UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
MÈTODES NUMÈRICS, ENGINYERIA QUÍMICA

Llista 7: Solucions aproximades i estudi qualitatiu

1. Calculeu el desenvolupament en sèrie de potències (termes de grau més baix, equació de recurrència i radi de convergència de la sèrie) per les equacions

(i) $y'' - 2xy' + y = 0$ en $x = 0$.
(ii) $y'' - 2xy' + y = \sin(x)$ en $x = 0$.
(iii) $x^2y' + y = 0$ en $x = 1$.
(iv) $y'' - \frac{\sin(x)}{x}y' + 4y = 0$ en $x = 0$.

2. Identifiqueu els punts singulars i regulars en les següents edos lineals:

(i) $y'' + (x^2 - 1)y' - (x^3 - x)y = 0$.
(ii) $\cos(2x)y''' - y' = 2x$.
(iii) $\sin(x)y' - xy = 0$.
(iv) $y'' - \frac{x}{x-1}y' + \frac{e^2x}{x}y = -2$.

3. Trobeu el desenvolupament en sèrie de potències de $x + 1$ de la solució del problema de valors inicials

$$(x^2 - x)y'' - (x^2 + x - 1)y' + (2x - 1)y = 0\,, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 1$$

Podem desenvolupar en sèrie de potències de x la solució?

4. Creeu una funció de Matlab `yf=euler(f,a,b,y0,n)` que calculi el valor aproximat en $x = b$ de la solució $y(x)$ del problema de valors inicials $y' = f(x, y)$, $y(a) = y_0$, aplicant el mètode d'Euler amb n passos.

Feu que la vostra funció serveixi per equacions o per sistemes, amb $y : [a, b] \to \mathbb{R}^n$ per n qualsevol.

5. Apliqueu la funció `euler` del problema anterior al càlcul de $y(2\pi)$ per la solució del PVI del pèndol $y'' + \sin(y) = 0$, amb $y(0) = 0, y'(0) = 0.1$. Aneu doblant el nombre de passos fins que la diferència entre els dos càlculs consecutius sigui menor que `5e-6`, i compareu el valor obtingut amb el de la solució de l'equació de l'oscil·lador harmònic $y'' + y = 0$.

6. *(el control de pas)* Creeu una funció de Matlab `yf=rk4(f,a,b,y0,m)` que calculi el valor aproximat en $x = b$ de la solució $y(x)$ del problema de valors inicials $y' = f(x, y)$, $y(a) = y_0$, aplicant el mètode de Runge–Kutta amb m passos.

Feu una segona funció `yf=rk14(f,a,b,y0,tol)` per calcular el valor $y(b)$ de la següent manera:

- El pas inicial és $h = \sqrt{tol}$.
- La funció calcula l'aproximació $\bar{y}(x_n + h)$ amb la funció `rk4` amb un sol pas, i la guarda a `y4`.
- Després calcula $\bar{y}(x_n + h)$ amb la funció `euler` amb 4 passos, i la guarda en `y1`.
- Si es compleix $|y_4 - y_1| < tol$ fem $x_{n+1} = x_n + h, y_{n+1} = y_4$, multipliquem el pas h per 1.25 i repetim el procés per calcular x_{n+2}, y_{n+2}.
- En canvi, si $|y_4 - y_1| \geq tol$ descartem el càlcul d'aquest pas, multipliquem h per 0.5 i tornem a intentar calcular x_{n+1}, y_{n+1}.

Feu que el marge d'error sigui 10^{-6} per defecte, i que quan $x_n + h > b$ la funció reemplaci h per $b - x_n$.

Feu anar la vostra funció `rk14` per calcular la integral definida

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} x \, \frac{\cos(x)}{\sin(x)} \, dx$$

Indicació: Calcular la integral definida $\int_a^b f(x)dx$ equival a resoldre el PVI $y' = f(x), y(a) = 0$.

