implementación en C de una teoría analítica de segundo orden en forma cerrada, que proporciona la posición y velocidad de un orbitador en cualquier instante, utilizando directamente una función del tiempo junto con su posición y velocidad inicial. El principal objetivo de una teoría analítica, en el caso del problema del satélite artificial, es la reducción del problema original mediante teorías de perturbaciones, de tal modo que el problema transformado resulte lo suficientemente simple como para que pueda ser integrado. PPKBJ6, al igual que el modelo PPKBJ9 [134], se basa en el formalismo Hamiltoniano y utiliza teorías de perturbaciones basadas

en transformaciones de Lie y el método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky.

El Hamiltoniano para un satélite artificial perturbado por los cinco primeros coeficientes armónicos zonales del potencial gravitatorio terrestre viene dado, en variables polares-nodales $(r, \theta, \nu, R, \Theta, N)$, por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \left(R^2 + \frac{\Theta^2}{r^2} \right) - \frac{\mu}{r} + \frac{\mu}{r} \sum_{n \geq 2}^6 J_n \left(\frac{\alpha}{r} \right)^n P_n(\sin \beta), \quad (2.1)$$

donde P_n es el polinomio de Legendre de grado n , $\sin \beta = \sin i \sin \theta$, i es la inclinación de la órbita del satélite, μ es la constante gravitacional, α es el radio ecuatorial de la Tierra, y J_n son los coeficientes armónicos zonales.

El proceso de integración analítica comienza mediante la división de \mathcal{H} en distintas componentes, distribuidas de un modo concreto de acuerdo con su orden de magnitud e importancia relativa, para, a continuación, aplicar las teorías de perturbaciones. Los términos de largo periodo se eliminan mediante la combinación de dos transformaciones de Lie, la eliminación de la paralaje [45] y la eliminación del perigeo [7], obteniéndose así un Hamiltoniano con un grado de libertad, que sólo depende de las variables (r, R) . Finalmente se integra el Hamiltoniano transformado mediante el método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky [13, 79]. Debe resaltarse que esta teoría analítica ha sido desarrollada hasta segundo orden en forma cerrada de la excentricidad, y es válida incluso para pequeños valores de excentricidad e inclinación, aunque no para la inclinación crítica. El número de términos de las expresiones matemáticas implicadas en este proceso ronda los 300 000.

A partir de esta teoría analítica se construye el propagador de órbitas PPKBJ6. Este programa comienza con la lectura de dos ficheros ASCII de entrada, que contienen los parámetros físicos y las condiciones iniciales (elementos keplerianos oscultrices) para el instante t_0 . A continuación, se modifican las condiciones iniciales mediante las transformaciones inversas de las eliminaciones de la paralaje y el perigeo. Seguidamente, PPKBJ6 proporciona los valores de las variables polares-nodales en el instante t mediante la aplicación del método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky. Por último, se aplican las transformaciones directas de las eliminaciones del perigeo y la paralaje, y se determinan los elementos keplerianos oscultrices y el vector de estado, los cuales se almacenan en ficheros separados. Con el fin de comprobar la precisión de los resultados, se evalúa la energía y se comparan sus valores con $\mathcal{H}(t_0)$ en cada instante t . La figura 2.27 describe el proceso de evaluación del propagador PPKBJ6.

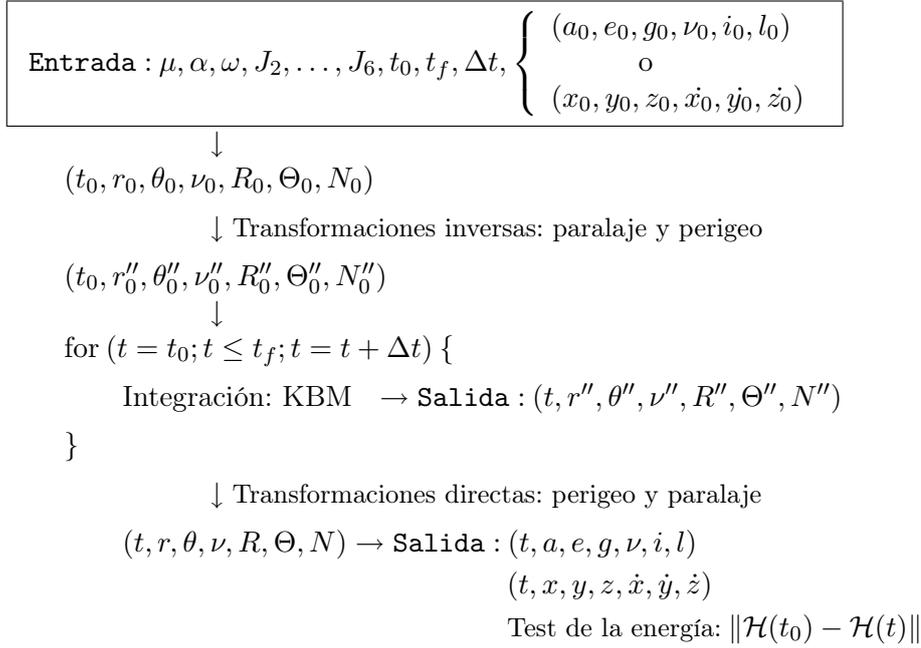


Figura 2.27: Proceso de evaluación del propagador PPKBJ6.

2.5.1.2. Modo de utilización

La interfaz de OPP consiste en un formulario web a través del cual se introducen los parámetros de entrada y se selecciona uno de los propagadores de la suite OPP disponibles. La tabla 2.3 muestra los símbolos, unidades y rangos válidos para las distintas variables consideradas por todos los OPPs, no obstante, la propia interfaz web comprueba las entradas e informa al usuario en caso de que los valores introducidos no sean válidos. Hasta el momento, los parámetros físicos y el modelo de geopotencial no se han hecho accesibles al usuario; el valor tomado para la constante gravitacional μ es $398\,600.47\text{ km}^3\text{s}^{-2}$, el radio ecuatorial de la Tierra α es $6\,378.137\text{ km}$, y el modelo de geopotencial empleado es el EGM96 [88].

Como ya se ha comentado, se pueden combinar diferentes aplicaciones que aparecen en *Astrody^{Web}Tools*. Así, en este ejemplo (figura 2.28), el usuario introduce a través del formulario web las condiciones iniciales de una órbita sun-synchronous cuasi-circular, que ha sido calculada mediante ZERGOF ($a = 7\,266.466\text{ km}$, $e = 0.00114$, $i = 99.0028^\circ$, $\omega = 90^\circ$) en el instante t_0 , y establece su propagación durante un periodo de un día. A continuación, solicita la ejecución del propagador PPKBJ6 mediante la pulsación del botón *Execute*.

La aplicación genera entonces, a partir de los datos recopilados en el for-

Tabla 2.3: Parámetros de entrada a cualquiera de los OPPs.

Símbolo	Elemento	Unidad	Rango
a	Semieje mayor	Kilómetro	$a > \alpha$
e	Excentricidad	–	$0 < e < 1$
ω	Argumento del perigeo	Grado	$0^\circ \leq \omega < 360^\circ$
Ω	Argumento del nodo	Grado	$0^\circ \leq \Omega < 360^\circ$
i	Inclinación	Grado	$0^\circ \leq i < 180^\circ$
ν	Anomalía media	Grado	$0^\circ \leq M < 360^\circ$
t_0	Tiempo inicial	Segundo	$t_0 \geq 0$
t_f	Tiempo final	Segundo	$t_f > t_0$
Δt	Paso	Segundo	$\Delta t \leq t_f - t_0$

OPP execution remote

Introduce the data (osculating Keplerian elements) of your satellite.

- a: semi-major axis
- e: eccentricity
- ω : argument of Perigee
- Ω : argument of the node
- i: inclination
- M: mean anomaly

Initial conditions

a (km):
e:
 ω (deg):
 Ω (deg):

i (deg):
M (deg):

Initial time (s):
Final time (s):
Step (s):

Model:

Figura 2.28: Ejemplo de cómo se muestra OPP tras introducir los datos.

mulario web, el input necesario para que el servidor de aplicaciones ejecute una instancia de PPKBJ6 y muestre los resultados al usuario. Como resultado de la ejecución se generan tres ficheros, que contienen los elementos orbitales, las coordenadas cartesianas y el test de energía. Simultáneamente se ejecuta otro programa en C para la integración numérica del problema original, a efectos de validación del cálculo analítico realizado. El integrador numérico utilizado corresponde a un método Runge-Kutta de orden elevado [49].

Cuando la propagación requiere de un tiempo de cálculo prolongado, lo

cual sucede cuando se seleccionan pasos pequeños, que implican un elevado número de evaluaciones, el entorno permite al usuario dejar ejecutando el proceso en segundo plano, de modo que pueda utilizar otras aplicaciones, o incluso cerrar su sesión y acceder más tarde a los resultados a través de un número de referencia.

Una vez han finalizado ambos cálculos, el analítico y el numérico para la validación, se realiza un tratamiento de los resultados y se lleva a cabo un estudio del error. Entre estos resultados se ofrecen los siguientes gráficos:

- A partir de las salidas del propagador:
 - Traza de la órbita.
 - Test de energía.
 - Elementos orbitales.
 - Comportamiento de largo periodo ($e \sin g, e \cos g$).
- A partir del estudio del error cuando el propagador es comparado con la integración numérica del mismo problema:
 - Errores en los elementos orbitales.
 - Errores en distancia, tangencial (along-track), normal (cross-track) y binormal (radial).

Finalmente, las salidas y gráficos son enviados al servidor web y mostrados al usuario, a la vez que se permite su descarga. La figura 2.29 muestra la información proporcionada por PPKBJ6 a través de la interfaz web para el caso de la órbita considerada. Como se puede comprobar, se facilitan en la misma ventana los enlaces a los gráficos de datos y errores, junto con los elementos orbitales generados por el OPP. Pulsando sobre el enlace *Download results*, el usuario puede descargar todas las salidas de la ejecución de la aplicación.

Las condiciones iniciales empleadas en este ejemplo corresponden a una órbita que casi repite la traza, como puede comprobarse en la figura 2.30, que analiza el comportamiento de la evolución de los términos de largo periodo mediante la representación de ($e \sin g, e \cos g$).

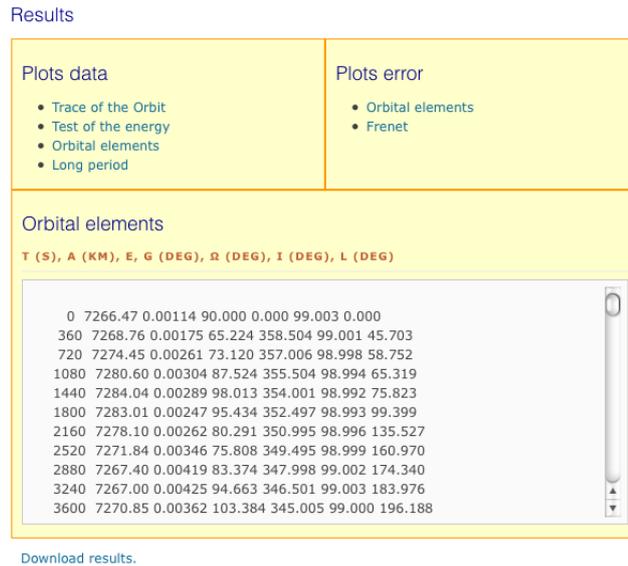


Figura 2.29: Ejemplo de salida para la órbita sun-synchronous cuasi-circular calculada mediante ZERGOF ($a = 7266.466 \text{ km}$, $e = 0.00114$, $i = 99.0028^\circ$, $\omega = 90^\circ$).

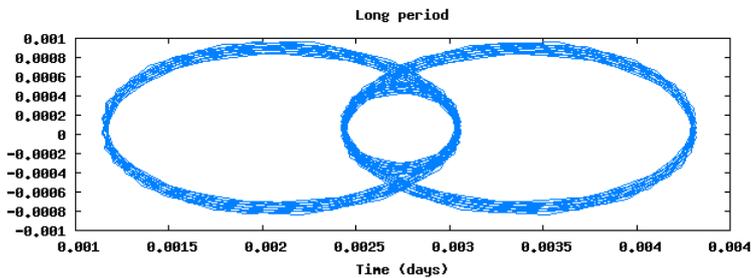


Figura 2.30: Comportamiento de la evolución de los términos de largo periodo obtenida a través del gráfico ($e \sin g$, $e \cos g$) para el caso de una órbita sun-synchronous cuasi-circular.

2.5.2. DSST Web

En este apartado se utiliza una órbita GTO (*Geosynchronous Transfer Orbit*) de baja inclinación con el fin de ilustrar las capacidades de DSST Web.

Antes de comenzar con el ejemplo, conviene mencionar algunas peculiaridades de la órbita utilizada, cuyos elementos keplerianos medios se muestran en la tabla 2.4. En primer lugar, el periodo es aproximadamente 12.5 horas, por lo que deben tenerse en cuenta las resonancias, aunque no cabría esperar una clásica resonancia profunda. En segundo lugar, debe considerarse como

caso de elevada excentricidad. En tercer lugar, la inclinación es muy baja, como podría suceder si el lugar de lanzamiento se encontrara cerca del Ecuador. En cuarto lugar, el nodo ascendente está prácticamente alineado con el eje x del sistema de referencia J2000. Por último, el perigeo queda cerca del plano ecuatorial.

Tabla 2.4: Elementos keplerianos medios.

Dato	Valor
Semieje mayor	27350.08190032765 km
Excentricidad	0.5236949314607066
Inclinación	5.999758529224882°
Argumento del perigeo	177.9874079699957°
Argumento del nodo	1.505656591611563°
Anomalía media	162.1064920392727°
Sistema de coordenadas	J2000
Época	21 de junio de 2011, 22:03:00.0

Step 1 / 3

FILL OUT THE FORM MANUALLY,
OR, IF YOU UPLOADED A FILE, PLEASE CHECK OUT THE FIELDS:

Initial Conditions

Day 21 / **Month** 6 / **Year** 2011 **Hour** 22 : **Minute** 3 : **Second** 0

Reference frame Mean of J2000 **Element type** Mean

Select the element set:

Kepler element set Equinoctial element set Cartesian element set

a (km): 27350.081 **e:** 0.5236 **i (deg):** 5.999

Ω (deg): 1.5056 **ω (deg):** 177.987 **M (deg):** 162.106

Figura 2.31: Condiciones iniciales en DSST Web para el caso de una órbita GTO (parte 1 de 3).

El modelo de fuerzas considerado en DSST incluye los armónicos zonales hasta el orden 15, términos tesorales resonantes, el efecto de J_2^2 y el producido por el Sol y la Luna. Las figuras 2.31, 2.32 y 2.33 muestran la introducción de los datos del ejemplo mencionado.

Step 2 / 3

Force Models

Central Body Gravity

Model: Grace Gravity Model GGM01

Degree: 15 Order: 15

Resonance

Max degree of resonance: 10 Max order of resonance: 10

Atmospheric drag

Atmospheric drag: Off Atmospheric density model: Jacchia-Roberts

F10.7: 65 Drag Coefficient: 2.2

Iszak J_2 height correction: Off

Solar Radiation Pressure

Solar radiation pressure: Off

Spacecraft Characteristics

Spacecraft mass (kg): 0.0 Spacecraft area (km²): 0.0

Third Body Gravity

Third body averaging: Analytical averaging

Solid Earth Tide Indicator

Effects: No tidal effects

Next

Figura 2.32: Condiciones iniciales en DSST Web para el caso de una órbita GTO (parte 2 de 3).

La figura 2.34 muestra los resultados obtenidos por la aplicación DSST web. La figura 2.35 muestra la evolución temporal de la excentricidad, inclinación y argumento del perigeo durante un horizonte temporal de 20 años calculados mediante DSST Web.

Step 3 / 3

Integration

Frame
Mean of J2000

Stepsize (secs): 43200.0

Analytical Averaging

Zonal harmonic **J₂² efect included**

On On

Short-periodic model used by the semianalytic orbit generator

Short-periodic model

Mean elements only

Output parameters

Frame

Mean of J2000

Save file

Figura 2.33: Condiciones iniciales en DSST Web para el caso de una órbita GTO (parte 3 de 3).

Draper Semianalytical Satellite Theory (DSST) Standalone -

Initial conditions

Start time (s):
Final time (s):

Step (s):

Results

Plots data

- Orbital elements
- Equinoctial elements

SPGOUT

```

GTDS AVERAGED EQUATIONS OF MOTION OPTIONS                PAGE 1
VOP AVERAGING (DRAPER SEMI-ANALYTICAL) SATELLITE THEORY OPTIONS
VARIABLE  VALUE      DESCRIPTION
Primary Computational Options for Partial Derivatives
IAINAL    1          Compute element rate partials analytically? (0 = no, 1 = A-matrix only)
IDIFF     0          Compute element rate partials with finite diffs? (2 = D-matrix, 3 = Both A & D )
IQDRT     0          Compute element rate partials by numerical quad? (0 = no
KVRFLG    0          Compute Short-Periodic partials? (0 = no, 1 = B1, 2 = B1 & B4, 3 = B4)

GM EARTH = 398600.4415

RADIUS OF THE EARTH = 6378.136300

J2 = -0.10826356665511E-02

```

[Download results.](#)

Figura 2.34: Resultado de la ejecución de DSST Web para el caso de una órbita GTO.

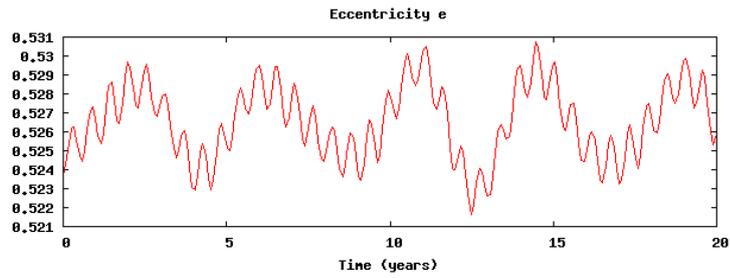
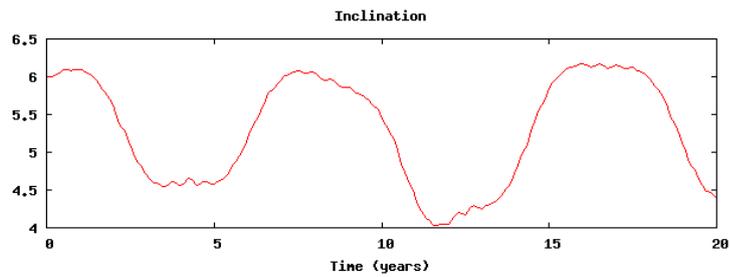
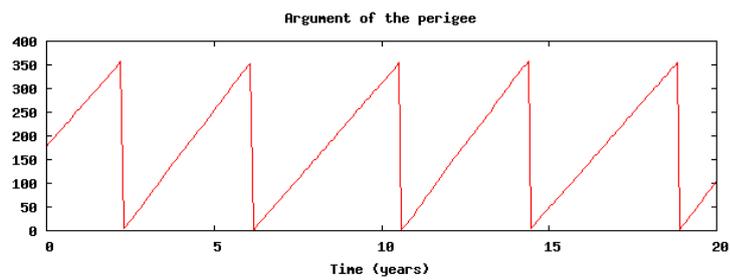
(a) e .(b) i .(c) ω .

Figura 2.35: Evolución temporal de la excentricidad, inclinación y argumento del perigeo en DSST Web.

*Antes pensábamos que nuestro futuro
estaba en las estrellas. Ahora
sabemos que está en nuestros genes.*



JAMES WATSON

Capítulo 3

De las estrellas al conocimiento del genoma humano

Resumen

En general, la decodificación del mapa genético del hombre es un hito comparable a la llegada del hombre a la Luna o al hallazgo de la energía atómica. El objetivo de este capítulo es poder mostrar cómo la aplicación del modelo *Astrody^{Web}Tools* al campo de la Bioinformática no sólo ha sido posible, de hecho existen numerosos ejemplos de uso de aplicaciones bioinformáticas como servicios Web, sino que se ha convertido en un proyecto totalmente diferenciador respecto de lo ya existente en este campo.

3.1. Introducción

El genoma humano está constituido por el conjunto de todos los cromosomas presentes en el cuerpo humano, esto es, todo su DNA (ácido desoxirribonucleico), que integra los genes que contienen la información para la elaboración de las proteínas que el organismo requiere, las cuales determinan el aspecto físico, el funcionamiento de los órganos, el metabolismo, así como la resistencia a infecciones y otras enfermedades.

En otras palabras, es el código que hace que seamos como somos. Un gen es la unidad física y funcional de la herencia. Es una secuencia de nucleótidos ordenada y ubicada en una posición especial de un cromosoma. Un gen contiene el código específico de un producto funcional.

Muchas de las enfermedades tienen una componente genética, tanto las hereditarias como las resultantes de las respuestas corporales al medio ambiente, de ahí la importancia de conocer el genoma al completo.

El Proyecto Genoma Humano ha sido una investigación internacional que ha buscado seleccionar un modelo de organismo humano por medio del

mapeo genético de la secuencia de su DNA, localizando los genes en cada uno de los veintitrés pares de cromosomas del ser humano. Se inició oficialmente en 1990 como un programa de quince años con el que se pretendía identificar los casi 40 000 genes que codifican la información necesaria para construir y mantener la vida. Los rápidos avances tecnológicos han acelerado los tiempos y ya se dispone de un mapeo del genoma casi completo. La información contenida en los genes ha sido decodificada y permite a la Ciencia conocer, mediante tests genéticos, qué enfermedades podría desarrollar una persona a lo largo de su vida.

Durante los últimos años estamos asistiendo a un importante avance en el conocimiento del genoma humano y su papel en la génesis y el desarrollo de las enfermedades. Seremos capaces de mejorar nuestro conocimiento acerca de los riesgos de sufrir enfermedades futuras en base al análisis del DNA.

