Universidad de Concepción
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Departamento de Ingeniería Matemática

Laboratorio 7: Problemas de Valores Iniciales (Parte I)
Cálculo Numérico (521230)

Observaciones

- En esta guía se plantean dos problemas. El segundo se resuelve en el video asociado al laboratorio. El primer problema debes entregarlo.
- **Todos los archivos `.m` pueden ser descargados de Canvas.**
- Te recomendamos leer esta guía antes de ver el video de resolución del problema.

En este primer laboratorio sobre Problemas de Valores Iniciales (PVI) utilizaremos los métodos de Euler, explícito e implícito (lea observación al final del problema resuelto en video).

Problema a entregar: Francesco Petrarca fue un poeta, filósofo y filólogo italiano, considerado el precursor del humanismo. De él se escribe el siguiente párrafo en Wikipedia: *El 6 de abril de 1327, viernes santo, vió por primera vez a Laura, la mujer que idealizaría en sus poemas, en Aviñón. Poco se sabe de ella, aunque es muy posible que fuese la dama Laure de Noves, casada con un antepasado del marqués de Sade. Por ella sintió una pasión pura y constante, como la que Dante Alighieri había sentido por Beatrice Portinari, la Bice de La Divina Comedia.*
El siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, propuesto por S. Rinaldi en un artículo en la revista *SIAM Journal on Applied Mathematics*, modela la influencia del amor hacia Laura en la inspiración del poeta,

$$\begin{aligned} L'(t) &= -3.6L + 1.2\left(P(1-P^2) - 1\right), \\ P'(t) &= -1.2P + 6\left(L + \frac{2}{1+Z}\right), \\ Z'(t) &= -0.12Z + 12P. \end{aligned}$$

En el sistema anterior, $L(t)$ representa el amor de Laura hacia Francesco t años después de conocerse, P es el amor de Francesco hacia Laura y Z es el nivel de inspiración de Francesco. Deseamos resolver este PVI para $t \in [0, 21]$ y $L(0) = P(0) = Z(0) = 0$.
Descargue de la página Canvas del curso el rutero `francesco.m`. En él:

1) complete las líneas para definir el PVI. Observe que, una vez que el PVI esté definido, llamando a la función Octave `ode45` se construye una solución de referencia para el PVI y se grafican, en figuras diferentes, los pares (t, L), (t, P) y (t, Z) de esta solución de referencia.
2) resuelva el sistema anterior con el método de Euler explícito y tamaño de paso 0.1. Observe que con este tamaño de paso el método de Euler explícito entrega una aproximación con valores `NaN` (Not a Number) en algunas componentes.
3) Resuelva el problema con el método de Euler explícito y tamaño de paso 0.005. Grafique, junto a la componente 1 de la solución de referencia, la componente 1 de la aproximación obtenida con el método de Euler, en colores distintos. Haga lo mismo con las componentes 2 y 3. Observe que, a pesar de que con $h = 0.1$ no es posible calcular, con Euler explícito, una aproximación a la solución exacta del problema, cuando $h = 0.005$ la aproximación calculada es muy cercana a la solución de referencia.
4) En Wikipedia dice que *Francesco sintió hacia Laura una pasión pura y constante.* ¿Refleja este modelo la propiedad constante de la pasión de Francesco hacia Laura?

Forma de entrega: Archivo `francesco.m` modificado.

Problema resuelto en video: El siguiente es el esquema de una reacción química

$$\begin{array}{ccccccc} \mathrm{A} & + & \mathrm{C} & \longrightarrow & \mathrm{S} & & \\ \mathrm{S} & + & \mathrm{B} & \longrightarrow & \mathrm{P} & + & \mathrm{C}. \end{array}$$