7. Dieu quins dels següents problemes de valors inicials són estables i quins inestables:

(i) $y' = (2x - 1)y + \sin(x), \quad y(0) = -2.$
(ii) $y' = \frac{1}{x}y + x^2, \quad y(0.1) = -0.5.$
(iii) $y' = e^{-x^2-y^2}, \quad y(0) = 2.$

8. Convertiu les equacions d'ordre superior en sistemes d'ordre 1, i dieu quins dels següents problemes de valors inicials són estables i quins inestables:

(i) $y'' + y = 0, \quad y(0) = -1, y'(0) = \frac{1}{2}.$
(ii) $\frac{dy}{dt} = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 2 \end{pmatrix} y, \quad y(t_0) = y_0.$
(iii) $y'' - \sqrt{x-1}y' + (x-1)^2 y = 1x + (x-1)^2, \quad y(1) = 2, y'(1) = 1.$

9. En els següents problemes de valors inicials, busqueu un pas h per evitar problemes de rigidesa al aplicar el mètode d'Euler per $x \in [1, 3]$:

(i) $y' + (x + 2)y = g(x), \quad y(1) = 57.$
(ii) $y' = e^{-x}y + xy^2, \quad y(1) = 13.$
(iii) $y'' = \cos(x^2 + y^2), \quad y(1) = 4, y'(1) = 6.$
(iv) $y'' = f(x, y), \quad y(1) = y_0.$

10. Amb la funció `ode45` de Matlab, integreu aproximadament en els intervals [1,2] i [1,5] la solució dels següents problemes de valors inicials:

(i) $y' = 5y, \quad y(0) = 1.$
(ii) $\left(\frac{2}{3} - x\right) y'' + \left(\frac{2}{9x} + x\right) y' - \left(\frac{2}{3} + \frac{2}{9x}\right) y = 0, \qquad y(1) = 1, y'(1) = \frac{2}{3}.$

Compareu els valors calculats en $x = 2,5$ amb els de la solució exacta, que és $y(x) = e^{5x}, y(x) = x^{\frac{2}{3}}$ respectivament. Dibuixeu amb `plot` la solució aproximada i l'exacta per veure el creixement de l'error.

11. Integreu aproximadament en l'interval [0,10] la solució del PVI $y' = -8y, \quad y(0) = 1$ amb les funcions `ode45` i `ode15s` de Matlab. Compareu velocitat de resolució i marge d'error en ls dues solucions.

12. Amb la funció `ode45` de Matlab, integreu aproximadament en l'interval [2,4] la solució $y(t) = \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix}$ del problema de valors inicials

$$\frac{dy}{dt} = \begin{pmatrix} t^2 + y_1 + e^{-t}y_2^2 \\ ty_1 - (t-1)y_2 \end{pmatrix} \qquad y(2) = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Dibuixeu la trajectoria de la solució fent un `plot(y(:,1),y(:,2))`.

13. *(l'equació de Van der Pol)* Integreu aproximadament amb les funcions `ode45` i `ode15s` de Matlab el PVI

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = 1000(1 - y_1^2)y_2 - y_1 \end{cases} \qquad (y_1(0), y_2(0)) = (0, 1)$$

en l'interval [0,3000]. Compareu la velocitat de càlcul amb cada funció, i dibuixeu la trajectòria de la solució fent un `plot(y(:,1),y(:,2))` (per a aconseguir un resultat més espectacular, feu un `hold on`, useu el vostre `rk14` i aneu dibuixant els punts de la solució a mesura que es calculen).

14. Discutiu l'estabilitat del punt d'equilibri 0 en els següents sistemes, i en els casos de dimensió 2 dibuixeu les trajectòries de les solucions:

$$\text{(i)} \begin{cases} \dot{x} = 5x - y \\ \dot{y} = 3x + y \end{cases}$$

$$\text{(ii)} \begin{cases} \dot{x} = -x \\ \dot{y} = 3x + 2y \end{cases}$$

$$\text{(iii)} \begin{cases} \dot{x} = x \\ \dot{y} = x \end{cases}$$

$$\text{(iv)} \begin{cases} \dot{x} = 0.7x + 0.4y + 0.3z \\ \dot{y} = 0.1x + 0.4y + 0.25z \\ \dot{z} = 0.2x + 0.2y + 0.45z \end{cases}$$