Tras distintos intentos por descifrar su base genética, actualmente la investigación en este campo se centra, por un lado, en los estudios de asociación de genoma completo (Genome-Wide Association Studies o GWAS [16]), que permiten rastrear varios miles o millones de variaciones comunes del genoma por individuo en forma de SNPs (polimorfismos de nucleótido único), indels, etcétera, con el fin de establecer asociaciones entre estas variantes frecuentes y fenotipos concretos, y por otro, en estudios de familias y ligamiento o, más recientemente, la secuenciación genómica.

La secuenciación genómica identifica todas las variaciones presentes en el genoma del individuo, permitiendo relacionarlas con posibles enfermedades sin necesidad de hipótesis previas o muestras amplias. El problema de esta técnica ha sido el de sus limitaciones por coste y duración, lo que había restringido su uso a estudios aislados en los que se secuenciaban áreas concretas y pequeñas del genoma. Ahora, el desarrollo de las técnicas de secuenciación masiva paralela, o de nueva generación, establecen un salto de varios órdenes de magnitud en cuanto a la longitud de los fragmentos secuenciados, permitiendo la secuenciación del DNA a gran velocidad y con un coste progresivamente menor [66, 98].

Como el coste actual de la secuenciación de un genoma humano completo todavía es elevado, se han planteado estrategias para minimizarlo sin perder eficiencia. Ng et al. [104] publicaron en 2009 el primer estudio en el que secuenciaban exclusivamente el exoma (parte codificante del genoma), unas 30 megabases (el 1% del total del genoma), ya que la inmensa mayoría de las mutaciones relacionadas con las enfermedades conocidas actualmente se encuentran en esta parte codificante. Este acercamiento supone un importante ahorro de tiempo y, principalmente, de coste.

De forma simplificada, la secuenciación del exoma completo consiste en identificar, seleccionar y enriquecer las secuencias que corresponden al exoma, desechando el resto del material genético, y después secuenciarlas con las técnicas de segunda generación.

3.2. *Bioinfo^{Web}_{Tools}*: secuenciación masiva paralela

Los proyectos para el estudio de genomas parten de una fase de secuenciación en la cual se generan, en el laboratorio, lo que podría denominarse datos brutos, originados por un ultrasecuenciador, que son los datos sin analizar. Estos datos son secuencias de DNA o RNA. Estas moléculas poseen un papel fundamental en todos los organismos, y se espera que el entendimiento de este tipo de código se traduzca en una revolución en varias áreas como la medicina, la biología y la agricultura, entre otras. El gran desafío de los investigadores consiste en analizar estas secuencias y obtener información biológicamente relevante. Estos análisis requieren del uso de diversas herramientas bioinformáticas, programas y grandes volúmenes de información almacenada en bases de datos con las que comparar los resultados.

Es en este contexto en el que puede decirse que el modelo *Astrody^{Web}_{Tools}* ha sido aplicado con éxito, creándose *Bioinfo^{Web}_{Tools}* [93], un proyecto de colaboración entre el Grupo de Computación Científica (GRUCACI) y el Centro de Investigación Biomédica de La Rioja (CIBIR). Este proyecto consiste en la automatización de los servicios de análisis bioinformáticos que se llevan a cabo en la plataforma de genómica del CIBIR. No se trata de un proyecto cerrado sino que se continúan incorporando nuevos modelos de análisis y sus variantes. Al automatizar sus procesos se consigue un ahorro en los tiempos de ejecución del análisis, así como también se evitan los errores humanos en la tediosa ejecución por consola tipo UNIX de cada una de las aplicaciones.

Dependiendo del análisis bioinformático que se realice (análisis mRNA, RNA total, DNA exoma, etcétera) intervienen unas herramientas u otras y el proceso varía. Manualmente puede ser largo e incluso no estar exento de errores. Si a ello se une que el análisis se realiza para cada muestra, para el caso de una plataforma como Illumina/Solexa, en la que se pueden analizar hasta 96 muestras por canal para cada uno de los 8 canales, el proceso puede ser bastante largo. Y, si además se tiene en cuenta que no todas estas muestras tienen por qué requerir el mismo tipo de análisis, se complica un poco más la labor del bioinformático a la hora de manejarlas, teniendo que cambiar de protocolo de análisis en función de la muestra.

Bioinfo^{Web}_{Tools} consiste en un sistema web que permite, a partir de la información suministrada a través de una interfaz web, generar los scripts necesarios para la ejecución interna de las aplicaciones asociadas a cada análisis. De este modo, un bioinformático sólo necesita intervenir al principio del proceso, para facilitar los datos, y al final, para recoger los resultados. Por otro lado, no sólo se trata de una aplicación que resulta muy útil para la gestión de los centros que dispongan de un ultrasecuenciador, sino que, como se publicará en breve, constituirá un servicio externalizado a disposición del investigador, en el que él mismo, sin necesidad de conocimientos bioinformáticos, podrá llevar a cabo sus análisis (a partir de los datos en un

formato internacional) y repetirlos tantas veces como desee.

Actualmente se pueden encontrar en Internet muchas plataformas especializadas en el área de Bioinformática que proveen, a través de sus páginas, servicios para el trabajo con secuencias. Se podrían destacar algunas bases de datos como la del Centro Nacional para Información Biotecnológica, NCBI (de sus siglas en inglés National Center for Biotechnology Information), disponible en <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>, Expasy (de sus siglas en inglés, Expert Protein Analysis System), disponible en <http://expasy.org/>, y la del Instituto Europeo de Bioinformática, EBI (del inglés European Bioinformatics Institute) en <http://www.ebi.ac.uk>. EMBOSS (<http://emboss.sourceforge.net/>), por ejemplo, contiene herramientas muy útiles para la edición de secuencias, tales como `pasteseq`, que permite copiar una secuencia dentro de otra, `extractseq` o `cutseq` para extraer o eliminar regiones. Galaxy (<https://galaxyproject.org/>), por ejemplo, es una colección de herramientas bioinformáticas destinadas a la conversión y manipulación de datos moleculares, análisis estadísticos, análisis de datos de secuenciación de nueva generación, etcétera.

Existen muchas otras que han sido desarrolladas desde una perspectiva meramente computacional, dada la necesidad principal de la implementación de algoritmos para resolver problemas específicos normalmente ligados a métodos de análisis, donde la ingeniería de software ha tenido poca relevancia [110].

Lo que diferencia a este proyecto es que, aunque existen portales web que hacen uso de interfaces para ejecutar herramientas bioinformáticas, obviando la interfaz de comandos, son aplicaciones para ser usadas de manera independiente. En ellas el usuario envía el fichero de datos y ejecuta una sola aplicación, recoge los resultados y los vuelve a enviar para ser usados por otra aplicación que puede estar alojada o no en el mismo portal web.

En $Bioinfo_{Tools}^{Web}$ se realiza el análisis bioinformático completo para cada muestra, ejecutándose de manera automática y totalmente transparente para el usuario. Para el caso de la interconexión con un ultrasecuenciador, se llevan a cabo de manera automática todos los análisis de todas las muestras, permitiendo un óptimo aprovechamiento de todos los recursos computacionales.

Por otro lado, al igual que en $Astrody_{Tools}^{Web}$, las interfaces han sido diseñadas para que sean lo más cercanas posible al investigador, el cual no tiene por qué conocer los términos en los que hay que comunicarse con cada aplicación, ya que muchas de ellas requieren de un alto grado de conocimientos para su correcta ejecución.

3.3. Ejemplo de análisis bioinformático: análisis de DNA exoma

Antes de comenzar a describir el protocolo de análisis bioinformático para DNA exoma, se recoge brevemente el proceso previo:

1. Extracción del DNA mediante un kit comercial.
2. Comprobación de la pureza y concentración de la muestra. Se realiza entonces un análisis en un espectrofotómetro. Igualmente se lleva a cabo una electroforesis, que debe reflejar un alto peso molecular, indicativo de la calidad de la muestra.
3. Finalmente se prepara la muestra [98, 151] para su secuenciación con los kits necesarios (figura 3.1), dependiendo del modelo de ultrasecuenciador y del tipo de análisis que vaya a realizarse. Una vez que el ultrasecuenciador termina el proceso, que puede durar días o hasta una semana, se obtienen unos ficheros denominados OLB con los cuales se procede a realizar el tratamiento bioinformático.

En este momento comienza la fase de análisis bioinformático. Para ilustrar esta fase se muestra un ejemplo de un análisis de exoma humano, y se citan brevemente las aplicaciones implicadas, su funcionalidad y el momento en que son utilizadas.

De manera ilustrativa, la figura 3.2 recoge el proceso de análisis de exoma que se describe a continuación:

1. El primer paso es la conversión de los ficheros de extensión `.olb`, procedentes del ultrasecuenciador, a un formato internacional que acepten las herramientas bioinformáticas. En nuestro caso son transformados a formato `.fastq`, aunque existen otros formatos también estándar como `.fq`, `.sra`, `.fa`, etcétera. El propio ultrasecuenciador incorpora rutinas programadas en Perl para llevar a cabo esta conversión.
2. La calidad de los datos se puede comprobar con el programa FastQC (<http://www.bioinformatics.babraham.ac.uk/projects/>), el cual describe el tipo de archivo, codificación, número total de secuencias procesadas, secuencias filtradas, longitud de las secuencias, porcentaje de GC (áreas ricas de codificación), calidad de la secuencia por base, distribución de la longitud de secuencias, etcétera.
3. La comprobación de la cobertura se realiza con el programa Bedtools (<http://bedtools.readthedocs.org>), y para representarla gráficamente se utilizan programas como el paquete estadístico R (<http://cran.r-project.org/>).

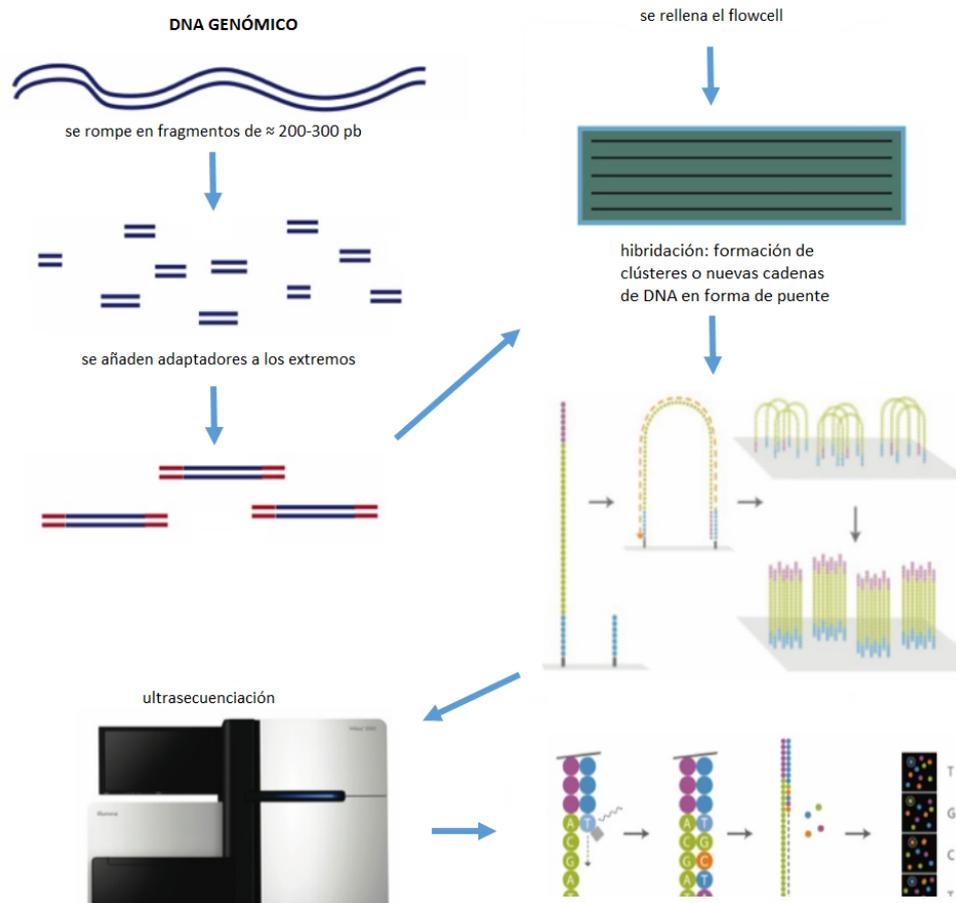


Figura 3.1: Esquema del proceso de análisis de ultrasecuenciación.

- El siguiente paso consiste en la alineación de las lecturas producidas por el secuenciador contra un genoma de referencia para obtener la secuencia de DNA original. Existen varios algoritmos de alineación (MAQ, BWA y Bowtie)¹. Para un ejemplo de análisis de exoma se suele utilizar el algoritmo BWA (*Burrows-Wheeler Aligner*) implementado en el programa BWA. El genoma de referencia se encuentra en la web del UCSC Genome Browser (genome.ucsc.edu) y se indexa y compila con la sentencia `bwa index -a bwtsw -p hg38/hg38 hg38/hg38.fa` en Linux.
- El alineamiento con BWA genera un archivo en formato `.sai`. Este fichero debe ser convertido a formato `.sam` (*Sequence Alignment/Map*).
- Utilizando el programa Picard (<http://picard.sourceforge.net>), se

¹MAQ (sourceforge.net/projects/maq), BWA (<http://bio-bwa.sourceforge.net/>) y Bowtie(<http://bowtie-bio.sourceforge.net/>).

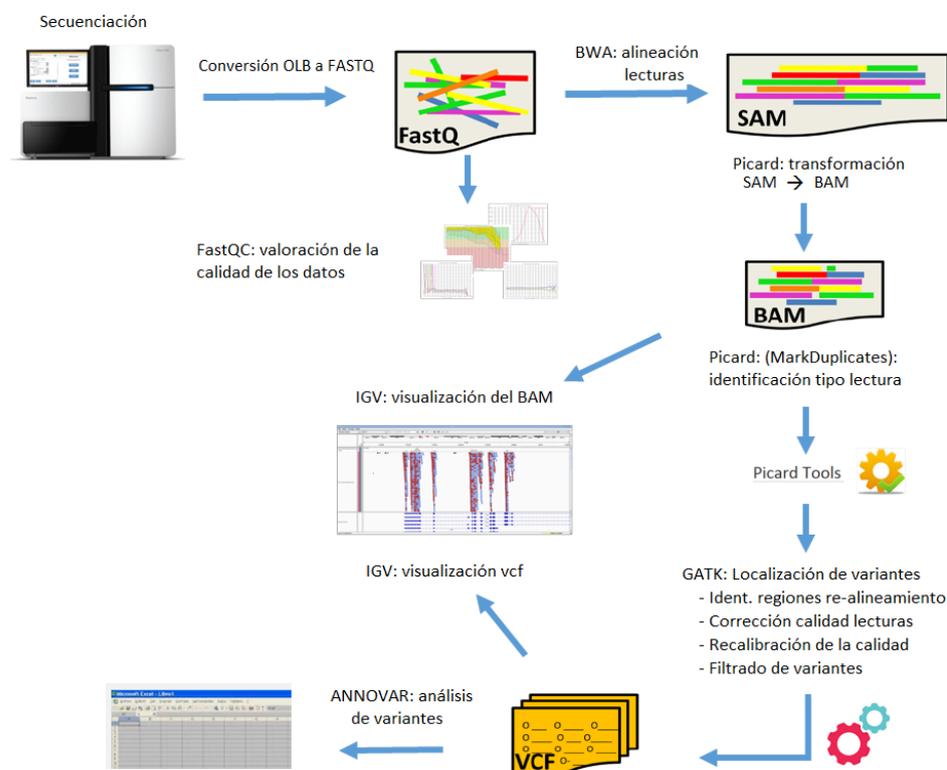


Figura 3.2: Proceso de análisis de exoma.

transforma el `.sam` a un formato binario denominado `.bam`. Este formato se está convirtiendo en un estándar en los estudios de secuenciación, siendo el más utilizado por la mayoría de las herramientas de análisis bioinformático.

7. Seguidamente la herramienta MarkDuplicates del programa Picard localizará las secuencias duplicadas. Los ficheros resultantes `.marked.bam` y `metrics` contienen todas las lecturas e identifican de qué tipo son (lecturas no alineadas –marcadas como *unmapped*–, lecturas duplicadas –marcadas como *duplicates*– y lecturas *non-PF* –aquellas que no pasan el filtro de calidad– [89]).
8. Comienza ahora la identificación de todas las variaciones presentes en cada exoma. Para ello se emplea la aplicación de software libre Genome Analysis Tool Kit o GATK (desarrollado por el Broad Institute, Cambridge, <http://www.broadinstitute.org/gatk/>). El programa realiza un mapeo inicial utilizando la herramienta *RealignerTargetCreator* para identificar regiones que requieren un re-alineamiento, normalmen-

te debido a la presencia de indels que no existen en el genoma de referencia. El archivo resultante suele ser nombrado `.bam.list`.

9. Con el mismo GATK se utiliza seguidamente la herramienta *IndelRealigner* que permite realinear las lecturas alrededor de estos indels, lo que minimiza el riesgo de falsos positivos al buscar después las variantes. Se generan así los ficheros `.marked.realigned.bam`.
10. Se utiliza más tarde *TableRecalibration* para recalibrar las puntuaciones asignadas por los secuenciadores. Se obtiene un fichero en formato `.csv` que contiene la lista de variantes encontradas, la tabla de calidades cuantificadas, la tabla de recalibración por grupo de lectura y por puntuación de calidad.
11. Las variaciones encontradas se extraen del archivo anterior utilizando la herramienta Unified Genotyper. Para ello se utiliza un archivo de referencia con el que se compara. Este fichero está disponible en las bases de datos habituales (NCBI) y suele ser un dbSNP que varía según la versión. En este momento está activa la versión 135 para humano. Dará lugar, finalmente, a un archivo `.vcf` (*Variant Call Format*), que muestra las variantes localizadas y la puntuación de calidad de cada una de ellas. Se suele llevar a cabo una comparativa contra bases de datos que codifican estas variantes como verdaderas o falsos positivos, con el objetivo de permitir al investigador que identifique si la variación encontrada obedece a una mutación auténtica o no es más que un error de secuenciación o de procesamiento de los datos. Para afinar aún más en este proceso se utilizan las herramientas *VariantRecalibration* y *ApplyRecalibration*, y se obtiene un archivo `snp.vcf recalibrated` donde se muestra el score de las variantes encontradas y otras características de interés.
12. Finalmente se realiza un filtrado de las variantes, eliminando lo que se considera que son falsos positivos (posiblemente defectos de la técnica) y obteniendo un archivo `.vcf` definitivo, que incluye las variantes de interés junto con información de cada una de ellas.

Al comparar cada exoma individual con un genoma de referencia se encuentran entre 15 000 y 25 000 variaciones. Muchas de ellas son SNPs sin significado patológico. Otras variaciones (SNPs no frecuentes, variaciones estructurales, inserciones o deleciones) son de significado incierto. Determinar cuáles son las responsables de un fenotipo concreto representa una tarea compleja.

Para facilitar la anotación de variantes se utiliza también el programa ANNOVAR (<http://www.openbioinformatics.org/annovar/>). El archivo resultante se puede leer en formato excel e incluye los siguientes datos, entre

otros, de cada variación encontrada: localización de la variante en las diferentes partes del gen, función del exón, cambio de aminoácido, puntuación de predicción de efecto de la variante en la función de la proteína que codifica, duplicaciones de segmentos, frecuencia en la que el alelo aparece en la base de datos de los 1000 genomas, referencia dbSNP y puntuaciones de predicción (según programas como PolyPhen y AVSIFT). Otros programas de análisis de variantes pueden encontrarse en la plataforma KGGSeq [90].

En *BioinfoTools^{Web}* se ha integrado también la herramienta ANNOVAR y se ha perfeccionado un script que contempla otras bases de datos de referencia más actualizadas, diseñando y generando un .csv adaptado a las necesidades del usuario.

Para facilitar todavía más la tarea, normalmente el investigador sólo necesita conocer las variantes encontradas en algunos genes relacionados con una o varias enfermedades; es por ello que, a través de la interfaz web, se le solicitan aquellos genes o enfermedades que pueden ser de su interés para poder filtrar así la información contenida en el fichero .csv.

Para finalizar, se suele utilizar el programa IGV (*Integrative Genomics Viewer*) [121], que muestra de forma gráfica los datos obtenidos y permite diferenciar con mayor facilidad las verdaderas variaciones frente a los artefactos. IGV también puede ser utilizado para la comparación entre varias muestras.

3.3.1. Protocolo de análisis de exoma

En este apartado se describe el protocolo completo para el análisis de DNA exoma, incluyendo los comandos a ejecutar [62] para las distintas herramientas bioinformáticas.

