Estimación práctica del error. Integración a paso variable. Pares encajados

Guión de la práctica:

En esta práctica implementaremos en MATLAB pares encajados de métodos Runge-Kutta (RK) para resolver el problema de valor inicial (PVI)

$$\begin{aligned} &u'(t) = f(t, u(t)), \qquad t \in (t_0, T), \\ &u(t_0) = u_0 \end{aligned}$$

Pares Encajados

Un par encajado de métodos RK de s etapas y órdenes p(q) es un par de métodos con la misma matriz de coeficientes A y distintos pesos b y $\widehat{b}$ con órdenes p y q respectivamente, representándose en tabla de Butcher como

$$\begin{array}{c|c} \mathrm{c} & \mathrm{A} \\ \hline & b^T \\ \hline & \widehat{b}^T \end{array}$$

Explícitamente:

$$\begin{aligned} K_i =& f(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} K_j) \\ y_{n+1} =& y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i K_i \\ \widehat{y}_{n+1} =& y_n + h \sum_{i=1}^{s} \widehat{b}_i K_i \end{aligned}$$

Observaciones:

- Nos centraremos en los pares encajados de métodos explícitos, aunque se puedo aplicar todo al caso de métodos implícitos
- Normalmente $q = p - 1$ o $q = p + 1$
- Al tener la misma matriz A, las etapas solo se calculan una vez
- Observese que no son dos métodos independientes, sino que ambos parten del punto anterior del mismo (t_n, y_n).

Guión de programación:

1. Se calculan las etapas K_i, $i = 1, \ldots, s$.

2. Se computa la fórmula de avance y_{n+1}.
3. Considerando que el error local relativo sea de un número de cifras $rTol$, definimos la tolerancia local que vamos a exigir como
$$tol = rTol * \max(\|y_n\|, \|y_{n+1}\|)$$
Se toma
$$est = y_{n+1} - \widehat{y}_{n+1} = h \sum_{i=1}^{s} (\widehat{b}_i - b_i) K_i.$$
4. Si $\|est\| < h * tol$ se acepta el paso h y se sigue avanzando al siguiente paso, se calcula (t_{n+1}, y_{n+1}) según la fórmula de avance del método y se propone $h_{new} > h$ para el paso siguiente $(t_{n+1} \to t_{n+2})$.
5. Si $\|est\| \geq h * tol$ se rechaza el paso h y se busca $h^* < h$ para el paso $t_n \to t_{n+1}$.

Previsión de paso tras un paso aceptado

Hemos calculado (t_{n+1}, y_{n+1}) y $est \leq tol$. Consideramos
$$h_{new} = rh, \quad r \in (0, r_0],$$
donde r se llama razón de cambio de paso,
$$r = \alpha \left(\frac{h * tol}{est} \right)^{\frac{1}{p}}.$$
Aquí $\alpha = 0.8$ ó 0.9 ó 0.95 ó 0.99 es un factor de seguridad que se introduce para evitar que el proximo paso sea rechazado y r_0 es la máxima razón de paso posible.

Reducción de paso tras un paso rechazado

Hemos calculado (t_{n+1}, y_{n+1}) pero $est > tol$, por lo que se rechaza este h y se busca un nuevo $h^* < h$ para el mismo paso $t_n \to t_{n+1}$. Consideramos
$$h^* = r^* h, \qquad \text{con } r^* = \alpha \left(\frac{h * tol}{est} \right)^{\frac{1}{p}}.$$