15. En els següents sistemes d'edos lineals, calculeu el sistema linealitzat associat i discutiu l'estabilitat del punt d'equilibri:

(i) $\begin{cases} \dot{x} = -x \\ \dot{y} = 1 - x^2 - y^2 \end{cases}$

(ii) $\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -2\sin(x) - 2y \end{cases}$

16. *(L'equació de Lorenz)* El model meteorològic de Lorenz descriu l'evolució del temps atmosfèric amb un sistema d'equacions de primer ordre com

$$\begin{cases} u_t = -10u + 10v \\ v_t = 28u - v - uw \\ w_t = -\frac{8}{3}w + uw \end{cases}$$

(i) Trobeu els punts d'equilibri del sistema (a ma o amb `fsolve`), i discutiu la seva estabilitat.

(ii) Feu una comprovació heurística de l'estabilitat dels punts agafant una condició inicial $(u(0), v(0), w(0))$ propera a cada punt crític, calculant la solució per temps $t \in [0, 10]$ i dibuixant-la. Trieu la funció més apropiada pel càlcul entre `ode45` i `ode15s`.

17. En una reacció química amb 3 espècies A, B, C tenen lloc simultàneament els processos

$$\begin{aligned} A &\longrightarrow B \\ B + C &\longrightarrow A + C \\ B + B &\longrightarrow C \end{aligned}$$

Si les condicions termodinàmiques del sistema no varien, la taxa a la que es fan les reaccions és constant, de manera que si denotem $y_1(t), y_2(t), y_3(t)$ les concentracions de A, B, C respectivament (mols/l) l'evolució del sistema ve descrita pel sistema d'edos

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \\ \dot{y}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 y_1 & +k_2 y_2 y_3 & \\ k_1 y_1 & -k_2 y_2 y_3 & -k_3 y_2^2 \\ & & k_3 y_2^2 \end{pmatrix}$$

on k_1, k_2, k_3 són les taxes de cadascuna de les tres reaccions respectivament. Si aquestes constants són $k_1 = 0.4, k_2 = 0.2, k_3 = 0.01$ mols/l·minut, i les condicions inicials són $y_1(0) = 100, y_2(0) = 0, y_3(0) = 0$,

(i) discutiu l'estabilitat i rigidesa del problema, i trieu entre `ode45` i `ode15s` per a resoldre'l,

(ii) busqueu els punts crítics del sistema, examineu la seva estabilitat i discutiu segons el nombre total de mols quin d'ells pot ser límit de la solució quan $t \mapsto \infty$.

(iii) Finalment, estudieu l'evolució del sistema amb el mètode escollit i trobeu heurísticament en quin moment s'espera que hi hagi la concentració màxima de l'espècie B, i quina és aquesta.

18. En el tanc on portem a cap una reacció $A \longrightarrow B$ també té lloc una segona reacció de fermentació $B \longrightarrow C$ que desprén un gas. Debut a l'augment de pressió, si denotem $y_1(t), y_2(t), y_3(t)$ les quantitats de A, B, C en el tanc l'evolució del sistema segueix el sistema d'edos

$$\begin{pmatrix} \dot{y_1} \\ \dot{y_2} \\ \dot{y_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 e^{0.1 y_3} y_1 & \\ k_1 e^{0.1 y_3} y_1 & -k_2 e^{0.1 y_3} y_2 \\ & k_2 e^{0.1 y_3} y_2 \end{pmatrix}$$

on les taxes de reacció són $k_1 = 0.05, k_2 = 0.001$.

Trobeu els punts d'equilibri del sistema i discutiu la seva estabilitat.

Les quantitats inicials són $(y_1, y_2, y_3) = (100, 0, 0)$. Estudieu l'estabilitat i rigidesa del problema, escolliu entre `ode45` i `ode15s` per a calcular la solució aproximada, i useu-la per comprovar aproximadament en quin moment s'assoleix la quantitat màxima de B, quina és aquesta, i quina quantitat de C haurà de suportar el tanc fins aquell moment.