Es importante resaltar que *BioinfoTools^{Web}* verifica y valida las entradas y salidas a lo largo de todo el proceso para asegurar que el resultado obtenido cumple con los criterios de calidad de ejecución exigidos.

```
#Script para un analisis de exoma en una muestra de tipo
#paired-end en formato .fastq.

#1. Analisis de la calidad del fichero fastq.
#Programa FastQC
./fastqc

#Observar la cobertura con el programa bedtools.
PATH=~/Public/bedtools/bin:$PATH
./bedtools/bin/coverageBed -abam bedtools/file.bam -b
bedtools/exome.bed -d > bedtools/out.txt

#Cortar las columnas 3-7 y quitar los 3 primeros caracteres
(chr) del fichero out1.txt.
```

```
cut -f 1-2,8 bedtools/out.txt > bedtools/out1.txt
cat bedtools/out1.txt | sed 's/^...//' > bedtools/out2.txt

#Selección de muestra de datos para gráficos tipo Manhattan.
shuf bedtools/out2.txt > bedtools/out3.txt
head -n 40000 bedtools/out3.txt > bedtools/out4.txt

#2. Alinear con genoma de referencia.
#Abrir una Shell de Linux (.sh). Incluir en el path los distintos
#programas.
PATH=~/.Public/gatk:$PATH
PATH=~/.Public/picard:$PATH
PATH=~/.Public/bwa:$PATH
PATH=~/.Public/annovar:$PATH

#Compilar e indexar el genoma de referencia. Bajarlo de la web.
bwa index -a bwtsv -p hg38/hg38 hg38/hg38.fa

#Alinear el archivo .fastq con el genoma de referencia. Da como
#resultado un archivo .sai.
bwa aln -t 4 -f 1/1_R1.sai hg38/hg38 1/1_R1.fastq.gz

#Quitar -I si no es Illumina 1.3. 1/1.sai es la ruta y archivo
#de salida; 1/1_R1.fastq.gz el de entrada. Hacemos lo mismo
#con el segundo archivo (mate pair ends).
bwa aln -t 4 -f 1/1_R1.sai hg38/hg38 1/1_R1.fastq.gz

#Transformar los archivos .sai en un único archivo .sam
bwa sampe -f 1/1.sam -
r"@RG\tID:1\tLB:1\tSM:1\tPL:ILLUMINA" hg38/hg38
1/1_R1.sai 1/1_R2.sai 1/1_R1.fastq.gz 1/1_R2.fastq.gz

#Transformar el archivo .sam en .bam. #java -Xmx16G -jar. es
#una orden que amplía la memoria RAM que puede utilizar java,
#haciendo que el programa pueda ir más rápido. Se utiliza LENIENT
#para que reporte los errores y que el programa no se pare
#cuando los encuentre.
java -Xmx16G -jar picard/SortSam.jar \SO=coordinate
\INPUT=1/1.sam \OUTPUT=1/1.bam
\VALIDATION_STRINGENCY=LENIENT \CREATE_INDEX=true
#Marcar duplicados. Los archivos .marked.bam y metrics resultantes
#contienen todas las lecturas e identifican de que tipo son.
java -Xmx16G -jar picard/MarkDuplicates.jar \INPUT=1/1.bam
\OUTPUT=1/1.marked.bam \METRICS_FILE=1/metrics
\CREATE_INDEX=true \VALIDATION_STRINGENCY=LENIENT

#3. Localización de variantes.
#Se identifican regiones que requieren un re-alineamiento,
#habitualmente por presencia de indels que no existen en el genoma
```

```
#de referencia. El archivo resultante lo denominamos .bam.list.
java -Xmx16G -jar gatk/GenomeAnalysisTK.jar \-T
RealignerTargetCreator \-R hg38/hg38.fa \-o 1/1.bam.list \-
I 1/1.marked.bam
#El programa re-alinea las lecturas alrededor de estos indels, lo
#que minimiza el riesgo de falsos positivos al buscar posteriormente
#variantes.
java -Xmx16G -jar gatk/GenomeAnalysisTK.jar \-I
1/1.marked.bam \-R hg38/hg38.fa \-T IndelRealigner \-
targetIntervals 1/1.bam.list \-o 1/1.marked.realigned.bam
#Comprobacion de que la informacion esta sincronizada entre cada
#lectura y su pareada (mate pair ends).
java -Xmx16G -jar picard/FixMateInformation.jar
\INPUT=1/1.marked.realigned.bam
\OUTPUT=1/1.marked.realigned.fixed.bam \SO=coordinate
\VALIDATION_STRINGENCY=LENIENT \CREATE_INDEX=true

#Correccion de la calidad de las lecturas. Generacion de la tabla de
#covariantes. Recoge como comparador la base de datos de SNPs
#(dbSNP), la version 135, que es la compatible con el hg38.
java -Xmx16G -jar gatk/GenomeAnalysisTK.jar -I
1/1.marked.realigned.fixed.bam -R hg38/hg38.fa -T
CountCovariates -cov ReadGroupCovariate -cov
QualityScoreCovariate -cov CycleCovariate -cov DinucCovariate -
recalFile 1/1.recal_data.csv -knownSites:dbsnp,VCF
dbsnp144.hg38.vcf
#Correccion de la calidad de las lecturas. Recalibracion de las
#puntuaciones.
java -Xmx16G -jar gatk/GenomeAnalysisTK.jar \-l INFO \-R
hg38/hg38.fa \-I 1/1.marked.realigned.fixed.bam \-T
TableRecalibration \--out
1/1.marked.realigned.fixed.recal.bam \-recalFile
1/1.recal_data.csv
#Localizacion de las variaciones presentes en la muestra (SNPs e
#indels).
java -Xmx16G -jar gatk/GenomeAnalysisTK.jar -glm BOTH -R
hg38/hg38.fa -T UnifiedGenotyper -I
1/1.marked.realigned.fixed.recal.bam -D dbsnp135.hg38.vcf -o
1/1.snps.vcf -metrics 1/snps.metrics -stand_call_conf 50.0 -
stand_emit_conf 10.0 -dcov 1000 \-A DepthOfCoverage -A
AlleleBalance -L exome.bed

#Recalibracion de la puntuacion de la calidad de las variantes.
java -Xmx16G -jar gatk/GenomeAnalysisTK.jar \-T
VariantRecalibrator \-R hg38/hg38.fa \-input 1/1.snps.vcf \-
resource:hapmap,known=false,training=true,truth=true,prior=15.0
hapmap.vcf \-
resource:omni,known=false,training=true,truth=false,prior=12.0
1000G_omni2.5.hg38.sites.vcf \-
```

```

resource:dbsnp,known=true,training=false,truth=false,prior=8.0
dbsnp135.hg38.vcf \-an QD -an HaplotypeScore -an MQRankSum -an
ReadPosRankSum -an FS -an MQ \-recalFile 13/13M.recal \-
tranchesFile 13/13M.tranches \-rscriptFile 13/13M.plots.R \-
maxGaussians 4 --percentBadVariants 0.05

#Se aplica la recalibracion.
java -Xmx16G -jar gatk/GenomeAnalysisTK.jar \-T
ApplyRecalibration \-R hg38/hg38.fa \-input 13/13.snps.vcf \-
ts_filter_level 99.0 \-tranchesFile 1/1.tranches \-recalFile
1/1.recal \-o 1/1.snp.vcf.recalibrated

#Se filtran las variables encontradas segun los parametros
#seleccionados.
java -Xmx16G -jar gatk/GenomeAnalysisTK.jar \-R hg38/hg38.fa
\-T VariantFiltration \-variant 1/1.snp.vcf.recalibrated \-o
1/1.snp.recalibrated.filtered.vcf \-clusterWindowSize 10 \-
filterExpression "MQO >= 4 && ((MQO / (1.0 * DP)) > 0.1)" \-
filterName "HARD_TO_VALIDATE" \-filterExpression "DP < 5 " \-
filterName "LowCoverage" \-filterExpression "QUAL < 30.0 " \-
filterName "VeryLowQual" \-filterExpression "QUAL > 30.0 &&
QUAL < 50.0 " \-filterName "LowQual" \-filterExpression "QD <
1.5 " \-filterName "LowQD" \-filterExpression "SB > -10.0 " \-
-filterName "StrandBias"

#Abrir ANNOVAR y convertir el formato.
perl annovar/convert2annovar.pl --format vcf4 --includeinfo
1/1.snp.recalibrated.filtered.vcf > 1/1.snp.annovar
cd annovar
mkdir 1
cd ..
cp 1/1.snp.annovar annovar/1/
cd annovar
cd ..

#Incluye las puntuaciones de frecuencias en bases de datos.
./summarize_annovar.pl --buildver hg38 1/1.snp.annovar --
verdb SNP 137 --ver1000g 1000g2012apr --veresp 6500 ./humandb -
outfile 1/1.snps -remove -alltranscript
#Para pasar de un formato delimitado por comas a un formato tabulado.
#Transforma en txt.
perl -pe 'while (s/(("[^"]+),\1<COMMA>/g) Dif; s/"//g;
s/,/\t/g; s/<COMMA>/,/g' < 1/1.snps.exome_summary.csv >
1/1.exome_summary.txt

```

Las figuras 3.3 y 3.4 muestran las interfaces de creación/edición y la de visualización para el tipo de análisis ejemplificado en este Capítulo.

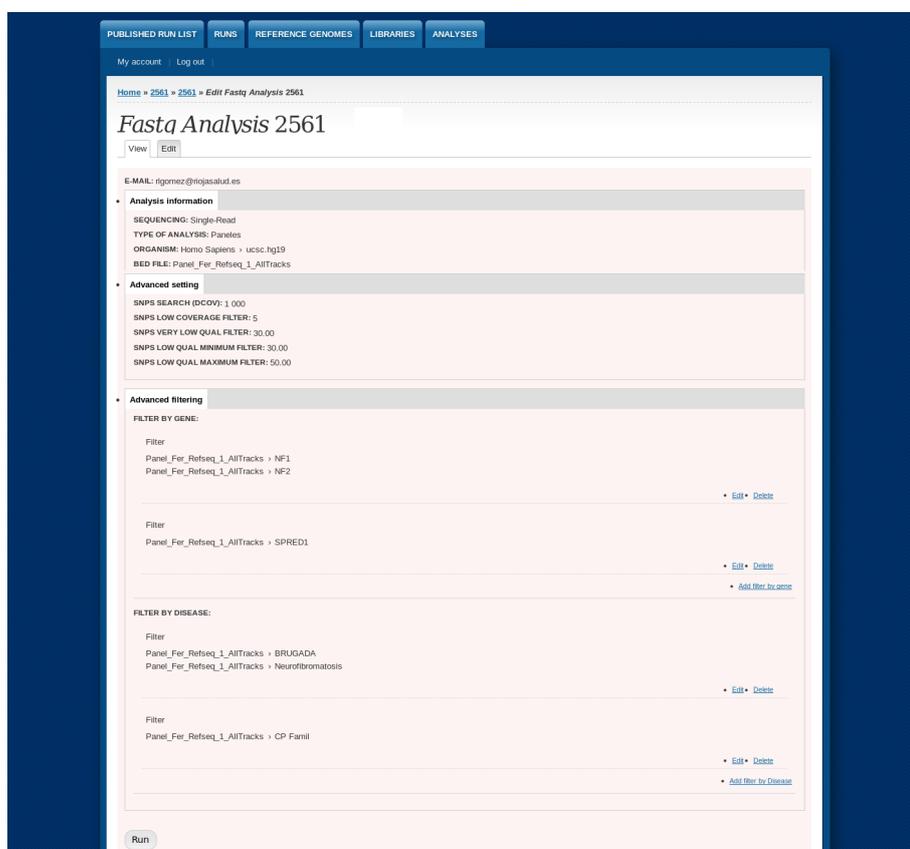


Figura 3.3: Interfaz de creación/edición para un análisis de DNA exoma.

3.4. Limitaciones en la secuenciación de exoma

Es deseo de este doctorando finalizar este Capítulo argumentando que la secuenciación masiva no puede ser vista como la panacea. Para aplicar la secuenciación de exoma completo en la búsqueda de mutaciones potencialmente patógenas hay que aceptar como ciertas las asunciones que se describen en [104]. En primer lugar, para encontrar una mutación, debe encontrarse en áreas codificantes del genoma, es decir, si estuviera en una área intrónica no sería posible encontrarla, ya que no la estaríamos secuenciando. Se sabe que hay áreas reguladoras, cuyas mutaciones podrían estar relacionadas con enfermedades, que se pueden encontrar a muchas kilobases de distancia del gen, fuera de las áreas exómicas [10, 122]. Es más, hay que tener en cuenta que los loci que constituyen el exoma no están completamente bien definidos. Habitualmente se utilizaban para crear las bibliotecas todas las secuencias incluidas en la base de datos CCDS (*Consensus Coding Sequence*). Posteriormente se comprobó que no era completa, y más recientemente se están utilizando otras bases que incluyen más fragmentos, como RefSeq, Ensembl,

Figura 3.4: Interfaz de visualización para un análisis de DNA exoma.

GENCODE o los genes de la UCSC browser [31, 54, 81, 120].

Otras limitaciones están relacionadas con las propias técnicas empleadas. La captura de las áreas de interés, independientemente de la técnica que se aplique, no es perfecta, quedando aproximadamente un 8% de secuencias exómicas sin capturar.

Algunas mutaciones, como las variaciones por número de triplete, no se identifican, y con otras, como las variaciones de número de copia, pueden presentarse problemas [9, 144]. Por otro lado, la propia secuenciación puede introducir errores de lectura, especialmente en áreas complicadas o de baja cobertura, lo que podría dificultar el hallazgo de resultados.

Finalmente, también se pueden cometer errores debidos al elevado número de variantes encontradas, asignando la enfermedad a una variante no

causante, o filtrando en exceso y obviando la mutación causal.

Siendo conscientes de todo ello, las nuevas herramientas de estudio del genoma (estudios de secuenciación de genoma completo, GWAS, modelos animales, estudio directo del mRNA en los tejidos, estudios de expresión de proteínas) van permitiendo ampliar el conocimiento sobre la compleja regulación de la expresión de los genes, lo que permitirá en el futuro ser capaces de utilizar la información genética de forma eficiente.

*En el punto en el que se detiene la Ciencia
empieza la imaginación*



HEYENDHAL

Capítulo 4

Resultados

En este capítulo se recogen los resultados más importantes alcanzados en la presente Tesis Doctoral. Todos ellos están relacionados con la aplicación de técnicas de computación científica al ámbito de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica. Inicialmente se presentan dos propagadores de órbitas que implementan la misma solución analítica del problema zonal del satélite artificial (artículo primero de esta Tesis Doctoral). Esta teoría analítica combina técnicas de perturbaciones basadas en transformaciones de Lie junto con el método generalizado de promedios. El primer propagador es completamente analítico, mientras que el segundo calcula las transformaciones directa e inversa de forma numérica. A continuación se revisa el método que es utilizado para la construcción de las transformaciones de Lie, el método de Lie-Deprit (artículo segundo), el cual presenta una cierta arbitrariedad que, utilizada de forma adecuada, permite mejorar los efectos derivados de la aplicación de las nuevas transformaciones de Lie resultantes. Utilizando este método se reimplementa la eliminación de la paralaje y se extiende su efecto hasta eliminar completamente el argumento de latitud, esto es, con una única transformación se obtiene el mismo efecto que el producido por la combinación de la eliminación de la paralaje y la eliminación del perigeo (artículo tercero).

Estos dos propagadores, junto con otros de la suite OPP, han sido integrados en una interfaz gráfica web flexible, amigable al usuario y extensible, denominada $Astrody_{Tools}^{Web}$ (artículo cuarto). $Astrody_{Tools}^{Web}$ es, por tanto, una plataforma basada en las herramientas derivadas de la investigación en Mecánica Celeste y en Astrodinámica en las que el grupo de investigación GRUCACI lleva años trabajando. Asimismo se han ido incorporando herramientas de otros investigadores de reconocido prestigio internacional, con lo que se ha conseguido crear un nivel de abstracción que facilita la inclusión de herramientas futuras y omite la tediosa ejecución y especificación de parámetros mediante línea de comandos en entornos UNIX. Este servicio web cede el uso de las herramientas, de forma gratuita, a expertos y a la comunidad científica en general a través de Internet, con el objetivo de constituir

un espacio abierto para compartir conocimientos y dar solución a problemas de los ámbitos de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica.

Junto a $Astrody_{Tools}^{Web}$ se ha presentado el proyecto $Bioinfo_{Tools}^{Web}$ que, aunque no es el objeto central de esta Tesis Doctoral, sirve de ejemplo para comprobar cómo las técnicas de computación científica son llevadas a otro campo, en este caso la Bioinformática, y concretamente al análisis bioinformático de secuencias biológicas. Se trata de un proyecto web basado en el mismo modelo que $Astrody_{Tools}^{Web}$, trasladado a una disciplina en la que las técnicas cuantitativas de análisis son aplicadas al modelado de sistemas biológicos, concretamente a la generación masiva de datos de secuencias. A este respecto se ha presentado la plataforma y uno de sus módulos de análisis bioinformático, analizando las características particulares para uno de sus sistemas de flujos de trabajo, el análisis de DNA exoma.

4.1. PPKBZ9^{A,S,A}: dos propagadores analíticos

La teoría general de perturbaciones permite construir expresiones analíticas para calcular la posición y velocidad de un satélite o de un resto de basura espacial en un instante t_f a partir de su posición y velocidad en un instante inicial t_0 . PPKBZ9^{A,S,A} son dos propagadores de órbitas basados en una teoría analítica en la que se combinan dos transformaciones de Lie, la eliminación de la paralaje [45] y la eliminación del perigeo [7], y el método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky [13, 79]. El primer propagador, \mathcal{A} , es completamente analítico, mientras que el segundo, $\mathcal{S}\mathcal{A}$, calcula las transformaciones directa e inversa de forma numérica.

La combinación de las dos transformaciones de Lie permite eliminar los términos de largo periodo producidos por el argumento del perigeo, de tal forma que el Hamiltoniano transformado sólo depende de las variables (r'', R'') . Este tipo de Hamiltoniano es conocido en la literatura como *intermediario radial*. A continuación, mediante el cambio de la variable r'' y del tiempo por la inversa de r'' y por la anomalía verdadera perturbada, respectivamente, el nuevo Hamiltoniano se transforma en la ecuación de un oscilador armónico perturbado. El método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky es utilizado entonces para integrar este Hamiltoniano. Esta teoría analítica es válida para excentricidades e inclinaciones pequeñas aunque no para la inclinación crítica.

El método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky ha sido ampliamente utilizado para resolver la ecuación $\ddot{u} + \omega^2 u = F(u, \dot{u}; \epsilon)$. En el ámbito de la teoría del satélite artificial, este método fue aplicado por primera vez en [18] al problema principal del satélite artificial, después de eliminar el argumento de latitud utilizando el método de von Zeipel. Seguidamente, aplicando el mismo procedimiento en [17], la teoría fue extendida a J_3 y J_4 . Más recientemente, utilizando ATECAT [1, 124, 125, 126], se ha desarrollado una teoría

analítica de tercer orden en forma cerrada de la excentricidad, así como un programa en FORTRAN para el cálculo de efemérides, según un modelo que incluye los armónicos zonales desde J_2 hasta J_6 . Este propagador fue desarrollado por requerimiento del Centre National d'Études Spatiales (CNES) para el caso de un orbitador alrededor de Marte [128].

En este trabajo [134] se amplía el modelo de perturbaciones al incluir los armónicos zonales J_7 , J_8 y J_9 , como en [30]. A continuación, se construye una teoría analítica de segundo orden que elimina los términos de largo periodo mediante las eliminaciones de la paralaje y del perigeo, mientras que integra los términos de corto periodo utilizando el método de Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky. La teoría analítica ha sido desarrollada utilizando el entorno simbólico-numérico llamado *MathATESAT* [133]. A partir de la teoría analítica se generan dos propagadores de órbitas y un conjunto de funciones en *Mathematica* que permiten estudiar los términos de largo periodo de este sistema dinámico. Para finalizar, en este trabajo se analiza la precisión de ambos propagadores para los casos de la Tierra y de Marte.

4.1.1. La ecuación generalizada de Kepler

La exactitud en la determinación de la posición y de la velocidad de un satélite utilizando cualquiera de los propagadores orbitales de la familia PPKB depende de la resolución precisa de la ecuación de Kepler [137].

En este trabajo, incluido en el Capítulo 1, se estudia la resolución de la ecuación generalizada de Kepler utilizando tres de los métodos iterativos más frecuentes en la resolución de la ecuación clásica de Kepler: los métodos de Newton-Raphson, Halley y el propuesto por Danby y Burkardt. Las condiciones iniciales empleadas para inicializar estos métodos son $S_1 \equiv (E_0 = M)$, $S_2 \equiv (E_0 = M + ((6M)^{1/3} - M)e^2)$ si $M < 0.1$, y $E_0 = M + 0.85e$ si $M \geq 0.1$ y S_3 , que utiliza como valor inicial la propia solución de la ecuación de Kepler. La ecuación generalizada es función de la excentricidad, de las anomalías media y excéntrica y, además, de un pequeño parámetro ε^* , el cual depende del semieje mayor de la órbita, de la inclinación y de los parámetros físicos α y J_2 . El signo del parámetro ε^* depende de la inclinación, pudiendo ser negativo, cero o positivo; para $\varepsilon^* = 0$, la ecuación generalizada de Kepler se reduce a la clásica.

Al analizar el número de iteraciones necesarias para lograr la convergencia, se comprueba que el comportamiento es similar para los casos de la ecuación generalizada de Kepler y la clásica, tanto para los tres métodos iterativos como para las dos condiciones iniciales S_1 y S_2 (no tiene sentido hacer comparaciones utilizando S_3 , al tratarse de la propia solución de la ecuación clásica), siempre y cuando la excentricidad permanezca por debajo de 0.9. Para valores de excentricidad superiores a 0.9, con valores negativos del pequeño parámetro, aparecen regiones de no convergencia en todos los casos. Ello es debido a que la solución de la ecuación generalizada no pertenece al

intervalo $[0, \pi]$ para excentricidades próximas a 1, condición que sí satisface la ecuación clásica. La condición inicial que conduce a una convergencia más rápida es S_3 , que consigue reducir en una unidad, por término medio, el número de iteraciones necesarias. Si, además, se utiliza el método de Danby y Burkardt, se obtienen los mejores resultados, logrando la convergencia del proceso en 2 ó 3 iteraciones en un 95 % de los casos.

4.2. El método de Lie-Deprit revisado

Los métodos de perturbaciones constituyen una de las herramientas más potentes para el estudio de los sistemas dinámicos. Estas técnicas son frecuentemente utilizadas en varios campos de la mecánica no lineal. El método de promedios, el cual fue rigurosamente formulado en [79], y los métodos basados en transformaciones canónicas, tales como los métodos de von Zeipel [59], Hori [72, 73] y Deprit [42], son algunos de los métodos derivados del trabajo de Poincaré [119]. La demostración de la equivalencia de estos métodos [5, 97, 100, 143, 152] está basada en ciertas arbitrariedades relacionadas con las ecuaciones promediadas. Sin embargo, estas arbitrariedades pueden ser también aprovechadas durante el proceso de obtención de la función generatriz, para así lograr un nuevo sistema de ecuaciones diferenciales más ventajoso [7, 78, 85, 86, 100].