La función a construir es la siguiente:

```
function [u,t,no,ha,tol_r]=par_RK(f,T,t0,u0,bp,bq,p,c,A,rTOL,alpha)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%  Esta función resuelve el problema de valor inicial
%       u'=f(t,u)
%       u(t0)=u0
% utilizando para la estimación del error local pares encajados p(q)
% de métodos Runge-Kutta
%
%     [u,t,no,ha,tol_r]=par_RK(f,T,t0,u0,bp,bq,p,c,A,rTOL,aTOL)
%
%  Variables de Entrada:
%
%       f: vector columna. función que rige el sistema de EDO,
%          tiene dos argumentos f(t,u) donde t es escalar
%          y u vector columna.
```

```
%       t0: tiempo inicial
%       T:  tiempo final
%       u0: vector columna. Dato inicial
%       bp,bq,c,A: coeficientes del tablero de BUTCHER para los pares
%                  encajados bp, bq
%                  A: matriz cuadrada de orden s.
%                  bp, bq: vectores fila de orden s.
%                  c: vector columna de orden s.
%       p: orden del método de avance asociado a bp.
%       rTOL: tolerancia relativa
%       alpha: parámetro de control de paso
%
%  Variables de Salida:
%
%       u: matriz de length(u0) x length(tiempo) que contiene la solución
%       t: vector de tiempos
%       no: Numero de pasos rechazados
%       ha: tamaño de los pasos aceptados
%       tol_r: valores de la tolerancia
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

Tableros de Butcher para los pares encajados que usaremos:

- Método implementado en Matlab, ode23:

0	0	0	0
1	1	0	0
1/2	1/4	1/4	0
y_{n+1}	1/6	1/6	2/3
$\hat{y}_{n+1}$	-1/6	-1/6	4/3

- Par de Chescino 2(4) (1962):

0	0	0	0	0
1/4	1/4	0	0	0
1/2	0	1/2	0	0
1	1	-2	2	0
y_{n+1}	1	-2	2	0
$\hat{y}_{n+1}$	1/6	0	4/6	1/6

- Pares encajados de Fehlberg (1969) RKF4(5)

0	0	0	0	0	0	0
2/9	2/9	0	0	0	0	0
1/3	1/12	1/4	0	0	0	0
3/4	69/128	-243/128	135/64	0	0	0
1	-17/12	27/4	-27/5	16/15	0	
5/6	65/432	-5/16	13/16	4/27	5/144	0
y_{n+1}	1/9	0	9/20	16/45	1/12	0
$\hat{y}_{n+1}$	47/450	0	16/25	32/225	1/30	6/25

Comentarios: Para realizar esta práctica se puede implementar todas las funciones o ficheros .m auxiliares que se necesiten aparte de los citados aquí.

Ejercicios:

1. Considerar el problema de valor inicial siguiente: En el intervalo $[0, 10]$,

$$\left\{ \begin{array}{l} u' = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} u + \begin{bmatrix} 2\sin(t) \\ 2(\cos(t) - \sin(t)) \end{bmatrix} \\ u(0) = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \end{array} \right. \tag{1}$$

   (a) Resolver el problema utilizando los pares encajados descritos anteriormente.

   (b) Calcular la solución numérica del PVI con varios datos iniciales y representar conjuntamente las trayectorias obtenidas.

   (c) Representar gráficamente con los diferentes tablero de butcher:

      i. Las componentes de la solución del problema de valor inicial.

      ii. Los valores de h de aceptados.

      iii. Los valores del error local estimado, el valor de $rTOL$ dado y los valores de TOL utilizados en *parRK*.

   (d) Calcula el porcentaje de pasos aceptados y rechazados y el tamaño de paso medio.

2. Consideremos el sistema autónomo conocido con el nombre de "Brusselator" para $t \in [0, 20]$

$$\left\{ \begin{array}{l} x' = 1 + x^2 y - 4x \\ y' = 3x - x^2 y \end{array} \right. \tag{2}$$

   con condición inicial

$$x(0) = 3/2, \qquad y(0) = 3.$$

   Este sistema aparece como modelo de ciertas reacciones químicas multimoleculares.

   (a) Resolver el problema utilizando los pares encajados descritos anteriormente.

   (b) Calcular la solución numérica del PVI con varios datos iniciales y representar conjuntamente las trayectorias obtenidas.

   (c) Representar gráficamente con los diferentes tablero de butcher:

      i. Las componentes de la solución del problema de valor inicial.

      ii. Los valores de h de aceptados.

      iii. Los valores del error local estimado, el valor de $rTOL$ dado y los valores de TOL utilizados en *parRK*.

   (d) Calcula el porcentaje de pasos aceptados y rechazados y el tamaño de paso medio.