En ella los compuestos denotados por A y B reaccionan para formar P. Esta reacción ocurre en presencia de un catalizador C, la formación de S es consecuencia del catalizador.
Denotando por $[X](t)$, la concentración de X en el instante de tiempo t de la reacción, (X puede ser A, B, P, C o S, $t \geq 0$) y suponiendo que en cada paso de la reacción anterior las concentraciones de las sustancias cambian de forma proporcional al producto de las concentraciones de las reactantes, éstas pueden modelarse por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias,

$$[\mathrm{A}]'(t) = -k_1[\mathrm{A}](t)\left(C_0 - [\mathrm{B}](t) + [\mathrm{A}](t)\right), \tag{1.1a}$$

$$[\mathrm{B}]'(t) = -k_2[\mathrm{B}](t)\left([\mathrm{B}](t) - [\mathrm{A}](t)\right), \tag{1.1b}$$

que modela las concentraciones de las sustancias A y B para todo $t \in [0, T]$ con $[\mathrm{A}](0) = [\mathrm{B}](0) = A_0$, mientras que, una vez determinadas éstas, las concentraciones de C, S y P satisfacen

$$[\mathrm{C}](t) = [C](0) - [\mathrm{S}](t), \qquad [\mathrm{S}](t) = [\mathrm{A}](t) - [\mathrm{B}](t), \qquad [\mathrm{P}](t) = A_0 - [\mathrm{B}](t).$$

Por último, introduciendo el cambio de variables

$$\alpha = \frac{[\mathrm{A}]}{A_0}, \qquad \beta = \frac{[\mathrm{B}]}{A_0}, \qquad \kappa = \frac{k_2}{k_1}, \qquad \lambda = \frac{C_0}{A_0}$$

se tiene el siguiente PVI que es el que queremos resolver con los métodos de Euler aprendidos este semestre

$$\alpha' = -\alpha\left(\lambda - \beta + \alpha\right), \qquad \alpha(0) = 1, \tag{1.2a}$$

$$\beta' = -\kappa\beta\left(\beta - \alpha\right), \qquad \beta(0) = 1, \qquad t \in [0, T]. \tag{1.2b}$$

Fijemos $\kappa = 1$ y estudiemos el comportamiento del método para $\lambda \in \{10, 1, 0.1, 0.01\}$. Para $\lambda = 10$ fijemos $T = 100$ y a medida que disminuyamos el valor de λ a un décimo del valor anterior dupliquemos el de T. Esto lo hacemos porque el valor de λ es proporcional a la concentración inicial del catalizador y, a medida que esta concentración disminuye, las concentraciones de A y B durante la reacción disminuyen más lentamente.

1) Para cada uno de los pares de valores (λ, T), resuelva (1.2) con el método de Euler explícito y $h = 0.1$.
2) Grafique, en figuras distintas, los pares (t, α), (t, β) y (α, β).

Con los gráficos obtenidos debe observar lo siguiente:

- *A medida que t crece las concentraciones de A y B disminuyen,*
- *para mayores valores de λ (que es equivalente a mayor concentración inicial del catalizador), las concentraciones de A y B decaen más rápidamente a cero,*
- *para menores valores de λ el gráfico (α, β) es similar a una recta indicando que las concentraciones de A y B decaen con la misma rapidez,*
- *para valores mayores de λ la concentración de A disminuye más rápidamente que la de B.*

Estudiemos ahora el comportamiento del método de Euler explícito para la solución de este problema.

3) Resuelva (1.2) con $\lambda \in \{10, 0.01\}$ y los correspondientes valores de T con el método de Euler explícito y $h = 0.2$. Para $\lambda = 10$ debe observar que las aproximaciones que se obtienen son muy diferentes de las obtenidas con $h = 0.1$.
4) Resuelva (1.2) con $\lambda = 10$, $T = 100$ con el método de Euler implícito tomando $h = 0.2$. ¿Tiene el método un comportamiento similar o mejor al del método de Euler explícito con el mismo tamaño de paso? ¿Son las aproximaciones que se obtienen similares a las obtenidas con Euler explícito y $h = 0.1$?
5) ¿Obtiene también con el método de Euler implícito y $h = 1$ aproximaciones a la solución de (1.2) similares a las obtenidas con Euler explícito y $h = 0.1$?

Observación: En este problema se ha utilizado, además del método de Euler explícito, explicado en los videos publicados el 25 de noviembre, el método de Euler implícito. También se ha mencionado que para algunos valores de λ el problema a resolver es *stiff*. Por el momento es importante que comprendan cómo utilizar el método de Euler explícito para resolver problemas de valores iniciales y cuáles son sus propiedades. La próxima semana, cuando hayamos publicado el material correspondiente a Euler implícito y problemas stiff, podrán volver a revisar este video.