En este trabajo [138] se revisa el método propuesto por Deprit para construir una transformación de Lie, con el objetivo de identificar dónde aparece esta arbitrariedad, cómo y bajo qué condiciones puede ser utilizada y, finalmente, cuál es su relación con otros métodos de perturbaciones. Para ello se reexamina el proceso desarrollado en este método cuando es aplicado a un sistema Hamiltoniano de la forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(I_1) + \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_n(\mathbf{I}, \boldsymbol{\varphi}), \quad (4.1)$$

donde ε es un pequeño parámetro y $\boldsymbol{\varphi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_m)$ e $\mathbf{I} = (I_1, \dots, I_m)$ son las variables de ángulo-acción. En este trabajo se asume que la parte no perturbada de la ecuación (4.1) se puede expresar como $\mathcal{H}_0 = \omega I_1$, que es lo que Arnol'd caracteriza como *degeneración propia* [8], mientras que la parte perturbada puede ser expresada como una serie trigonométrica en la forma

$$\mathcal{H}_n = \sum_{j_1, \dots, j_m \in \mathbb{Z}} \mathcal{C}_{j_1, \dots, j_m} \begin{pmatrix} \text{sen} \\ \text{cos} \end{pmatrix} (j_1 \varphi_1 + \dots + j_m \varphi_m), \quad (4.2)$$

donde $\mathcal{C}_{j_1, \dots, j_m}$ son funciones de los parámetros físicos y de las acciones I_1, \dots, I_m . Es importante destacar que el sistema dinámico definido por un

Hamiltoniano, cuya parte no perturbada \mathcal{H}_0 está formada por un número finito de osciladores armónicos, se puede expresar en la forma (4.1) por medio de un cambio de variable [48]. Además, este tipo de Hamiltoniano aparece frecuentemente en una amplia clase de problemas en Mecánica Celeste y en Mecánica Clásica.

Para un Hamiltoniano de la forma (4.1), el método de Deprit permite obtener el Hamiltoniano transformado y la función generatriz de la transformación de Lie, orden por orden, como la solución de una ecuación en derivadas parciales. La solución de esta ecuación se obtiene eligiendo como Hamiltoniano transformado una función del núcleo del operador de Lie asociado a \mathcal{H}_0 , y como función generatriz una función de la imagen del operador. Esto es, el Hamiltoniano transformado no depende de la variable angular, φ_1 , y la función generatriz se obtiene a partir del cálculo de la inversa del operador de Lie. Este proceso implica frecuentemente integración, es decir, que una función \mathcal{F}_n , que pertenece al núcleo del operador de Lie, puede ser añadida a la función generatriz en cada orden. Usualmente estas funciones se toman igual a cero. Sin embargo, para el caso $\mathcal{F}_n \neq 0$, la función se puede determinar del siguiente modo: si se considera en el mismo orden, el efecto afecta directamente a la función \mathcal{W}_n ; si, por el contrario, se pospone a un orden superior, \mathcal{F}_n se puede utilizar para obtener un Hamiltoniano transformado más simple que el que resulta cuando se considera $\mathcal{F}_n = 0$. En este último caso, bajo ciertas condiciones de degeneración, \mathcal{F}_n se convierte en la función generatriz de una nueva transformación, la cual puede ser utilizada para eliminar otras variables angulares. Es importante destacar que el método llamado de la *doble normalización* [109, 111, 112] es el mismo algoritmo de Lie-Deprit considerando $\mathcal{F}_n \neq 0$.

4.3. Revisión de la eliminación de la paralaje

En el trabajo anterior [138] se ha estudiado el efecto de la arbitrariedad que introduce el método de Lie-Deprit, de modo que en este otro trabajo [139] se ha podido utilizar esta extensión del método de Lie-Deprit para revisar la eliminación de la paralaje [45] en el problema principal de la teoría del satélite artificial. Las funciones del núcleo del operador de Lie asociado a \mathcal{H}_0 consideradas son de la forma $\mathcal{F}_n(C, S, \Theta)$ y son calculadas en el orden $n+1$. El efecto que produce esta versión extendida de la eliminación de la paralaje es equivalente al producido por la eliminación de la latitud [18, 26, 27, 28, 46] o al causado por los efectos combinados de la eliminación clásica de la paralaje y la eliminación del perigeo [7].

Se ha llegado a obtener el orden 6 de las eliminaciones clásica y extendida de la paralaje y del perigeo utilizando MathATESAT. Asimismo, se han realizado comparaciones de las expresiones analíticas y de la precisión numérica de estas transformaciones de Lie.

4.4. $Astrody_{Tools}^{Web}$: un proyecto de e-Ciencia

El acelerado desarrollo de las *tecnologías de la información y la comunicación*, TIC, ha propiciado el auge de Internet como plataforma internacional de intercambio de información, abriendo nuevas vías de colaboración en casi todos los campos científicos y tecnológicos. Conceptos como *Open-Science*, *e-Research*, *e-Collaboration* han arraigado en la comunidad científica e investigadora, permitiendo aunar esfuerzos, optimizar recursos y establecer nuevas vías de colaboración para el desarrollo de la Ciencia.

Internet ofrece además otros recursos a los investigadores. El desarrollo de herramientas basadas en la web brinda la posibilidad de utilizarlas sin restricciones asociadas a la potencia de cálculo del computador del usuario, al sistema operativo que tenga instalado, a su ubicación geográfica o a su disponibilidad horaria. Poco a poco los programas que en un principio necesitaban estar instalados en cada equipo particular se han ido trasladando a la red de redes, donde son compartidos y gozan de una mayor visibilidad, con el consiguiente incremento en el impacto de las investigaciones. Es, en definitiva, un claro avance en favor de la Ciencia.

Con el fin de difundir el uso y conocimiento de los propagadores y aplicaciones creadas por el Grupo de Computación Científica (GRUCACI), surge $Astrody_{Tools}^{Web}$ [130, 132], un entorno de servicio web que permite poner herramientas científicas, desarrolladas por investigadores del campo de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica, al servicio de otros investigadores y estudiantes con fines educativos o científicos. Se han incluido, por el momento, cuatro aplicaciones distintas. La primera, una suite de propagadores, entre los que se encuentra PPKBZ9, mejorado por este doctorando tras implementar el desarrollo de las teorías descritas en el artículo [134]. Para otras herramientas como ZERGOF, RGOFinder y DSST se han diseñado las interfaces web y los mecanismos de conexión e integración que facilitan su uso externo y abierto a través de Internet. El usuario realizará una petición, utilizando un navegador web, a través de la interfaz de la aplicación seleccionada. Esta petición es manejada por los servicios web, que haciendo uso de librerías, se conectan al servidor de aplicaciones enviándole la solicitud de trabajo. En este servidor se gestiona la conexión con la aplicación a ejecutar así como los recursos necesarios para su procesamiento y validación. Cuando la ejecución de la aplicación finaliza se obtienen los resultados, que son enviados al servidor, el cual se encarga de completar la respuesta, que es finalmente mostrada y ofrecida al usuario para su descarga.

4.5. El proyecto $Bioinfo_{Tools}^{Web}$

El desarrollo propiciado por Internet tampoco presenta una excepción en el campo de la Bioinformática. Así, bajo el mismo paradigma que $Astrody_{Tools}^{Web}$,

se ha creado *Bioinfo_{Tools}^{Web}*, una plataforma web que incluye diferentes servicios de análisis bioinformático (para el alineamiento de secuencias, análisis de expresión génica, construcción de redes de rutas moleculares, etcétera), ayudando así a la Plataforma de Genómica del Centro de Investigación Biomédica de La Rioja, CIBIR, en sus tareas de gestión y servicio al investigador.

El sistema está ya siendo utilizado internamente para diferentes servicios completos de análisis, y se continúan integrando otros protocolos. Asimismo, una versión de estos servicios pronto estará a disposición de cualquier investigador a través de la Plataforma de Servicios Bioinformáticos de la Universidad de La Rioja y del CIBIR.

El objetivo de esta plataforma externa es el de permitir a especialistas en Bioinformática, así como a investigadores y facultativos, la utilización de herramientas del ámbito de la Bioinformática para realizar alineamientos de secuencia y análisis completos de diversa índole, todo ello sin necesidad de conocer cómo funcionan estas herramientas, ni los comandos que requieren para ser ejecutadas fuera del entorno Web. Los investigadores podrán, de este modo, centrarse en su gran desafío, que no es otro que analizar estas secuencias y obtener la información biológicamente relevante.

Debido a la gran variedad de herramientas implicadas en un mismo análisis, como ha quedado patente en el ejemplo expuesto en el Capítulo 3, la plataforma *Bioinfo_{Tools}^{Web}* constituye una demostración de la flexibilidad del modelo desarrollado en *Astrody_{Tools}^{Web}*.

La plataforma está diseñada para gestionar internamente la incorporación de otras herramientas de análisis y parametrizaciones diversas, así como nuevas versiones de genomas contra los cuales alinear la secuencia. De este modo se consigue que el usuario pueda elegir, en diferentes puntos del flujo del proceso, qué herramienta de análisis usar, qué parámetros adaptar a su tipo de análisis, y qué versión de organismo utilizar, así como qué filtrado de los datos quiere obtener. Esta toma de decisiones sobre flujos alternos ha sido considerada en la implementación, creando un sistema abierto y flexible, adaptable por tanto a las necesidades del investigador.

*Uno no advierte jamás lo que está hecho,
solo puede ver lo que falta por hacer*



MARIE CURIE

Capítulo 5

Conclusiones y trabajos futuros

5.1. Conclusiones

El desarrollo de la Ciencia y de la Tecnología, aparejado con la innovación, ha logrado que el hombre, en el devenir de la historia, haya evolucionado hasta llegar a la sociedad actual, una sociedad donde los avances tecnológicos marcan nuevos paradigmas en todas sus ramas y avanzan a velocidades vertiginosas.

Las tecnologías de la información y la comunicación son aplicables en casi todos los sectores de la sociedad, reportando mejoras y eficiencia. La Ciencia se ha apoyado en los avances tecnológicos para aplicar los conocimientos y aprovecharlos para el progreso de la humanidad. Disciplinas como la Física, la Química y la Ingeniería encuentran en las TIC la posibilidad de incrementar, mejorar y compartir su repertorio de conocimientos, y por ende, de contribuir a su desarrollo.

El aprovechamiento de los recursos tecnológicos en el mundo científico constituye un gran instrumento en el campo de la computación científica, facilitando la construcción de modelos matemáticos y la aplicación de técnicas numéricas en la resolución de problemas científicos.

La presente Tesis Doctoral constituye una disertación acerca de cómo la computación científica contribuye a la mejora de la aplicación de las técnicas de manipulación algebraica a los ámbitos de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica.

Se han incorporado nuevas teorías en MathATESAT, un sistema de computación numérica y simbólica desarrollado inicialmente por el Dr. Juan Félix San Juan, que permite el desarrollo de teorías analíticas de orden elevado aplicadas a sistemas keplerianos u osciladores armónicos perturbados.

Se han implementado en MathATESAT las funcionalidades de ATESAT que permiten integrar en forma cerrada el problema zonal del satélite artificial. A partir de estas teorías analíticas se han generado dos propagadores de órbitas, PPKBZ9^{A,SA}. El modelo de perturbaciones considerado tiene en

cuenta los ocho primeros armónicos zonales del potencial gravitatorio de un planeta como la Tierra. El primer propagador, \mathcal{A} , es completamente analítico, mientras que el segundo, \mathcal{SA} , calcula las transformaciones directa e inversa de forma numérica. En la teoría analítica se combinan dos transformaciones de Lie, la eliminación de la paralaje y la eliminación del perigeo, para eliminar los términos de largo periodo producidos por el argumento del perigeo, junto con el método the Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky para integrar los términos de corto periodo. Esta teoría analítica es válida para excentricidades e inclinaciones pequeñas, pero no para la inclinación crítica.

Se han validado los programas de propagación orbital con un extenso catálogo de condiciones iniciales para satélites orbitando alrededor de Marte y de la Tierra. Todas las pruebas muestran que el error máximo al cabo de 30 días de propagación está por debajo de los 300 metros en el caso de la Tierra, aunque es mayor para el caso de Marte. También se ha construido un conjunto de funciones en *Mathematica* que permiten estudiar los términos de largo periodo de este sistema dinámico. Estas funciones pueden ser combinadas con los programas de evaluación de la teoría analítica. Finalmente, estos programas se han aplicado a la constelación de satélites de la Agencia Espacial Europea (ESA) Swarm y al Mars Global Surveyor.

Se ha estudiado la ecuación generalizada de Kepler, pieza clave en la determinación precisa de la posición y velocidad de un satélite cuando se emplean los propagadores orbitales de la familia PPKB. Se ha estudiado el comportamiento de los métodos de Newton-Raphson, Halley y el propuesto por Danby y Burkardt, así como varias condiciones iniciales empleadas para inicializar estos procesos iterativos, aplicados a la resolución de la ecuación clásica de Kepler. Los mejores resultados se han obtenido al combinar el método de Danby y Burkardt con la solución de la ecuación clásica de Kepler como valor inicial del método. Asimismo se ha encontrado que para valores negativos del pequeño parámetro, la solución de la ecuación generalizada no tiene por qué pertenecer al intervalo $[0, \pi]$.

Por otro lado, al igual que en todos los métodos de perturbaciones, el método de Lie-Deprit presenta una cierta arbitrariedad. En esta Tesis Doctoral se ha revisado este método y se ha identificado dónde aparece esta arbitrariedad, cómo y bajo qué condiciones puede ser utilizada y cuál es su relación con otros métodos de perturbaciones. El método de Lie-Deprit permite obtener el Hamiltoniano transformado y la función generatriz de la transformación de Lie, orden por orden, como la solución de una ecuación en derivadas parciales. El proceso implica frecuentemente integración, es decir, que una función \mathcal{F}_n puede ser añadida a la función generatriz en cada orden. Usualmente estas funciones son tomadas igual a cero. Sin embargo, la selección de unas funciones \mathcal{F}_n apropiadas permite eliminar otras variables angulares en el proceso.

Además, la eliminación de la paralaje ha sido reconstruida utilizando la

extensión del método de Deprit descrita. Esta nueva versión amplía la que propuso Deprit al diferenciarse en una función \mathcal{F}_n . La versión clásica supone $\mathcal{F}_n = 0$, mientras que nuestra extensión propone una función $\mathcal{F}_n(C, S, \Theta)$. El efecto añadido consiste en permitir la eliminación de los términos dependientes del argumento del perigeo, lo cual, sumado al efecto de la eliminación de la paralaje, elimina el argumento de latitud. En el problema principal del satélite artificial, el nuevo Hamiltoniano coincide con el obtenido después de aplicar la eliminación clásica de la paralaje y la eliminación del perigeo hasta el sexto orden. También se han realizado comparaciones numéricas entre ambos esquemas.

Con el fin de difundir este conocimiento y el uso de los propagadores y aplicaciones creadas por el grupo de investigación GRUCACI se ha creado *Astrody_{Tools}^{Web}*, una plataforma de servicios Web que permite el uso de estas herramientas de manera gratuita a través de Internet.

Las herramientas habitualmente utilizadas en los ámbitos de la Mecánica Celeste y de la Astrodinámica adolecen de cierta heterogeneidad en los lenguajes de programación empleados, así como de un diseño poco intuitivo basado en el uso de la línea de comandos sobre sistemas operativos de tipo UNIX. La plataforma desarrollada permite paliar estos inconvenientes, pues ha sido diseñada de modo que cualquier investigador pueda acceder a las herramientas que integra a través de interfaces gráficas intuitivas, ejecutar los cálculos en equipos de computación de altas prestaciones, y aprovechar la capacidad de análisis de la que ha sido dotada.

Además se ha conseguido unificar en un solo proceso la ejecución de la aplicación seleccionada y su interconexión con otras herramientas como Octave, L^AT_EX, etcétera, con el fin de hacer un tratamiento final de los resultados. La integración de todas estas herramientas ha requerido de un estudio de las entradas y salidas de las aplicaciones, con el fin de poder enlazar la entrada de cada herramienta con la salida de su predecesora, y de modo que, para cada ejecución, los parámetros necesarios estén explícitamente definidos y hayan sido correctamente solicitados al usuario al inicio del proceso. Se une a todo ello la implementación de un sistema de control que evalúa y verifica todo el flujo de ejecución.

Los avances tecnológicos y la computación científica han dado origen a nuevas ramas dentro de la Ciencia, como es el caso de la Bioinformática. Así, aplicando el mismo modelo que en *Astrody_{Tools}^{Web}*, se ha creado *Bioinfo_{Tools}^{Web}*, una plataforma de servicios Web de análisis bioinformáticos, de la que se ha seleccionado para la presente Tesis Doctoral, a modo de ejemplo, sólo uno de los servicios que ofrece al investigador desde el Centro de Investigación Biomédica de la Rioja: el análisis de DNA exoma.

A través del conjunto de datos solicitados en la interfaz web para un tipo de análisis particular, se realiza un encadenamiento de varios algoritmos de análisis y herramientas implicadas. Como ya se ha indicado para

$Astrody_{Tools}^{Web}$, automatizar este proceso ha supuesto un análisis exhaustivo de los parámetros que hay que solicitar al usuario inicialmente para que estén disponibles para cada una de las herramientas que intervienen en el flujo de proceso.

Se han incluido entre las actividades de análisis aquéllas relativas a operaciones sobre bancos de datos que permiten la comparación de los resultados con grandes repositorios, realizándose el análisis sobre miles de registros bibliográficos basados en ciertas reglas, y utilizando medidas específicas para obtener frecuencias, tendencias, cruces y relaciones, que ayuden al investigador a analizar e interpretar los datos.

Ambas plataformas son proyectos ambiciosos que no se desea que queden limitados a repositorios de software en Internet, sino que sean espacios abiertos de colaboración e intercambio de conocimiento científico.

5.2. Líneas de trabajo futuras

La mejora de la precisión y del modelo de perturbaciones en los propagadores de la familia PPKB implica el desarrollo de las técnicas de manipulación algebraica, y por tanto, su desarrollo en MathATESAT. En este sentido, se está investigando en la aplicación del teorema de la función inversa para obtener un desarrollo en serie de potencias de la excentricidad y de la anomalía media en el caso de la ecuación generalizada de Kepler, pieza clave en la determinación precisa de la posición y velocidad de un satélite en el caso de la teoría PPKB.

Otra línea en la que se está trabajando es la inclusión de los armónicos tesaerales m-daily en el modelo PPKB. La contribución a segundo orden de estos términos se encuentra en la función generatriz, y la integración del intermediario radial no se ve afectada.

Entre las vías que están ya en proceso de desarrollo, relacionadas con las aplicaciones alojadas en $Astrody_{Tools}^{Web}$, figuran los métodos para la determinación de los elementos equinociales medios en DSST a partir de las observaciones, los cuales se basan en mínimos cuadrados ponderados (WLS), Extended Kalman Filter (EKF), Square Root Information Filter (SRIF), y Backward Smoothing Extended Kalman Filter (BSEKF). Todos estos métodos constituirán una sólida base para una futura plataforma Web dedicada al Space Situational Awareness (SSA).

Las mejoras en las capacidades actuales de DSST Web se centrarán en las funciones necesarias para la determinación orbital: los interpoladores, el movimiento de corto periodo, las derivadas parciales, y las transformaciones de coordenadas. Los modelos de observaciones a considerar incluirán datos de radar y ópticos, procedentes tanto de sensores ubicados en tierra como en el espacio.

La arquitectura web para una nueva plataforma centrada en Space Si-

tuational Awareness (SSA) será una generalización de la arquitectura web basada en Drupal mostrada en la figura 2.2. Drupal proporciona una capa de abstracción de bases de datos que permitirá la gestión de los datos procedentes de las observaciones.

Finalmente, además de ampliar y mejorar el repositorio de aplicaciones disponibles en $Astrody_{Tools}^{Web}$, también se pretende habilitar los medios para que todas las herramientas incorporadas en la plataforma puedan ser convenientemente documentadas, permitiendo, de este modo, el conocimiento de los algoritmos aplicados y el rigor en la interpretación de los resultados obtenidos que debe presidir toda actuación científica.

Otra ambiciosa e interesante vía de trabajo que se plantea es la de convertir $Astrody_{Tools}^{Web}$ en un entorno de encuentro, formación y colaboración entre los investigadores en los campos de la Astrodinámica y la Mecánica Celeste. La plataforma $Astrody_{Tools}^{Web}$ ofrecerá, además de las aplicaciones software, un entorno de Ciencia abierta para la creación de materiales formativos dirigidos a investigadores noveles en los campos de la Astrodinámica y la Mecánica Celeste, y un punto de encuentro para la cooperación, el intercambio de ideas y la colaboración en el desarrollo de nuevas herramientas.

De la misma forma, se seguirá desarrollando la plataforma $Bioinfo_{Tools}^{Web}$ para que continúe aglutinando en servicios de análisis completos las tareas que un biólogo o bioinformático tiene que realizar. Ya se han automatizado servicios de transcriptómica como mRNA-Seq, totalRNA-Seq y microRNA-Seq, se seguirá trabajando en la incorporación de otros protocolos y en la creación de soluciones ad-hoc para la resolución de problemas puntuales. El objetivo en este campo es ofrecer las herramientas necesarias para permitir que los procesos bioinformáticos puedan llevarse a cabo con agilidad, facilitando de este modo la tarea de investigación y permitiendo que se pueda avanzar más rápido en la generación del conocimiento.

Manteniendo siempre como horizonte las necesidades del investigador, en un entorno global y virtual, sin barreras geográficas, ambas plataformas, $Astrody_{Tools}^{Web}$ y $Bioinfo_{Tools}^{Web}$, contienen hoy en día un repositorio de software que supone un servicio a la carta, por cuanto está a disposición de los investigadores que quieran utilizarlo como plataforma de trabajo, pero en un futuro próximo constituirá un espacio para la construcción del nuevo conocimiento científico.

La Ciencia viene, la sabiduría se queda



ALFRED TENNYSON

Apéndice A

Artículo I

PPKBZ9^{A,SA} Two Orbit Propagators Based on an Analytical Theory

San-Juan, J. F., Gavín, A.
López-Ochoa, L. M. and López, R.

The Journal of the Astronautical Sciences
2011

<http://dx.doi.org/10.1007/BF03321535>

Apéndice B

Artículo II

A Note about Certain Arbitrariness in the Solution of the Homological Equation in Deprit's Method

San-Juan, J. F., López, R.
Pérez, I. and San-Martín, M.

Mathematical Problems in Engineering
2015

<http://dx.doi.org/10.1155/2015/982857>

Research Article

A Note about Certain Arbitrariness in the Solution of the Homological Equation in Deprit's Method

Juan Félix San-Juan,¹ Rosario López,² Iván Pérez,¹ and Montserrat San-Martín¹

¹Scientific Computing Group (GRUCACI), University of La Rioja, 26004 Logroño, Spain

²Center for Biomedical Research of La Rioja (CIBIR) and Scientific Computing Group (GRUCACI), 26006 Logroño, Spain

Correspondence should be addressed to Juan Félix San-Juan; juanfelix.sanjuan@unirioja.es

Received 1 September 2014; Accepted 2 January 2015

Academic Editor: Jun Jiang

Copyright © 2015 Juan Félix San-Juan et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Deprit's method has been revisited in order to take advantage of certain arbitrariness arising when the inverse of the Lie operator is applied to obtain the generating function of the Lie transform. This arbitrariness is intrinsic to all perturbation techniques and can be used to demonstrate the equivalence among different perturbation methods, to remove terms from the generating function of the Lie transform, or to eliminate several angles simultaneously in the case of having a degenerate Hamiltonian.

1. Introduction

Perturbation methods represent one of the most important and powerful tools for the study of dynamical systems. These techniques are frequently used in several fields of nonlinear mechanics. The method of the averaging, which was rigorously formulated in [1], and the methods based on canonical transformations, such as the methods of von Zeipel [2, 3], Hori [4, 5], and Deprit [6], are some of the analytical perturbation methods derived from the work of Poincaré [7]. The demonstration of the equivalence of these methods [8–12] is based on certain arbitrariness closely related to the averaged equations. Moreover, this arbitrariness can also be included during the process of obtaining the generating function and determining the new system of differential equations [10, 13–16].

The purpose of this paper is to review the algorithm proposed by Deprit to perform a Lie transform so as to identify where this arbitrariness appears, how and under what conditions this can be used, and, finally, what is its relation to another method derived from the one proposed by Deprit, such as the so-called double normalization [17–19]. In order

to do that, we will reexamine the processes carried out by Deprit's method when it is applied to the normalization of Hamiltonian systems of the form

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(I_1) + \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_n(\mathbf{I}, \boldsymbol{\varphi}), \quad (1)$$

where ε is a small parameter and $\mathbf{I} = (I_1, \dots, I_m)$, $\boldsymbol{\varphi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_m)$ are action-angle variables. More precisely, we will assume that the unperturbed part of (1) can be expressed in the simple form $\mathcal{H}_0 = \omega I_1$, which is what Arnold characterizes as proper degeneracy [20], while the perturbed part can be represented as a trigonometric series in the form

$$\mathcal{H}_n = \sum_{j_1, \dots, j_m \in \mathcal{Z}} \mathcal{C}_{j_1, \dots, j_m} \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} (j_1 \varphi_1 + \dots + j_m \varphi_m), \quad (2)$$

where $\mathcal{C}_{j_1, \dots, j_m}$ are functions depending on physical parameters and the actions I_1, \dots, I_m . It is worth noting that all dynamical systems defined by a Hamiltonian function whose unperturbed part \mathcal{H}_0 is made of a finite number of harmonic oscillators can be brought to the form (1) by means of a

suitable change of variables [21, 22]. Moreover, this type of Hamiltonian frequently appears in a large class of problems in celestial mechanics and classical mechanics.

For a Hamiltonian of the form (1), Deprit's method allows one to obtain the transformed Hamiltonian and the generating function of the Lie transform, order by order, as a solution of a partial differential equation. The solution of this equation is obtained by choosing the transformed Hamiltonian in the null space and the generating function in the range of the Lie operator associated to \mathcal{H}_0 . Therefore, the transformed Hamiltonian does not depend on the angular variable φ_1 and the generating function is obtained by computing the inverse of the Lie operator. This is a procedure that usually involves integration. This fact implies that a function \mathcal{F}_n , belonging to the null space of the Lie operator, can be added to the generating function at each order. Usually, these functions are chosen to be equal to zero. This inherent arbitrariness introduced by this method is analogous to the gauge freedom [23–25]. It is worth noting that Morrison [10], using the von Zeipel method, considers a generating function $S_1 = \widehat{S}_1 + S_1^*$, where S_1^* is an arbitrary 2π -periodic function defined as the average of S_1 with respect to the fast variable. The determination of S_1^* can be made at the same order or postponed until next order, in which case, under certain conditions, it is possible to consider S_1^* as the generating function of a new transformation, which can be used to remove other angular variables. Another example of using Deprit's method with a zero-average generator can be seen in Metris and Exertier [26].

In Section 2, we make a brief review of some basic elements of the Lie transform perturbation theory and identify where the arbitrary function appears in Deprit's method. The process whereby Deprit's method is applied, and how explicit analytical solutions can be obtained when the arbitrary function is considered nonnull, is outlined in Section 3. The special case of degenerated first-order normalized Hamiltonians and their relation with other method derived from Deprit's method is presented in Section 4. Finally, in Section 5, an example of the normalization, when the arbitrary function is nonnull, is presented.

2. Lie Transforms

Let \mathcal{P} be a Poisson algebra of functions, that is, an algebra of real or complex value functions in (\mathbf{x}, \mathbf{X}) , where (\mathbf{x}, \mathbf{X}) belongs to $\mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n$ or $\mathbf{C}^n \times \mathbf{C}^n$, and such that for any f and g in \mathcal{P} the Poisson bracket, defined by

$$\{f, g\} = \nabla_{\mathbf{x}} f \cdot \nabla_{\mathbf{X}} g - \nabla_{\mathbf{X}} f \cdot \nabla_{\mathbf{x}} g, \quad (3)$$

also belongs to \mathcal{P} .

A Lie transform is a uniparametric family of mappings $\phi : (\mathbf{x}', \mathbf{X}', \varepsilon) \rightarrow (\mathbf{x}, \mathbf{X})$ defined by a solution of the system of differential equations,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{d\varepsilon} &= \nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{W}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \varepsilon), \\ \frac{d\mathbf{X}}{d\varepsilon} &= -\nabla_{\mathbf{X}} \mathcal{W}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \varepsilon), \end{aligned} \quad (4)$$

that satisfies the initial conditions $\mathbf{x}(\mathbf{x}', \mathbf{X}', 0) = \mathbf{x}'$ and $\mathbf{X}(\mathbf{x}', \mathbf{X}', 0) = \mathbf{X}'$. The function \mathcal{W} is the generator of ϕ and can be expressed as the following power series in the parameter ε :

$$\mathcal{W}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \varepsilon) = \sum_{i \geq 0} \frac{\varepsilon^i}{i!} W_{i+1}(\mathbf{x}, \mathbf{X}). \quad (5)$$

In the Hamiltonian case, perturbation theories are based on transforming the analytical Hamiltonian function,

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \varepsilon) = \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_n(\mathbf{x}, \mathbf{X}) \equiv \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_{n,0}(\mathbf{x}, \mathbf{X}), \quad (6)$$

into the new one

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}', \mathbf{X}', \varepsilon) = \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_n(\mathbf{x}', \mathbf{X}') \equiv \sum_{n \geq 1} \frac{\varepsilon^n}{n!} \mathcal{H}_{0,n}(\mathbf{x}', \mathbf{X}'), \quad (7)$$

which satisfies some specific prerequisites. One of the most useful methods to build this transform was proposed by Deprit in [6].

The Lie-Deprit method looks for a generating function \mathcal{W} of ϕ so that the terms \mathcal{H}_n , \mathcal{H}_n , and \mathcal{W}_n satisfy the partial differential equation, called Homological equation:

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}(\mathcal{W}_n) + \mathcal{K}_n = \widehat{\mathcal{H}}_{0,n}, \quad (8)$$

where $\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}$ is the Lie operator (or derivative) associated to \mathcal{H}_0 , a linear operator given in terms of a Poisson bracket by

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0} : F \rightarrow \{F, \mathcal{H}_0\}. \quad (9)$$

The right-hand side of (8), $\widehat{\mathcal{H}}_{0,n}$, is computed from \mathcal{H}_n , $(\mathcal{W}_i)_{1 \leq i \leq n-1}$ and $(\mathcal{H}_{p,q})_{p+q \leq n-1}$, where the latter are obtained by means of the recursive formula:

$$\mathcal{H}_{i,j} = \mathcal{H}_{i+1,j-1} + \sum_{k=0}^i \binom{i}{k} \{\mathcal{H}_{i-k,j-1}, \mathcal{W}_{k+1}\}, \quad (10)$$

with $i \geq 0$ and $j \geq 0$ (for more details, see [6]).

In the case of the Hamiltonian (1), the algebra \mathcal{P} can be decomposed into the direct sum

$$\mathcal{P} = \ker(\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}) \oplus \text{im}(\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}), \quad (11)$$

where $\ker(\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0})$ denotes the null space (or kernel) of $\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}$ and $\text{im}(\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0})$ the range of $\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}$.

By (11), $\widehat{\mathcal{H}}_{0,n}$ can be uniquely split into

$$\widehat{\mathcal{H}}_{0,n} = \widehat{\mathcal{H}}_{0,n}^* + \widehat{\mathcal{H}}_{0,n}^{**}, \quad (12)$$

where $\widehat{\mathcal{H}}_{0,n}^*$ belongs to the null space of $\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}$ and $\widehat{\mathcal{H}}_{0,n}^{**}$ to the range of $\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}$. According to (12), a solution of the Homological equation (8) is given when the new Hamiltonian is chosen to be

$$\mathcal{K}_n = \widehat{\mathcal{H}}_{0,n}^*. \quad (13)$$

Then the generating function, \mathcal{W}_n , has to satisfy the identity

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}(\mathcal{W}_n) = \widehat{\mathcal{H}}_{0,n}^{**}. \quad (14)$$

Finally, \mathcal{W}_n is obtained by solving (14). This solution is not uniquely determined by (14) since the addition of any function $\mathcal{F}_n \in \ker(\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0})$ to \mathcal{W}_n is also a solution to the above equation. Usually, a natural choice for \mathcal{F}_n would seem to be to take it identically zero, although this does not necessarily have to be the most convenient choice. On the other hand, in the case of $\mathcal{F}_n \neq 0$ there are two possible instances in which the arbitrary function can be determined: first, at the same order which would produce an effect on the term \mathcal{W}_n of the generating function and, second, if the determination of the arbitrary functions is postponed to the next order, then the effect may be used to express the term \mathcal{K}_l with $l > n$ of the transformed Hamiltonian in a much simpler form compared to the transformed Hamiltonian obtained when $\mathcal{F}_n = 0$ is considered.

3. Normalization by the Lie-Deprit Method:

Case $\mathcal{F}_n \neq 0$

Let \mathcal{H} be a Hamiltonian of type (1). \mathcal{H} is the normalized Hamiltonian of \mathcal{H} in the phase space $(\boldsymbol{q}, \mathbf{I})$ up to order n if the zero order term \mathcal{H}_0 is an integral of the transformed Hamiltonian; that is,

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}(\mathcal{H}_i) = 0, \quad \text{for } i = 0, \dots, n, \quad (15)$$

where the associated Lie operator takes the form

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}(\cdot) = \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial \varphi_1'}. \quad (16)$$

In this case, the solution to (8) is obtained when the new Hamiltonian, \mathcal{H}_n , is

$$\mathcal{H}_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \widetilde{\mathcal{H}}_{0n} d\varphi_1', \quad (17)$$

and the generating function, \mathcal{W}_n , is given by

$$\mathcal{W}_n = \frac{1}{\omega} \int (\widetilde{\mathcal{H}}_{0n} - \mathcal{H}_n) d\varphi_1' + \mathcal{F}_n, \quad (18)$$

where \mathcal{F}_n is an arbitrary integration function in the null space of $\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}$. It is worth noting that \mathcal{F}_n depends on the variables $\varphi_2', \dots, \varphi_m'$ and all momenta I_i' . We will henceforth drop the primes from the new variables and momenta to simplify notation. For a better understanding of the role played by the arbitrary integration function \mathcal{F}_n , Deprit's method will be discussed taking into account its explicit appearance.

The method starts by taking $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0$. According to the Deprit's algorithm [6], at the first order the Homological equation, which has to be solved, is

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}(\mathcal{W}_1) + \mathcal{K}_1 = \widetilde{\mathcal{H}}_{01}, \quad (19)$$

where the right-hand side of this equation is

$$\widetilde{\mathcal{H}}_{01} = \mathcal{H}_{10} = \mathcal{H}_1. \quad (20)$$

Then, by applying (17) and (18), the first-order term of \mathcal{H} and \mathcal{W} can be written, respectively, as

$$\mathcal{K}_1 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{H}_1 d\varphi_1, \quad (21)$$

$$\mathcal{W}_1 = \frac{1}{\omega} \int (\mathcal{H}_1 - \mathcal{K}_1) d\varphi_1 + \mathcal{F}_1, \quad (22)$$

where $\mathcal{F}_1 \in \ker(\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0})$. The arbitrary function can be determined at the same order; for example, taking \mathcal{F}_1 as

$$\mathcal{F}_1 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{W}_1 d\varphi_1, \quad (23)$$

the arbitrary function removes those terms that do not depend on φ_1 from \mathcal{W}_1 or postponed its determination to the next order. Now we analyze the case when the determination of \mathcal{F}_1 is retained. Then, at second order the right-hand side of (8) is

$$\widetilde{\mathcal{H}}_{02} = \mathcal{H}_{20} + 2\{\mathcal{H}_{10}, \mathcal{W}_1\}. \quad (24)$$

By using (20) and (22), and after some rearrangements, (24) can be written in the form

$$\widetilde{\mathcal{H}}_{02} = \widetilde{\mathcal{H}}_{02}^\# + 2\{\mathcal{H}_1, \mathcal{F}_1\}, \quad (25)$$

where $\widetilde{\mathcal{H}}_{02}^\#$ collects all the terms that do not depend on \mathcal{F}_1 and is given by

$$\widetilde{\mathcal{H}}_{02}^\# = \mathcal{H}_{20} + \frac{2}{\omega} \left\{ \mathcal{H}_{10}, \int (\widetilde{\mathcal{H}}_{01} - \mathcal{H}_1) d\varphi_1 \right\}. \quad (26)$$

On the other hand, the second part $\{ \mathcal{H}_1, \mathcal{F}_1 \}$ involves the terms that only depend on the integration constant \mathcal{F}_1 . It is worth noting that this Poisson bracket can be written as a function of the Lie operator, $-\mathcal{L}_{\mathcal{H}_1}(\mathcal{F}_1)$.

By making use of (25), the Homological equation yields

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}(\mathcal{W}_2) + \mathcal{K}_2 = \widetilde{\mathcal{H}}_{02}^\# + 2\{\mathcal{H}_1, \mathcal{F}_1\}. \quad (27)$$

Now, by expanding the Poisson bracket, (27) can be rewritten as

$$\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0}(\mathcal{W}_2) + \mathcal{K}_2 = \widetilde{\mathcal{H}}_{02}^\# + 2 \sum_{i=2}^m \left(\frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial \varphi_i} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial I_i} - \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial I_i} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \varphi_i} \right). \quad (28)$$

Then, by applying (17) and taking into account (28), we obtain \mathcal{K}_2 as

$$\mathcal{K}_2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \widetilde{\mathcal{H}}_{02}^\# d\varphi_1 + 2 \sum_{i=2}^m \left(\frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial \varphi_i} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial I_i} - \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial I_i} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \varphi_i} \right). \quad (29)$$

It is worth noting that the dependency of \mathcal{F}_1 on \mathcal{H}_2 still remains through its partial derivatives with respect to φ_i (with $i = 2, \dots, m$) and all momenta. The elimination of this dependency is used to express \mathcal{K}_2 in a simpler form; it is

4

Mathematical Problems in Engineering

the fundamental idea that can be found behind the explicit manipulation of the arbitrary integration function.

Therefore, according to this purpose, the first term of (29) is decomposed as the sum $\mathcal{K}_2^I + \mathcal{K}_2^{II}$, where \mathcal{K}_2^{II} is to be made of those terms that we want to remove. Finally, \mathcal{F}_1 can be determined by solving

$$\sum_{i=2}^m \left(\frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial \varphi_i} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial I_i} - \frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial I_i} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \varphi_i} \right) = \frac{1}{2} \mathcal{K}_2^{II}. \quad (30)$$

It is worth noting that the complexity of this identity directly depends on the form of \mathcal{K}_1 and, therefore, on the form of \mathcal{H}_1 . Finally, the second-order term \mathcal{K}_2 of the Hamiltonian \mathcal{K} is taken as

$$\mathcal{K}_2 = \mathcal{K}_2^I. \quad (31)$$

Now, by substituting the value of \mathcal{F}_1 into (22) in order to complete \mathcal{W}_1 and into the previous terms \mathcal{K}_i of (10), the second-order term \mathcal{W}_2 of \mathcal{W} is

$$\mathcal{W}_2 = \frac{1}{\omega} \int (\overline{\mathcal{H}}_{02} - \mathcal{K}_2) d\varphi_1 + \mathcal{F}_2. \quad (32)$$

As already mentioned before, the arbitrary function can be determined at the same order so as to remove those terms that do not depend on φ_1 from \mathcal{W}_1 or postpone its determination to the next order.

The above reasoning can be immediately extended to order n in exactly the same way. By (10), the right-hand side of (8) can be written in the following generic form:

$$\overline{\mathcal{H}}_{0n} = \overline{\mathcal{H}}_{0n}^\# + n \{ \mathcal{K}_{10}, \mathcal{F}_{n-1} \}, \quad (33)$$

where the contribution of $\overline{\mathcal{H}}_{0n}^\#$ is known and the second term contains the unknown function \mathcal{F}_{n-1} .

As before, by expanding the Poisson bracket on (33) and taking into account (20), the Homological equation (8) takes the form

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\mathcal{K}_0}(\mathcal{W}_n) + \mathcal{K}_n \\ = \overline{\mathcal{H}}_{0n}^\# + n \sum_{i=2}^m \left(\frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial \varphi_i} \frac{\partial \mathcal{F}_{n-1}}{\partial I_i} - \frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial I_i} \frac{\partial \mathcal{F}_{n-1}}{\partial \varphi_i} \right). \end{aligned} \quad (34)$$

It is worth noting that this Poisson bracket can also be written as a function of the Lie operator as $-\mathcal{L}_{\mathcal{K}_1}(\mathcal{F}_{n-1})$.

Then, by substituting (33) into (17), we obtain \mathcal{K}_n as

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \overline{\mathcal{H}}_{0n}^\# d\varphi_1 \\ - n \sum_{i=2}^m \left(\frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial \varphi_i} \frac{\partial \mathcal{F}_{n-1}}{\partial I_i} - \frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial I_i} \frac{\partial \mathcal{F}_{n-1}}{\partial \varphi_i} \right). \end{aligned} \quad (35)$$

If we proceed in the same way as before, the first term of (35) can be decomposed again as the sum $\mathcal{K}_n^I + \mathcal{K}_n^{II}$. Then, by choosing suitable functional dependencies of \mathcal{F}_{n-1} ,

according to the additional aims of the transformation, and taking into account the identity

$$\sum_{i=2}^m \left(\frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial \varphi_i} \frac{\partial \mathcal{F}_{n-1}}{\partial I_i} - \frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial I_i} \frac{\partial \mathcal{F}_{n-1}}{\partial \varphi_i} \right) = \frac{1}{2n} \mathcal{K}_n^{II}, \quad (36)$$

the explicit value of \mathcal{F}_{n-1} can be obtained. Again, the complexity of (36) depends on the form of \mathcal{K}_1 and, therefore, on the form of \mathcal{H}_1 . Hence, the new Hamiltonian, \mathcal{K}_n , yields

$$\mathcal{K}_n = \mathcal{K}_n^I. \quad (37)$$

Then, by replacing the value of \mathcal{F}_{n-1} into \mathcal{W}_{n-1} and into the previous terms \mathcal{K}_i of the Deprit's scheme, we obtain \mathcal{W}_n as

$$\mathcal{W}_n = \frac{1}{\omega} \int (\overline{\mathcal{H}}_{0n} - \mathcal{K}_n) d\varphi_1 + \mathcal{F}_n. \quad (38)$$

Finally, by taking $\mathcal{F}_n = 0$, if this function is not used to remove the terms that do not depend on φ_1 from \mathcal{W}_n , the transformed Hamiltonian can be expressed as

$$\mathcal{K} = \sum_{n \geq 1} \frac{\epsilon^n}{n!} \mathcal{K}_n^I, \quad (39)$$

where the dependency on φ_1 is eliminated by the normalization process and the additional effects produced by the integration constants are included from the second order.

4. \mathcal{K}_n Degenerate at Order $n \geq 1$

As has been seen in the previous section, the arbitrary integration function, when it is determined at the same order, only affects the generating function. However, if its determination is postponed, the form of the terms \mathcal{K}_1 and \mathcal{H}_1 becomes important, since it depends on the solution of the partial differential equation (36).

In this section, we assume that the first-order term \mathcal{K}_1 of the initial Hamiltonian (1) is transformed into a degenerated term \mathcal{K}_1 of the new Hamiltonian in the sense of Arnold's characterization. Under this assumption, the arbitrary function can be considered like the generator of a new Lie transform which will allow to remove any other angular variables. It is worth noting that this condition is weaker than assuming the degeneration of the term \mathcal{K}_1 , as can be seen in the example shown in the next section.

We start considering the case in which the first-order term \mathcal{K}_1 depends on all the momenta I_i . It is easy to check that

$$\frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial \varphi_i} = 0, \quad \text{for } i = 2, \dots, m. \quad (40)$$

On the other hand, for each $n > 1$, using the identity $\{ \mathcal{K}_{10}, \mathcal{F}_{n-1} \} = -\mathcal{L}_{\mathcal{K}_{10}}(\mathcal{F}_{n-1})$, the Homological equation (34) can be written as

$$\mathcal{L}_{\mathcal{K}_0}(\mathcal{W}_n) + n \mathcal{L}_{\mathcal{K}_1}(\mathcal{F}_{n-1}) + \mathcal{K}_n = \overline{\mathcal{H}}_{0n}^\# \quad (41)$$

and, therefore, with the aid of relation (40), (35) yields

$$\mathcal{K}_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \widetilde{\mathcal{K}}_{0n}^\# d\varphi_1 - n \sum_{i=2}^m \frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial I_i} \frac{\partial \mathcal{F}_{n-1}}{\partial \varphi_i}. \quad (42)$$

With the same approach used in the study of the nondegenerated case, \mathcal{K}_n is taken as \mathcal{K}_n^I , which only depends on the momenta, and (36) becomes

$$\sum_{i=2}^m \frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial I_i} \frac{\partial \mathcal{F}_{n-1}}{\partial \varphi_i} = -\frac{1}{n} \mathcal{K}_n^{II}. \quad (43)$$

Moreover, \mathcal{K}_n^{II} can be written as

$$\mathcal{K}_n^{II} = \sum_{j_1, \dots, j_m \in \mathbb{Z}} \mathcal{E}_{j_1, \dots, j_m} \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} (j_2 \varphi_2 + \dots + j_m \varphi_m), \quad (44)$$

where the coefficients $\mathcal{E}_{j_2, \dots, j_m}$ are functions which depend on the momenta and the physical parameters of the initial Hamiltonian. Therefore, if we consider the nonresonant case, (43) can be solved directly and its solution is expressed as a Poisson series in the form

$$\mathcal{F}_{n-1} = \sum_{j_1, \dots, j_m \in \mathbb{Z}} \mathcal{E}'_{j_1, \dots, j_m} \begin{pmatrix} -\cos \\ \sin \end{pmatrix} (j_2 \varphi_2 + \dots + j_m \varphi_m), \quad (45)$$

with

$$\mathcal{E}'_{j_1, \dots, j_m} = \frac{-\mathcal{E}_{j_1, \dots, j_m}}{n(\nu_2 I_2 + \dots + \nu_m I_m)}, \quad (46)$$

where (ν_2, \dots, ν_m) represents the $m-1$ vector of fundamental frequencies of the first-order integrable Hamiltonian \mathcal{K}_1 :

$$\nu_i = \frac{\partial \mathcal{K}_1}{\partial I_i}. \quad (47)$$

After that, the value of \mathcal{F}_{n-1} is inserted into the previous calculations and the value of \mathcal{W}_n is obtained:

$$\mathcal{W}_n = \frac{1}{\omega} \int (\mathcal{K}_{0n} - \mathcal{K}_n) d\varphi_1 + \mathcal{F}_n. \quad (48)$$

The transformed Hamiltonian \mathcal{K} only depends on the momenta and hence is integrable by quadratures. In this situation, the arbitrary function can be seen as the generating function of a Lie transform, which allows to remove the remaining angular variables of the transformed Hamiltonian \mathcal{K} . It is worth noting that the so-called double normalization algorithm [17–19] is not a different algorithm, but the classical Deprit algorithm for the particular case $\mathcal{F}_n \neq 0$.

On the other hand, an equivalent Hamiltonian, which only depends on the momenta, can also be obtained by means of two Lie transforms: the first one, to remove the variable φ_1 and then the rest of the angular variables. In both Lie transforms the arbitrary integration functions are taken equal to zero.

We would like to point out that in the case that the terms \mathcal{K}_i are transformed into $\mathcal{K}_i = 0$ for $i \in \{1, \dots, p-1\}$, the Homological equation (34), which must be solved, is

$$\mathcal{L}_{\mathcal{K}_0}(\mathcal{W}_n) + \binom{n}{p} \mathcal{L}_{\mathcal{K}_p}(\mathcal{F}_{n-p}) + \mathcal{K}_n = \widetilde{\mathcal{K}}_{0n}^\#, \quad (49)$$

where the term \mathcal{W}_n is completed at order $n+p$. This formulation can be easily extended to other similar cases. For example, if the Hamiltonian has a high-order proper degeneracy, $\mathcal{K}_1(I_i), \dots, \mathcal{K}_p(I_p)$ only depend on the momenta; then the Homological equation (34), which must be solved, is

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\mathcal{K}_0}(\mathcal{W}_n) + \binom{n}{p} \mathcal{L}_{\mathcal{K}_p}(\mathcal{F}_{n-p}^i) + \dots + n \mathcal{L}_{\mathcal{K}_1}(\mathcal{F}_{n-1}^i) \\ + \mathcal{K}_n = \widetilde{\mathcal{K}}_{0n}^\# \end{aligned} \quad (50)$$

and allows removing several angular variables simultaneously, linking several transformations.

5. Application to Harmonic Oscillators

In order to provide the reader with a simple illustration of the machinery of the algorithm used by the Deprit's method in the case of $\mathcal{F}_n \neq 0$, we consider the first-order Hamiltonian system

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{K}_1, \quad (51)$$

where \mathcal{H}_0 is composed of two harmonic oscillators with equal frequencies, ω ,

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} (X^2 + \omega x^2) + \frac{1}{2} (Y^2 + \omega y^2), \quad (52)$$

which is coupled by a perturbation $\mathcal{K}_1 = \delta x^2 + yx^2 + y^3$, where δ represents a small detuning parameter and ε is a small parameter. These parameters ω , δ , and ε are independent of the system variables (x, y, X, Y) which are being used. It is worth mentioning that this kind of Hamiltonian frequently appears in the context of galactic dynamics [27, 28].

First, we convert the Hamiltonian (51) into a new one of type (1); we use Lissajous variables, which were introduced by Deprit in [21] and are defined by

$$\begin{aligned} x &= s \sin(\varphi_1 + \varphi_2), & X &= \omega s \cos(\varphi_1 + \varphi_2), \\ y &= d \sin(\varphi_1 - \varphi_2), & Y &= \omega d \cos(\varphi_1 - \varphi_2), \end{aligned} \quad (53)$$

where

$$s = \sqrt{\frac{I_1 + I_2}{\omega}}, \quad d = \sqrt{\frac{I_1 - I_2}{\omega}}. \quad (54)$$

In terms of Lissajous variables the unperturbed part \mathcal{H}_0 becomes

$$\mathcal{H}_0 = \omega I_1. \quad (55)$$

The perturbed part \mathcal{K}_1 takes the form

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_1 &= \frac{s^2 \delta}{2} - \frac{s^2 \delta}{2} \cos 2(\varphi_1 + \varphi_2) \\ &\quad + \frac{d(3d^2 + 2s^2)}{4} \sin(\varphi_1 - \varphi_2) \end{aligned}$$

6

Mathematical Problems in Engineering

$$\begin{aligned}
& -\frac{d^3}{4} \sin 3(\varphi_1 - \varphi_2) - \frac{ds^2}{4} \sin(3\varphi_1 + \varphi_2) \\
& + \frac{ds^2}{4} \sin(\varphi_1 + 3\varphi_2),
\end{aligned} \tag{56}$$

which is nondegenerate.

In order to transform the Hamiltonian \mathcal{H} into a new one independent of the angular variables up to third order, we consider two cases. First, only a Lie transform with $\mathcal{F}_n \neq 0$ is used. In the second case, two Lie transforms will be used to remove the angular variable φ_1 in first place and then φ_2 , both using $\mathcal{F}_n = 0$. To conclude, we compare the composition of these two Lie transforms with the one calculated in the first case. For the sake of nomenclature simplicity, the primes from the new variables and momenta will be dropped in all cases.

5.1. Case $\mathcal{F}_n \neq 0$. Using the algorithm described in Section 3, we carry out a Lie transform so that the transformed Hamiltonian \mathcal{H} is independent of the angular variables up to third order.

The method starts by taking

$$\mathcal{H}_0 = \omega I_1. \tag{57}$$

From (21) and (22) the first-order terms of the transformed Hamiltonian and generating function are given by

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_1 &= \frac{\delta s^2}{2}, \\
\mathcal{W}_1 &= -\frac{\delta s^2}{4\omega} \sin 2(\varphi_1 + \varphi_2) - \frac{(2s^2 + 3d^2)d}{4\omega} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\
&+ \frac{d^3}{12\omega} \cos 3(\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{s^2 d}{12\omega} \cos(3\varphi_1 + \varphi_2) \\
&- \frac{s^2 d}{4\omega} \cos(\varphi_1 + 3\varphi_2) + \mathcal{F}_1,
\end{aligned} \tag{58}$$

where \mathcal{F}_1 depends on the variable φ_2 and the momenta I_1, I_2 . This arbitrary function will be determined at the next order. It is worth noting that \mathcal{H}_1 is degenerate, it only depends on the momenta I_1 and I_2 , although \mathcal{W}_1 is not.

At second order, taking into account (29), the term \mathcal{H}_2 has the following expression:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_2 &= \frac{15d^4}{8\omega^2} - \frac{11s^2 d^2}{6\omega^2} - \frac{5s^4}{24\omega^2} - \frac{s^2 \delta^2}{2\omega^2} \\
&- \frac{s^2 d^2}{4\omega^2} \cos 4\varphi_2 - \frac{\delta}{\omega} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \varphi_2}.
\end{aligned} \tag{59}$$

The procedure for determining the arbitrary function \mathcal{F}_1 , as outlined by (30), takes \mathcal{H}_2^{II} as the part of (59) which depends on φ_2 ; then it follows that the identity (30) yields

$$\frac{s^2 d^2}{4\omega^2} \cos 4\varphi_2 + \frac{\delta}{\omega} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \varphi_2} = 0. \tag{60}$$

Then, after some calculations, the integration constant is given by

$$\mathcal{F}_1 = -\frac{s^2 d^2}{16\delta\omega} \sin 4\varphi_2. \tag{61}$$

By substituting (61) into (58), the first-order term \mathcal{W}_1 is completed and \mathcal{H}_2 yields

$$\mathcal{H}_2 = -\frac{15d^4}{8\omega^2} - \frac{11s^2 d^2}{6\omega^2} - \frac{5s^4}{24\omega^2} - \frac{s^2 \delta^2}{2\omega^2}, \tag{62}$$

which only depends on the momenta. The second-order term of the generating function is given by

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_2 &= \frac{5s^2 d^2}{48\omega^3} \sin 4\varphi_1 + \frac{(5d^2 + 6\delta^2 + s^2)s^2}{12\delta\omega^3} \sin 2(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&+ \frac{s^4}{96\omega^3} \sin 4(\varphi_1 + \varphi_2) \\
&+ \frac{(36d^2 + 17s^2)d^2}{48\delta\omega^3} \sin 2(\varphi_1 - \varphi_2) \\
&+ \frac{3d^4}{32\omega^3} \sin 4(\varphi_1 - \varphi_2) \\
&+ \frac{(3s^2 - 6d^2 + 112\delta^2)s^2 d}{96\delta\omega^3} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\
&+ \frac{s^2 d^3}{48\delta\omega^3} \cos 3(\varphi_1 - \varphi_2) \\
&+ \frac{(2d^2 + 28\delta^2 + s^2)s^2 d}{16\delta\omega^3} \cos(\varphi_1 + 3\varphi_2) \\
&+ \frac{s^2 d^3}{32\delta\omega^3} \cos(\varphi_1 - 5\varphi_2) \\
&- \frac{(9d^2 + 8\delta^2)s^2 d}{288\delta\omega^3} \cos(3\varphi_1 + \varphi_2) \\
&- \frac{s^4 d}{96\delta\omega^3} \cos(3\varphi_1 + 5\varphi_2) + \mathcal{F}_2,
\end{aligned} \tag{63}$$

where, as a first order, \mathcal{F}_2 depends on the variable φ_2 and all the momenta. This arbitrary function will be determined at the next order.

At third order, taking into account (29), the term \mathcal{H}_3 is determined as

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_3 &= -\frac{3d^4 s^2}{32\delta\omega^4} + \frac{3d^2 s^4}{32\delta\omega^4} + \frac{49\delta d^2 s^2}{6\omega^4} + \frac{11\delta s^4}{12\omega^4} + \frac{3\delta^3 s^2}{2\omega^4} \\
&+ \frac{d^2 s^2}{2\omega^4} \left(\frac{23d^2}{2\delta} + \frac{17s^2}{2\delta} + 19\delta \right) \cos 4\varphi_2 - \frac{3\delta}{2\omega} \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \varphi_2}.
\end{aligned} \tag{64}$$

By taking \mathcal{H}_3^{II} as the part that depends on φ_2 in (64), the identity (30) reads

$$\frac{(23d^2 + 38\delta^2 + 17s^2)s^2 d^2}{16\delta\omega^4} \cos 4\varphi_2 - \frac{3\delta}{2\omega} \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \varphi_2} = 0. \tag{65}$$

By solving (65), the integration constant is given by

$$\mathcal{F}_2 = \frac{(23d^2 + 38\delta^2 + 17s^2)s^2d^2}{96\delta^2\omega^3} \sin 4\varphi_2. \quad (66)$$

By substituting (66) into (63), the second-order term \mathcal{W}_2 is completed and \mathcal{K}_3 yields

$$\mathcal{K}_3 = \frac{3d^4s^2}{32\delta\omega^4} + \frac{3d^2s^4}{32\delta\omega^4} + \frac{49\delta d^2s^2}{6\omega^4} + \frac{11\delta s^4}{12\omega^4} + \frac{3\delta^3s^2}{2\omega^4}, \quad (67)$$

which, similarly, only depends on the momenta and, hence, is trivially integrable. The value of \mathcal{W}_3 is

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_3 = & -\frac{(33d^2 + 27s^2 + 700\delta^2)s^2d^2}{576\delta\omega^5} \sin 4\varphi_1 \\ & + \mathcal{P}_1 \sin 2(\varphi_1 + \varphi_2) \\ & - \frac{(21d^2 + 6s^2 + 166\delta^2)s^4}{576\delta\omega^5} \sin 4(\varphi_1 + \varphi_2) \\ & + \frac{s^6}{1152\delta\omega^5} \sin 6(\varphi_1 + \varphi_2) \\ & + \frac{(156d^2 + 99s^2 - 716\delta^2)s^2d^2}{288\delta\omega^5} \sin 2(\varphi_1 - \varphi_2) \\ & - \frac{s^2d^4}{64\delta\omega^5} \sin 4(\varphi_1 - \varphi_2) \\ & - \mathcal{P}_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \mathcal{P}_3 \cos 3(\varphi_1 - \varphi_2) \\ & + \frac{27d^5}{80\omega^5} \cos 5(\varphi_1 - \varphi_2) \\ & - \frac{41s^4d^2}{192\delta\omega^5} \sin 2(\varphi_1 + 3\varphi_2) - \mathcal{P}_4 \cos(\varphi_1 + 3\varphi_2) \\ & - \frac{47s^2d^4}{384\delta\omega^5} \sin 2(\varphi_1 - 3\varphi_2) \\ & + \frac{(23d^2 + 12s^2 - 100\delta^2)s^2d^3}{192\delta^2\omega^5} \cos(\varphi_1 - 5\varphi_2) \\ & - \frac{11s^4d^3}{192\delta^2\omega^5} \cos(\varphi_1 + 7\varphi_2) + \frac{s^4d^2}{192\delta\omega^5} \sin 2(3\varphi_1 + \varphi_2) \\ & + (621d^4 + (306s^2 + 2408\delta^2)d^2 \\ & \quad + 4\delta^2(89s^2 - 48\delta^2)) \frac{s^2d}{1728\delta^2\omega^5} \cos(3\varphi_1 + \varphi_2) \\ & + \frac{(103d^2 + 34s^2 + 92\delta^2)s^4d}{576\delta^2\omega^5} \cos(3\varphi_1 + 5\varphi_2) \\ & - \frac{23s^2d^5}{192\delta^2\omega^5} \cos(3\varphi_1 - 7\varphi_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \frac{97s^2d^3}{240\omega^5} \cos(5\varphi_1 - \varphi_2) \\ & + \frac{7s^4d}{80\omega^5} \cos(5\varphi_1 + 3\varphi_2) + \mathcal{F}_3, \end{aligned} \quad (68)$$

with

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_1 = & \frac{s^2}{1152\delta\omega^5} (-18d^4 + 64(3s^2 - 35\delta^2)d^2 + 21s^4 \\ & - 2304\delta^4 - 208s^2\delta^2), \\ \mathcal{P}_2 = & \frac{d}{576\delta^2\omega^5} (102s^6 + 3120\delta^2s^4 + 4480\delta^4s^2 \\ & - 12d^4(23s^2 - 945\delta^2) \\ & + d^2(11508s^2\delta^2 - 99s^4)), \\ \mathcal{P}_3 = & \frac{d^3}{576\delta^2\omega^5} (-125s^4 + 140\delta^2s^2 + d^2(720\delta^2 - 92s^2)), \\ \mathcal{P}_4 = & \frac{s^2d}{192\delta^2\omega^5} (253d^4 + (274s^2 + 960\delta^2)d^2 \\ & + 4(17s^4 + 67\delta^2s^2 + 688\delta^4)). \end{aligned} \quad (69)$$

Finally, by taking $\mathcal{F}_3 = 0$, the third-order theory is completed. It is worth noting that the process takes place within the Poisson algebra.

In this example, the performed Lie transform, taking into account the $\mathcal{F}_n \neq 0$ case in Deprit's method, removes both angular variables (φ_1, φ_2) at once. Then, the Hamilton's equation associated with the transformed Hamiltonian \mathcal{K} can be written as

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_1 = & \omega + \frac{\delta}{2\omega}\varepsilon - \frac{6\delta^2 + 27s^2 + 67d^2}{24\omega^3}\varepsilon^2 \\ & + \frac{-9d^4 + 144\delta^4 + 784\delta^2d^2 + 9s^4 + 960\delta^2s^2}{576\delta\omega^5}\varepsilon^3, \\ \dot{\varphi}_2 = & \frac{\delta}{2\omega}\varepsilon - \frac{6\delta^2 - 17s^2 - 23d^2}{24\omega^3}\varepsilon^2 \\ & + \frac{-9d^4 + 144\delta^4 + 4d^2(196\delta^2 + 9s^2) - 9s^4 - 608\delta^2s^2}{576\delta\omega^5}\varepsilon^3, \\ \dot{I}_1 = & 0, \\ \dot{I}_2 = & 0, \end{aligned} \quad (70)$$

which are easily integrated by quadratures.

5.2. Case $\mathcal{F}_n = 0$. Using the classical choice of \mathcal{F}_n in Deprit's algorithm, we present here the transformed Hamiltonians and the generating functions of two Lie transforms. The first Lie transform develops so as to remove the angular

8

Mathematical Problems in Engineering

variable φ_1 and the second transform does the same with the other angular variable φ_2 , so that the final Hamiltonian is independent of all the angular variables up to third order.

The first transformed Hamiltonian through third order in ε is

$$\mathcal{K}' = \mathcal{K}'_0 + \varepsilon \mathcal{K}'_1 + \frac{\varepsilon^2}{2} \mathcal{K}'_2 + \frac{\varepsilon^3}{3!} \mathcal{K}'_3, \quad (71)$$

where

$$\begin{aligned} \mathcal{K}'_0 &= \omega I, \\ \mathcal{K}'_1 &= \frac{\delta s^2}{2}, \\ \mathcal{K}'_2 &= -\frac{15d^4}{8\omega^2} - \frac{11d^2s^2}{6\omega^2} - \frac{5s^4}{24\omega^2} - \frac{\delta^2s^2}{2\omega^2} - \frac{d^2s^2}{4\omega^2} \cos 4\varphi_2, \\ \mathcal{K}'_3 &= \frac{49d^2\delta s^2}{6\omega^4} + \frac{11\delta s^4}{12\omega^4} + \frac{3\delta^3s^2}{2\omega^4} + \frac{11d^2\delta s^2}{4\omega^4} \cos 4\varphi_2, \end{aligned} \quad (72)$$

whereas the generating function yields

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}_1 + \varepsilon \mathcal{U}_2 + \frac{\varepsilon^2}{2} \mathcal{U}_3, \quad (73)$$

with

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_1 &= -\frac{\delta s^2}{4\omega} \sin 2(\varphi_1 + \varphi_2) - \frac{(3d^3 + 2ds^2)}{4\omega} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\ &\quad + \frac{d^3}{12\omega} \cos 3(\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{ds^2}{12\omega} \cos(3\varphi_1 + \varphi_2) \\ &\quad - \frac{ds^2}{4\omega} \cos(\varphi_1 + 3\varphi_2), \\ \mathcal{U}_2 &= \frac{5d^2s^2}{48\omega^3} \sin 4\varphi_1 + \frac{s^2(5d^2 + 6\delta^2 + s^2)}{12\omega^3} \sin 2(\varphi_1 + \varphi_2) \\ &\quad + \frac{s^4}{96\omega^3} \sin 4(\varphi_1 + \varphi_2) \\ &\quad + \frac{(9d^4 + 5d^2s^2)}{12\omega^3} \sin 2(\varphi_1 - \varphi_2) \\ &\quad + \frac{3d^4}{32\omega^3} \sin 4(\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{7\delta ds^2}{6\omega^3} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\ &\quad - \frac{\delta ds^2}{36\omega^3} \cos(3\varphi_1 + \varphi_2) + \frac{7\delta ds^2}{4\omega^3} \cos(\varphi_1 + 3\varphi_2), \\ \mathcal{U}_3 &= -\frac{359\delta d^2s^2}{288\omega^5} \sin 4\varphi_1 \\ &\quad - \frac{(140d^2 + 144\delta^2 + 13s^2)\delta s^2}{72\omega^5} \sin 2(\varphi_1 + \varphi_2) \\ &\quad - \frac{83\delta s^4}{288\omega^5} \sin 4(\varphi_1 + \varphi_2) - \frac{245\delta d^2s^2}{72\omega^5} \sin 2(\varphi_1 - \varphi_2) \\ &\quad - \frac{(2835d^4 + 3018d^2s^2 + 669s^4 + 1120\delta^2s^2)d}{144\omega^5} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\cdot \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \\ &\quad + \frac{45d^5 + 23d^3s^2}{36\omega^5} \cos 3(\varphi_1 - \varphi_2) \\ &\quad + \frac{27d^5}{80\omega^5} \cos 5(\varphi_1 - \varphi_2) \\ &\quad - \frac{(173d^2 + 688\delta^2 + 22s^2)ds^2}{48\omega^5} \cos(\varphi_1 + 3\varphi_2) \\ &\quad - \frac{11d^3s^2}{48\omega^5} \cos(\varphi_1 - 5\varphi_2) \\ &\quad + \frac{(101d^2 - 12\delta^2 + 29s^2)ds^2}{108\omega^5} \cos(3\varphi_1 + \varphi_2) \\ &\quad + \frac{d^4s^4}{18\omega^5} \cos(3\varphi_1 + 5\varphi_2) \\ &\quad + \frac{17d^3s^2}{40\omega^5} \cos(5\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{7d^4s^4}{80\omega^5} \cos(5\varphi_1 + 3\varphi_2). \end{aligned} \quad (74)$$

Then, the variable φ_2 is removed using a second Lie transform. The transformed Hamiltonian through third order in ε is

$$\mathcal{K}'' = \mathcal{K}''_0 + \varepsilon \mathcal{K}''_1 + \frac{\varepsilon^2}{2} \mathcal{K}''_2 + \frac{\varepsilon^3}{3!} \mathcal{K}''_3, \quad (75)$$

where

$$\begin{aligned} \mathcal{K}''_0 &= \omega I, \\ \mathcal{K}''_1 &= \frac{\delta s^2}{2}, \\ \mathcal{K}''_2 &= -\frac{15d^4}{8\omega^2} - \frac{11d^2s^2}{6\omega^2} - \frac{5s^4}{24\omega^2} - \frac{\delta^2s^2}{2\omega^2}, \\ \mathcal{K}''_3 &= -\frac{3d^4s^2}{32\delta\omega^4} + \frac{3d^2s^4}{32\delta\omega^4} + \frac{49\delta d^2s^2}{6\omega^4} + \frac{11\delta s^4}{12\omega^4} + \frac{3\delta^3s^2}{2\omega^4}, \end{aligned} \quad (76)$$

whereas the generating function is given by

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 + \varepsilon \mathcal{V}_2 + \frac{\varepsilon^2}{2} \mathcal{V}_3, \quad (77)$$

with

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_1 &= -\frac{d^2s^2}{16\delta\omega} \sin 4\varphi_2, \\ \mathcal{V}_2 &= \frac{(23d^2 + 38\delta^2 + 17s^2)d^2s^2}{96\delta^2\omega^3} \sin 4\varphi_2, \\ \mathcal{V}_3 &= 0. \end{aligned} \quad (78)$$

Note that, up to third order, the Hamiltonian \mathcal{K} , obtained by Deprit's method considering $\mathcal{F}_n \neq 0$, is identical to the Hamiltonian \mathcal{K}'' , which has been obtained after applying two Lie transforms, generated, respectively, by \mathcal{U} and \mathcal{V} , and

taking the arbitrary integration constant equal to zero. On the other hand, in order to relate the generating functions \mathcal{W} , \mathcal{U} , and \mathcal{V} , we consider the composition of the two previous Lie transforms taking into account the following identity:

$$\mathcal{T} = \mathcal{U} + \mathcal{L}_{\mathcal{U}}^{-1}(\mathcal{V}). \quad (79)$$

Then, we consider the difference between \mathcal{W} and \mathcal{T} up to third order. It is easy to check that $\mathcal{W}_1 - \mathcal{T}_1 = \mathcal{W}_2 - \mathcal{T}_2 = 0$, whereas at third order we obtain that

$$\mathcal{W}_3 - \mathcal{T}_3 = \frac{(-19d^2 - 9\delta^2 + s^2)d^2s^2}{288\delta\omega^5} \sin 4\varphi_2, \quad (80)$$

which is a function that belongs to $\ker(\mathcal{L}_{\mathcal{H}_0})$.

6. Conclusion

Deprit's method has been revisited so as to clarify and identify the role played by the intrinsic arbitrariness which appears in all perturbation techniques. This arbitrariness arises as an arbitrary integration function, when the generating function of the Lie transform is calculated from the Homological equation in Deprit's method. This function belongs to the kernel of the Lie transform. In the case of a degenerate Hamiltonian in Arnold's sense, this function allows removing the implicit terms belonging to the kernel of the Lie transform embedded in the generating function or can be used as the generator of a new transformation through which other angular variables can be removed. Moreover, other algorithms derived from Deprit's method, like the so-called double normalization, are put in the correct context and their relation with classical Deprit's method clarified. Finally, exactly the same reasoning can be applied to other techniques like Hori's method.

Conflict of Interests

The authors declare that there is no conflict of interests regarding the publication of this paper.

Acknowledgment

The authors would like to thank an anonymous reviewer for his/her valuable suggestions.

References

- [1] N. Krylov and N. N. Bogoliubov, *Introduction to Nonlinear Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, NJ, USA, 1947.
- [2] G. E. O. Giacaglia, "Notes on von Zeipel's method," Tech. Rep. X-547-64-161, Goddard Space Flight Center, 1964.
- [3] H. von Zeipel, "Recherches sur le mouvement des petits planètes," *Arkiv för Matematik, Astronomi och Fysik*, vol. 11, no. 1, pp. 12–13, 1916.
- [4] G. I. Hori, "Theory of general perturbations with unspecified canonical variables," *Publications of the Astronomical Society of Japan*, vol. 18, pp. 287–296, 1966.
- [5] G. I. Hori, "Theory of general perturbations for non-canonical systems," *Publications of the Astronomical Society of Japan*, vol. 23, pp. 567–587, 1971.
- [6] A. Deprit, "Canonical transformations depending on a small parameter," *Celestial Mechanics*, vol. 1, pp. 12–30, 1969.
- [7] H. Poincaré, "Les Méthodes Nouvelles de la Mécanique Céleste: Tome II," in *Méthodes de MM. Newcomb, Gylden, Lindstedt et Bohlén*, Gauthier-Villars, Paris, France, 1893.
- [8] A. H. Ahmed and B. D. Tapley, "Equivalence of the generalized Lie-Hori method and the method of averaging," *Celestial Mechanics*, vol. 33, no. 1, pp. 1–20, 1984.
- [9] W. A. Mersman, "Explicit recursive algorithms for the construction of equivalent canonical transformations," *Celestial Mechanics*, vol. 3, no. 3, pp. 384–389, 1971.
- [10] J. A. Morrison, "Generalized method of averaging and the von Zeipel method," in *Proceedings of the AIAA Astrodynamics Specialist Conference*, Paper No. 65-687, Monterey, Calif, USA, September 1965.
- [11] H. Shniad, "The equivalence of von Zeipel mappings and Lie transforms," *Celestial Mechanics*, vol. 2, no. 1, pp. 114–120, 1970.
- [12] N. Watanabe, "Equivalence of the method of averaging and the Lie transform," *Science Reports of the Tohoku Imperial University, First Ser.*, vol. 57, pp. 11–22, 1974.
- [13] K. T. Alfriend and S. L. Coffey, "Elimination of the perigee in the satellite problem," *Celestial Mechanics*, vol. 32, no. 2, pp. 163–172, 1984.
- [14] Y. Kozai, "Second-order solution of artificial satellite theory without air drag," *The Astronomical Journal*, vol. 67, no. 7, pp. 446–461, 1962.
- [15] M. Lara, J. F. San-Juan, and L. M. López-Ochoa, "Precise analytical computation of frozen-eccentricity, low earth orbits in a tesseral potential," *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2013, Article ID 191384, 13 pages, 2013.
- [16] M. Lara, J. F. San-Juan, and L. M. López-Ochoa, "Averaging tesseral effects: closed form relegation versus expansions of elliptic motion," *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2013, Article ID 570127, 11 pages, 2013.
- [17] C. Osácar, *Estudio del movimiento de sistemas estelares [Ph.D. Dissertation]*, Universidad de Zaragoza, Zaragoza, Spain, 1990.
- [18] J. Palacián, J. F. San Juan, and P. Yanguas, "Analytical theory for the spot satellite," *Advances in the Astronautical Sciences*, vol. 95, pp. 375–382, 1997.
- [19] J. F. Palacián and P. Yanguas, "Asymptotic invariant tori of perturbed two-body problems," *Journal of Symbolic Computation*, vol. 40, no. 4-5, pp. 1256–1268, 2005.
- [20] V. I. Arnold, "Small denominators and problems of stability of motion in classical and celestial mechanics," *Uspekhi Matematicheskikh Nauk*, vol. 18, no. 6, pp. 91–192, 1963.
- [21] A. Deprit, "The Lissajous transformation. I. Basics," *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 51, no. 3, pp. 201–225, 1991.
- [22] A. Elife and A. Deprit, "Oscillators in resonance," *Mechanics Research Communications*, vol. 26, no. 6, pp. 635–640, 1999.
- [23] M. Efroimsky and P. Goldreich, "Gauge symmetry of the N -body problem in the Hamilton-Jacobi approach," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 44, no. 12, pp. 5958–5977, 2003.
- [24] M. Efroimsky, "Gauge freedom in orbital mechanics," *Annals of the New York Academy of Sciences*, vol. 1065, pp. 346–374, 2005.
- [25] P. Gurfil, "Gauge theory for finite-dimensional dynamical systems," *Chaos*, vol. 17, no. 2, Article ID 023107, 2007.

- [26] G. Metris and P. Exertier, "Semi-analytical theory of the mean orbital motion," *Astronomy & Astrophysics*, vol. 294, pp. 278–286, 1995.
- [27] M. Hénon and C. Heiles, "The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments," *The Astronomical Journal*, vol. 69, pp. 73–79, 1964.
- [28] V. Lanchares, A. I. Pascual, J. Palacián, P. Yanguas, and J. P. Salas, "Perturbed ion traps: a generalization of the three-dimensional Hénon–Heiles problem," *Chaos*, vol. 12, no. 1, pp. 87–99, 2002.

Apéndice C

Artículo III

Deprit's Elimination of the Parallax Revisited

San-Juan, J. F., Ortigosa, D.,
López-Ochoa, L. M. and López, R.

The Journal of the Astronautical Sciences
2015

<http://dx.doi.org/10.1007/s40295-015-0033-5>

Apéndice D

Artículo IV

Astrody^{Web}_{Tools} an e-Science project
in Astrodynamics and
Celestial Mechanics fields

López, R. and San-Juan, J. F.

Computer Physics Communications
2013

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2013.01.003>

Bibliografía

- [1] Abad, A. and San-Juan, J. F., “PSPC: A Poisson Series Processor coded in C,” in *Proceedings of the Conference on Dynamics and Astrometry of Natural and Artificial Celestial Bodies*, Poznan, Poland, pp. 383–389, September 1993.
- [2] Abad, A. and San-Juan, J. F., “ATESAT: software tool for obtaining automatically ephemeris from analytical simplifications,” *Cahiers du Centre Européen de Géodynamique et de Séismologie*, vol. 10, Elipe, A. and Paquet, P., Eds., pp. 93–98, Conseil de L’Europe, Luxembourg, 1995.
- [3] Abad, A. and San-Juan, J. F., “Algebraic and symbolic manipulation of Poisson series,” *Journal of Symbolic Computation*, vol. 32, no. 5, pp. 565–572, 2001.
- [4] Abad, A., San-Juan, J. F. and Gavín, A., “Short term evolution of artificial satellites,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 79, no. 4, pp. 277–296, 2001.
- [5] Ahmed, A. H. and Tapley, B. D., “Equivalence of the generalized Lie-Hori method and the method of averaging,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 33, pp. 1–20, 1984.
- [6] Alameda, J. , Christie, M., Geoffrey, F., Futrelle, J., Gannon, D., Hategan, M., Kandaswamy, G., von Laszewski, G., Nacar, M. A., Pierce, M., Roberts, E., Severance, C. and Thomas, M., “The Open Grid Computing Environments collaboration: portlets and services for science gateways,” *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, vol. 19, no. 6, pp. 921–942, 2007.
- [7] Alfriend, K. T. and Coffey, S. L., “Elimination of the perigee in the satellite problem,” *Celestial Mechanics*, vol. 32, no. 2, pp. 163–172, 1984.
- [8] Arnol’d, V. I., “Small denominators and problems of stability of motion in classical and celestial mechanics,” *Russian Mathematical Surveys*, vol. 18, no. 6, pp. 85–191, 1963.

- [9] Biesecker, L. G., Shianna, K. V. and Mullikin, J. C., “Exome sequencing: the expert view,” *Genome Biology*, vol. 12, 128, 2011.
- [10] Birney, E., Stamatoyannopoulos, J. A., Dutta, A., Guigo, R., Gingeras, T. R., Margulies, E. H. et al., “Identification and analysis of functional elements in 1% of the human genome by the ENCODE pilot project,” *Nature*, vol. 447, pp. 799–816, 2007.
- [11] Breiter, S., “On the numerical transformation of variables in perturbation theory,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 65, no. 4, pp. 345–354, 1997.
- [12] Bogen, R., *MACSYMA Reference Manual*, Symbolics, Incorporated, 1986.
- [13] Bogoliubov, N. N. and Mitropolsky, Y. A., *Asymptotic Methods in the Theory of Non-Linear Oscillations*, Gordon and Breach, New York, NY, USA, 1961.
- [14] Bosma, W., Cannon, J. and Playoust, C., “The Magma algebra system I: The user language,” *Journal of Symbolic Computation*, vol. 24, no. 3, pp. 235–265, 1997.
- [15] Broucke, R. and Garthwaite, K., “A programming system for analytical series expansions on a computer,” *Celestial Mechanics*, vol. 1, no. 2, pp. 271–284, 1969.
- [16] Bush W. S. and Moore J. H., “Chapter 11: Genome-wide association studies,” *PLoS Computational Biology*, vol. 8, no. 12, 2012.
- [17] Caballero, J. A., *Movimiento de un satélite artificial bajo la acción gravitatoria terrestre. Teoría de segundo orden en variables de Hill [Ph.D. Thesis]*, University of Zaragoza, Spain, 1975.
- [18] Calvo, M., *Aplicación del método de promedios al estudio del movimiento de satélites artificiales [Ph.D. Thesis]*, University of Zaragoza, Spain, 1971.
- [19] Cayley, A., “Tables of the developments of functions in the theory of elliptic motion,” *Memoirs of the Royal Astronomical Society*, vol. 29, pp. 191–306, 1861.
- [20] Cefola, P. J., “Equinoctial orbit elements - Application to artificial satellite orbits,” in *Proceedings of the AAS/AIAA Astrodynamics Specialist Conference*, AIAA 72-937, Palo Alto, CA, USA, September 1972.

- [21] Cefola, P. J., Phillion, D. and Kim, K. S., “Improving access to the semi-analytical satellite theory,” in *Proceedings of the AAS/AIAA Astrodynamics Specialist Conference*, AAS 09-341, Pittsburgh, PA, USA, August 2009.
- [22] Cefola, P. J., Weeden, B. and Levit, C., “Open source software suite for space situational awareness and space object catalog work,” in *Proceedings of the 4th International Conference on Astrodynamics Tools and Techniques*, Madrid, Spain, May 2010.
- [23] Cefola, P. J., Maisonobe, L., Parraud, P. and Di Costanzo, R., “Semi-analytical satellite theory for everyone: an open-source implementation of the DSST model,” in *Proceedings of the 12th International Conference on Space Operations*, Stockholm, Sweden, June 2012.
- [24] Cefola, P. J., San-Juan, J. F., Maisonobe, L., Parraud, P. and Di Costanzo, R., “Semi-analytical satellite theory for the OREKIT open-source space flight dynamics library,” in *Proceedings of the 5th International Conference on Astrodynamics Tools and Techniques*, Noordwijk, The Netherlands, May–June 2012.
- [25] Char, B. W., *MAPLE Reference Manual*, Watcom Publications, 1988.
- [26] Cid, R. and Lahulla, J. F., “Perturbaciones de corto periodo en el movimiento de un satélite artificial, en función de las variables,” *Publicaciones de la Revista de la Academia de Ciencias de Zaragoza*, series 2, vol. 24, pp. 159–165, 1969.
- [27] Cid, R. and Lahulla, J. F., “Perturbaciones de segundo orden y corto periodo, para el movimiento de un satélite artificial, en las variables de Hill,” *Publicaciones de la Revista de la Academia de Ciencias de Zaragoza*, series 2, vol. 26, pp. 333–343, 1971.
- [28] Cid, R., Ferrer, S. and Sein-Echaluze, M. L., “On the radial intermediaries and the time transformation in satellite theory,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 38, pp. 191–205, 1986.
- [29] Coffey, S. L., Deprit, A., Deprit, E. and Healy, L., “Painting the phase space portrait of an integrable dynamical system,” *Science*, vol. 247, pp. 833–836, 1990.
- [30] Coffey, S. L., Deprit, A. and Deprit, E., “Frozen orbits for satellites close to an Earth-like planet,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 59, no. 1, pp. 37–72, 1994.
- [31] Coffey, A. J., Kokocinski, F., Calafato, M. S., Scott, C. E., Palta, P., Drury, E. et al., “The GENCODE exome: sequencing the complete

- human exome,” *European Journal of Human Genetics*, vol. 19, pp. 827–831, 2011.
- [32] Collins, S. K., *Long term prediction of high altitude orbits [Ph.D. Thesis]*, Department of Aeronautics and Astronautics, Massachusetts Institute of Technology, 1981.
- [33] Colwell, P., *Solving Kepler’s Equation over Three Centuries*, Willmann-Bell, Richmond, VA, USA, 1993.
- [34] Conway, B. A., “An improved algorithm due to Laguerre for the solution of Kepler’s equation,” *Celestial Mechanics*, vol. 39, no. 2, pp. 199–211, 1986.
- [35] Costa, A., Becciani, U., Miocchi, P., Antonuccio, V., Capuzzo Dolcetta, R., Di Matteo, P. and Rosato, V., “Astrocomp: web technologies for high performance computing on a network of supercomputers,” *Computer Physics Communications*, vol. 166, no. 1, pp. 17–25, 2005.
- [36] Coveney, P. V., Saksena, R. S., Zasada, S. J., McKeown, M. and Pickles, S., “The application hosting environment: lightweight middleware for grid-based computational science,” *Computer Physics Communications*, vol. 176, no. 6, pp. 406–418, 2007.
- [37] Danby, J. M. A. and Burkardt, T. M., “The solution of Kepler’s equation, I,” *Celestial Mechanics*, vol. 31, no. 2, pp. 95–107, 1983.
- [38] Danby, J. M. A., “The solution of Kepler’s equation, III,” *Celestial Mechanics*, vol. 40, no. 3–4, pp. 303–312, 1987.
- [39] Danielson, D. A., Neta, B. and Early, L. W., “Semianalytic satellite theory (SST): mathematical algorithms,” Tech. Rep. no. NPS-MA-94-001, Naval Postgraduate School, Monterey, CA, USA, 1994.
- [40] Das, S., Girard, L., Green, T., Weitzman, L., Lewis-Bowen, A. and Clark, T., “Building biomedical web communities using a semantically aware content management system,” *Briefings in Bioinformatics*, vol. 10, no. 2, pp. 129–138, 2008.
- [41] Deprit, A., Danby, J. M. A. and Rom, A., “The symbolic manipulation of Poisson series,” Tech. Rep., Boeing Scientific Research Laboratories Document, Seattle, WA, USA, 1965.
- [42] Deprit, A., “Canonical transformations depending on a small parameter,” *Celestial Mechanics*, vol. 1, no. 1, pp. 12–30, 1969.
- [43] Deprit, A., “Note on Lagrange’s inversion formula,” *Celestial Mechanics*, vol. 20, no. 4, pp. 325–327, 1979.

- [44] Deprit, A., “Celestial Mechanics: never say no to a computer,” *Journal of Guidance and Control*, vol. 4, pp. 577–581, 1981.
- [45] Deprit, A., “The elimination of the parallax in satellite theory,” *Celestial Mechanics*, vol. 24, no. 2, pp. 111–153, 1981.
- [46] Deprit, A. and Ferrer, S., “Simplifications in the theory of artificial satellites,” *The Journal of the Astronautical Sciences*, vol. 37, no. 4, pp. 451–463, 1989.
- [47] Deprit, A. and Deprit, E., “Processing Poisson series in parallel,” *Journal of Symbolic Computation*, vol. 10, no. 2, pp. 179–201, 1990.
- [48] Deprit, A., “The Lissajous transformation I. Basics,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 51, no. 3, pp. 201–225, 1991.
- [49] Dormand, J. R. and Prince, P. J., “Practical Runge-Kutta processes,” *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, vol. 10, no. 5, pp. 977–989, 1989.
- [50] Drupal Assoc., *Writing Secure Code*, 2006, <http://drupal.org/writing-secure-code>.
- [51] Early, L. W., “A portable orbit generator using semianalytical satellite theory,” in *Proceedings of the AIAA/AAS Astrodynamics Conference*, AIAA 86-2164-CP, Williamsburg, VA, USA, 1986.
- [52] Ficklin, S. P., Sanderson, L. A., Cheng, C. H., Staton, M. E., Lee, T., Cho, I. H., Jung, S., Bett, K. E. and Main, D., “Tripal: a construction toolkit for online genome databases,” *Database*, vol. 2011, Article ID bar044, 16 pages, 2011.
- [53] Fieger, M. E., *An evaluation of semianalytical satellite theory against long arcs of real data for highly eccentric orbits [M.S. Thesis]*, Department of Aeronautics and Astronautics, Massachusetts Institute of Technology, 1987.
- [54] Flicek, P., Amode, M. R., Barrell, D., Beal, K., Brent, S., Carvalho-Silva, D. et al., “Ensembl 2012,” *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp. 84–90, 2012.
- [55] Folcik, Z. J., *Orbit determination using modern filters/smoothers and continuous thrust modeling [M.S. Thesis]*, Department of Aeronautics and Astronautics, Massachusetts Institute of Technology, 2008.
- [56] Fonte, D. J., *Implementing a 50×50 gravity field model in an orbit determination system [M.S. Thesis]*, Department of Aeronautics and Astronautics, Massachusetts Institute of Technology, 1993.

- [57] Fuchssteiner, B. et al., *MuPAD User's Manual*, 1996.
- [58] Fukushima, T., "A fast procedure solving Kepler's equation for elliptic case," *The Astronomical Journal*, vol. 112, no. 6, pp. 2858–2861, 1996.
- [59] Giacaglia, G. E. O., "Notes on von Zeipel's method," Tech. Rep. no. X-547-64-161, Goddard Space Flight Center, Greenbelt, MD, USA, 1964.
- [60] GNU Octave, <http://www.gnu.org/software/octave/index.html>.
- [61] Gnuplot, <http://www.gnuplot.info>.
- [62] Gobernado, I., *Secuenciación de exoma completo en trastorno bipolar autosómico dominante: afectación del gen period3-ritmo circadiano [M.S. Thesis]*, Departamento de Medicina y Especialidades Médicas, Facultad de Medicina, Universidad de Alcalá.
- [63] Long, A. C., Cappellari, J. O., Velez, C. E. and Fuchs, A. J., "Goddard trajectory determination system (GTDS) mathematical theory revision 1," CSC/TR-89/6001, Computer Sciences Corporation, Lanham-Seabrook, MD, USA, 1989.
- [64] Goff, S. A., Vaughn, M., McKay, S., Lyons, E., Stapleton, A. E., Gessler, D., Matasci, N. et al., "The iPlant collaborative: cyberinfrastructure for plant biology," *Frontiers in Plant Science*, vol. 2, Article 34, 16 pages, 2011.
- [65] Hansen, P. A., "Entwicklung des products einer potenz des radius vector mit dem sinus oder cosinus eines vielfachen der wahren anomalie in reihen," *Abhandlungen der mathematischphysischen Classe der königlich Sächsischen Gesellschaft der Wissenschaften*, vol. 2, pp. 183–281, 1853.
- [66] Harismendy, O., Ng, P. C., Strausberg, R. L., Wang, X., Stockwell, T. B., Beeson, K. Y. et al., "Evaluation of next generation sequencing platforms for population targeted sequencing studies," *Genome Biology*, vol. 10, no. 3, 13 pages, 2009.
- [67] Healy, L. and Deprit, E., "Paint by number: uncovering phase flows of an integrable dynamical system," *Computers in Physics*, vol. 5, no. 5, pp. 491–496, 1991.
- [68] Hearn, A. C., "REDUCE: a user-oriented interactive system for algebraic simplification," in *Symposium on Interactive Systems for Experimental Applied Mathematics: Proceedings of the Association for Computing Machinery Inc. Symposium*, ACM, pp. 79–90, August 1967.
- [69] Henrard, J., "On a perturbation theory using Lie transforms," *Celestial Mechanics*, vol. 3, no. 1, pp. 107–120, 1970.

- [70] Herget, P. and Musen, P., "The calculation of literal expansions," *The Astronomical Journal*, vol. 64, pp. 11–20, 1959.
- [71] Hintz, G. R., "Survey of orbit element sets," *Journal of Guidance, Control, and Dynamics*, vol. 31, no. 3, pp. 785–790, 2008.
- [72] Hori, G. I., "Theory of general perturbations with unspecified canonical variables," *Publications of the Astronomical Society of Japan*, vol. 18, pp. 287–296, 1966.
- [73] Hori, G. I., "Theory of general perturbations for non-canonical systems," *Publications of the Astronomical Society of Japan*, vol. 23, pp. 567–587, 1971.
- [74] Jefferys, W. H., "A FORTRAN-based list processor for Poisson series," *Celestial Mechanics*, vol. 2, no. 4, pp. 474–480, 1970.
- [75] Jefferys, W. H., "A precompiler for the formula manipulation system TRIGMAN," *Celestial Mechanics*, vol. 6, no. 1, pp. 474–480, 1972.
- [76] Kamel, A. A., "Perturbation method in the theory of nonlinear oscillations," *Celestial Mechanics*, vol. 3, no. 1, pp. 90–106, 1970.
- [77] Kizner, W., "A high order perturbation theory using rectangular coordinates," *Proceedings of the AIAA Astrodynamics Conference*, AIAA 63-391, New Haven, CT, USA, August 1963.
- [78] Kozai, Y., "Second-order solution of artificial satellite theory without air drag," *The Astronomical Journal*, vol. 67, pp. 446–461, 1962.
- [79] Krylov, N. and Bogoliubov, N. N., *Introduction to Nonlinear Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, NJ, USA, 1947.
- [80] Kuhn, T., Willighagen, E. L., Zielesny, A. and Steinbeck, S., "CDK-Taverna: an open workflow environment for cheminformatics," *BMC Bioinformatics*, vol. 11, Article 159, 11 pages, 2010.
- [81] Kuhn, R. M., Haussler, D. and Kent, W. J., "The UCSC genome browser and associated tools," *Briefings in Bioinformatics*, vol. 14, no. 2, pp. 144–161, 2012.
- [82] Lara, M., "Searching for repeating ground track orbits: a systematic approach," *The Journal of the Astronautical Sciences*, vol. 47, pp. 177–188, 1999.
- [83] Lara, M. and San Juan, J. F., "Dynamic behavior of an orbiter around Europa," *Journal of Guidance, Control, and Dynamics*, vol. 28, no. 2, pp. 291–297, 2005.

- [84] Lara, M., San-Juan, J. F., López, L. M. and Cefola, P. J., “On the third-body perturbations of high-altitude orbits,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 113, no. 4, pp. 435–452, 2012.
- [85] Lara, M., San-Juan, J. F., López-Ochoa, L. M., “Precise analytical computation of frozen-eccentricity, low Earth orbits in a tesseral potential,” *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2013, Article ID 191384, 13 pages, 2013.
- [86] Lara, M., San-Juan, J. F. and López-Ochoa, L. M., “Averaging tesseral effects: closed form relegation versus expansions of elliptic motion,” *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2013, Article ID 570127, 11 pages, 2013.
- [87] L^AT_EX, <http://www.latex-project.org>.
- [88] Lemoine, F. G., Kenyon, S. C., Factim, J. K., Trimmer, R. G., Pavlis, N. K., Chinn, D. S., Cox, C. M., Klosko, S. M., Luthcke, S. B., Torrence, M. H., Wang, Y. M., Williamson, R. G., Pavlis, E. C., Rapp, H. and Olson, T. R., “The development of the joint NASA GSFC and the National Imagery and Mapping Agency (NIMA) Geopotential Model EGM 96,” NASA Tech. Pub. 1998-206861, Goddard Space Flight Center, Greenbelt, MD, USA, 1998.
- [89] Li, H., Handsaker, B., Wysoker, A., Fennell, T., Ruan, J., Homer, N. et al., “The Sequence Alignment/Map format and SAMtools,” *Bioinformatics*, vol. 25, no. 16, pp. 2078–2079, 2009.
- [90] Li, M. X., Gui, H. S., Kwan, J. S., Bao, S. Y. and Sham, P. C., “A comprehensive framework for prioritizing variants in exome sequencing studies of Mendelian diseases,” *Nucleic Acids Research*, vol. 40, no. 7, 8 pages, 2012.
- [91] López, R., San-Juan, J. F., López-Ochoa, L. M. and Lara, M., “Astrodynamics Web Tools: a collaborative web computing infrastructure project,” in *Proceedings of the 5th International Conference on Astrodynamics Tools and Techniques*, Noordwijk, The Netherlands, May–June 2012.
- [92] López, R. and San-Juan, J. F., “*Astrody^{Web}_{Tools}* an e-Science project in Astrodynamics and Celestial Mechanics fields,” *Computer Physics Communications*, vol. 184, pp. 1381–1386, 2013.
- [93] López, R., San-Juan, J. F., Íñiguez, M., San-Martín, M., Cabello, J. and Mirpuri, E., “Bioinformatics Web Tools an infrastructure to support e-Research and e-learning activities,” in *Proceedings of the 7th International Conference of Education, Research and Innovation*, Seville, Spain, November 2014.

- [94] Manuali, C., Laganá, A. and Rampino, S., “GriF: a Grid framework for a web service approach to reactive scattering,” *Computer Physics Communications*, vol. 181, no. 7, pp. 1179–1185, 2010.
- [95] McClain, W. D., “A recursively formulated first-order semianalytic artificial satellite theory based on the generalized method of averaging. Volume 1: The generalized method of averaging applied to the artificial satellite problem,” Computer Sciences Corporation, CSC/TR-77/6010, 1977. (An updated version of this document is available from W. D. McClain at the Draper Laboratory [the “blue book”]).
- [96] McLaughlin, C. A. and Feinstein, S. A., “Dynamic discretization method for solving Kepler’s equation,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 96, no. 1, pp. 49–62, 2006.
- [97] Mersman, W. A., “Explicit recursive algorithms for the construction of equivalent canonical transformations,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 3, no. 3, pp. 384–389, 1971.
- [98] Metzker, M. L., “Sequencing technologies - the next generation,” *Nature Reviews Genetics*, vol. 11, pp. 31–46, 2010.
- [99] Mooney, S. D. and Baenziger, P. H., “Extensible open source content management systems and frameworks: a solution for many needs of a bioinformatics group,” *Briefings in Bioinformatics*, vol. 9, no. 1, pp. 69–74, 2007.
- [100] Morrison, J. A., “Generalized method of averaging and the von Zeipel method,” *Progress in Astronautics and Aeronautics*, vol. 17, pp. 117–138, 1966.
- [101] Neelon, J. G., Cefola, P. J. and Proulx, R. J., “Current development of the Draper semianalytical satellite theory standalone orbit propagator package,” in *Proceedings of the AAS/AIAA Astrodynamics Conference*, AAS 97-731, Sun Valley, ID, USA, August 1997.
- [102] Newcomb, S., “A development of the perturbative function in cosines of multiples of the mean anomalies and of angles of multiples of the mean anomalies and of angles between the perihelia and common node and in powers of the eccentricities and mutual inclination,” *Astronomical paper*, vol. 5, pp. 1–48, US Nautical Almanac Office, Washington, USA, 1895.
- [103] Ng, E. W., “A general algorithm for the solution of Kepler’s equation for elliptic orbits,” *Celestial Mechanics*, vol. 20, pp. 243–249, 1979.

- [104] Ng, S. B., Turner, E. H., Robertson, P. D., Flygare, S. D., Bigam, A. W., Lee, C. et al., “Targeted capture and massively parallel sequencing of 12 human exomes,” *Nature*, vol. 461, pp. 272–276, 2009.
- [105] Nijenhuis, A., “Solving Kepler’s equation with high efficiency and accuracy,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 51, no. 4, pp. 319–330, 1991.
- [106] Odell, A. W. and Gooding, R. H., “Procedures for solving Kepler’s equation,” *Celestial Mechanics*, vol. 38, pp. 307–334, 1986.
- [107] Orekit, <http://www.orekit.org>.
- [108] Ortigosa, D., San-Juan, J. F., Pérez, I. and San-Martín, M., “Numerical validation of the Delaunay normalization and the Krylov-Bogoliubov-Mitropolsky method,” *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2014, Article ID 927975, 14 pages, 2014.
- [109] Osácar, C., *Estudio del movimiento de sistemas estelares [Ph.D. Thesis]*, University of Zaragoza, Spain, 1990.
- [110] Ouzounis, C. and Valencia, A., “Early bioinformatics: the birth of a discipline—a personal view,” *Bioinformatics*, vol. 19, no. 17, pp. 2176–2190, 2003.
- [111] Palacián, J., San-Juan, J. F., Yanguas, P., “Analytical theory for the Spot satellite,” *Advances in the Astronautical Sciences*, vol. 95, pp. 375–382, 1997.
- [112] Palacián, J., Yanguas, P., “Asymptotic invariant tori of perturbed two-body problems,” *Journal of Symbolic Computation*, vol. 40, pp. 1256–1268, 2005.
- [113] Palacios, M., “Kepler equation and accelerated Newton method,” *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 138, no. 2, pp. 335–346, 2002.
- [114] Papanicolaou, A. and Heckel, D. G., “The GMOD Drupal bioinformatic server framework,” *Bioinformatics*, vol. 26, no. 24, pp. 3119–3124, 2010.
- [115] Pascua, P., Rubio, J. L., Viartola, A. and Ferrer, S., “Visualizing relative equilibria and bifurcations by painting Hamiltonians on personal computers,” *International Journal of Bifurcation and Chaos*, vol. 6, no. 8, pp. 1411–1424, 1996.
- [116] Pérez, I., San-Juan, J. F., San-Martín, M. and López-Ochoa, L. M., “Application of computational intelligence in order to develop hybrid orbit propagation methods,” *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2013, Article ID 631628, 11 pages, 2013.

- [117] Pérez, I., *Aplicación de técnicas estadísticas y de inteligencia computacional al problema de la propagación de órbitas [Ph.D. Thesis]*, University of La Rioja, Spain, 2015.
- [118] Phan, V. and Malasri, K., “BioTDMS: a general-purpose system for integrative management of bioinformatics tools and data,” *International Journal of Computational Biology and Drug Design*, vol. 1, no. 2, pp. 174–184, 2008.
- [119] Poincaré, H., *Les Méthodes Nouvelles de la Mécanique Céleste. Tome II. Les Méthodes de MM*, Gauthier-Villars et Fils, Paris, France, 1893.
- [120] Pruitt, K. D., Tatusova, T., Brown, G. R. and Maglott, D. R., “NCBI Reference Sequences (RefSeq): current status, new features and genome annotation policy,” *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp. 130–135, 2012.
- [121] Robinson, J. T., Thorvaldsdóttir, H., Winckler, W., Guttman, M., Lander, E. S., Getz, G. et al., “Integrative Genomics Viewer,” *Nature Biotechnology*, vol. 29, pp. 24–26, 2011.
- [122] Robinson, P. N., Krawitz, P. and Mundlos, S., “Strategies for exome and genome sequence data analysis in disease-gene discovery projects,” *Clinical Genetics*, vol. 80, pp. 127–132, 2011.
- [123] Rom, A., “Mechanized algebraic operations (MAO),” *Celestial Mechanics*, vol. 1, no. 3–4, pp. 301–319, 1970.
- [124] San-Juan, J. F., “ATESAT: automatization of theories and ephemeris in the artificial satellite problem,” Tech. Rep. no. CT/TI/MS/MN/94-250, CNES, Toulouse, France, 1994.
- [125] San-Juan, J. F., *Manipulación algebraica de series de Poisson. Aplicación a la teoría del satélite artificial [Ph.D. Thesis]*, University of Zaragoza, Spain, 1996.
- [126] San-Juan, J. F., “ATESAT: review and improvements. Study of a family of analytical models of the artificial satellite generated by ATE-SAT and their numerical validation versus PSIMU and MSLIB,” Tech. Rep. no. DGA/T/TI/MS/MN/97-258, CNES, Toulouse, France, 1998.
- [127] San-Juan, J. F. and Serrano, S., “ATESAT: revisited and improvements. Analytical theory and numerical validation for a SPOT-like satellite,” Tech. Rep. no. DTS/MPI/MS/MN/2000-013, CNES, Toulouse, France, 2000.
- [128] San-Juan, J. F. and Serrano, S., “Application of the Z6PPKB ATE-SAT-model to compute the orbit of an artificial satellite around Mars,” Tech. Rep. no. DTS/MPI/MS/MN/2000-057, CNES, Toulouse, France, 2000.

- [129] San-Juan, J. F. and Abad, A., “Symbolic solution of Kepler’s generalized equation,” *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 2657, pp. 858–866, 2003.
- [130] San-Juan, J. F. and López, R., “*Astrody^{Web}_{Tools}*: Astrodynamics Web Tools,” in *Monografías de la Real Academia de Ciencias de Zaragoza. Actas de las XI Jornadas de Mecánica Celeste*, Lanchares, V. and Elipe, A., Eds., Zaragoza, Spain, 2009.
- [131] San-Juan, J. F., López, R. and Pérez, I., “Nonlinear Dynamics Web Tools,” in *Proceedings of the 4th International Conference on Astrodynamics Tools and Techniques*, Madrid, Spain, May 2010.
- [132] San-Juan, J. F., Lara, M., López, R., López-Ochoa, L. M., Folcik, Z., Weeden, B. and Cefola, P. J., “Using the DSST semi-analytical orbit propagator package via the NonDyWebTools/AstroDyWebTools open science environment,” in *Proceedings of the 62nd International Astronautical Congress*, Cape Town, South Africa, October 2011.
- [133] San-Juan, J. F., López, L. M. and López, R., “MathATESAT: A symbolic-numeric environment in Astrodynamics and Celestial Mechanics,” *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 6783, no. 2, pp. 436–449, 2011.
- [134] San-Juan, J. F., Gavín, A., López, L. M. and López, R., “PPKBZ9^{A,SA} Two orbit propagators based on an analytical theory,” *The Journal of the Astronautical Sciences*, vol. 58, no. 4, pp. 643–660, 2011.
- [135] San-Juan, J. F., Ortigosa, D. and San-Martín, M., “Parallel Evaluation of Poisson Series,” *Advances in the Astronautical Sciences*, vol. 140, pp. 873–888, 2011.
- [136] San-Juan, J. F., San-Martín, M. and Pérez, I., “An economic hybrid J_2 analytical orbit propagator program based on SARIMA models,” *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2012, Article ID 207381, 15 pages, 2012.
- [137] San-Juan, J. F., López, R. and Hautesserres, D., “On solving a generalization of the Kepler Equation,” in *Proceedings of the 25th AAS/AIAA Space Flight Mechanics Meeting*, AAS 15-206, Williamsburg, VA, USA, January 2015.
- [138] San-Juan, J. F., López, R., Pérez, I. and San-Martín, M., “A note about certain arbitrariness in the solution of the homological equation in Deprit’s method,” *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2015, Article ID 982857, 10 pages, 2015.

- [139] San-Juan, J. F., Ortigosa, D., López-Ochoa, L. M. and López, R., “Deprit’s elimination of the parallax revisited,” *The Journal of the Astronautical Sciences*, vol. 60, no. 2, pp. 137–148, 2015.
- [140] San-Martín, M., *Métodos de propagación híbridos aplicados al problema del satélite artificial. Técnicas de suavizado exponencial [Ph.D. Thesis]*, University of La Rioja, Spain, 2014.
- [141] Schroeder, R., “e-Sciences as research technologies: reconfiguring disciplines, globalizing knowledge,” *Social Science Information*, vol. 47, no. 2, pp. 131–157, 2008.
- [142] Serafin, R. A., “Bounds on the solution to Kepler’s equation,” *Celestial Mechanics*, vol. 38, pp. 111–121, 1986.
- [143] Shniad, H., “The equivalence of von Zeipel mappings and Lie transforms,” *Celestial Mechanics*, vol. 2, no. 1, pp. 114–120, 1970.
- [144] Singleton, A. B., “Exome sequencing: a transformative technology,” *The Lancet Neurology*, vol. 10, pp. 942–946, 2011.
- [145] Smith, G. R., “A simple, efficient starting value for the iterative solution of Kepler’s equation,” *Celestial Mechanics*, vol. 19, pp. 163–166, 1979.
- [146] Sutor, R. S., “The Scratchpad II computer algebra language and system,” *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 204, pp 32–33, 1985.
- [147] Taff, L. G. and Brennan, T. A., “On solving Kepler’s equation,” *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, vol. 46, no. 2, pp. 163–176, 1989.
- [148] The R Project for Statistical Computing, <http://www.r-project.org>.
- [149] Traub, J. F., *Iterative Methods for the Solution of Equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1964.
- [150] Vallado, D. A., *Fundamentals of Astrodynamics and Applications*, 4th Ed., Microcosm, Hawthorne, CA, USA, 2013.
- [151] Voelkerding, K. V., Dames, S. A. and Durtschi, J. D., “Next-generation sequencing: from basic research to diagnostics,” *Clinical Chemistry*, vol. 55, no. 4, pp. 641–658, 2009.
- [152] Watanabe, N., “Equivalence of the method of averaging and the Lie transform,” *Science Reports of the Tohoku Imperial University*, First Ser., vol. 57, pp. 11–22, 1974.

- [153] Wolfram, S., *The Mathematica Book*, Cambridge University Press and Wolfram Research, Inc., New York, NY, USA, 2000.
- [154] Zasada, S. J. and Coveney, P. V., “Virtualizing access to scientific applications with the application hosting environment,” *Computer Physics Communications*, vol. 180, no. 12, pp. 2513–2525, 2009.