Mètodes Numèrics per Equacions Diferencials Ordinàries

Part I: Mètodes explícits d'un pas

Lluís Alsedà

Departament de Matemàtiques
Universitat Autònoma de Barcelona

http://www.mat.uab.cat/∼alseda

10 de novembre de 2024 (versió 1.6)

UAB Universitat Autònoma de Barcelona

DEPARTAMENT DE **MATEMÀTIQUES**

Continguts

Recordem que

$$\begin{cases} \dot{x} = f(t, x), \\ x(t_0) = x^\star, \end{cases}$$

s'anomena *problema de Cauchy* o *problema de valor inicial (PVI)*.

El marc de treball: notació base

L'aproximació numèrica de la solució d'un PVI consisteix a fixar, en primer lloc, un $T \in \mathbb{R}$ positiu que determina l'*interval d'integració* (o *d'aproximació)* $I = [t_0, t_0 + T]$. Per altra banda, cal fixar el *pas de discretització* o *pas d'integració* $h > 0$. Aquests dos *paràmetres del mètode* determinen els *nodes de discretització* $t_k = t_0 + k \cdot h$ amb $k = 1, 2, \ldots, L_h$ i $L_h = \left\lfloor \frac{T}{h} \right\rfloor$ (és a dir, L_h és l'enter més gran tal que $hL_h \leq T$). Finalment, l'*aproximació numèrica de la solució d'un PVI* consisteix a calcular, a partir del punt $(t_0, x_0 = x^\star)$, aproximacions x_k dels vertaders valors de la solució $x(t_k)$ per $k = 1, 2, \ldots, L_h$.

Que és un mètode numèric per problemes de valor inicial?

És una *equació en diferències* que permet calcular la successió d'aproximacions $\{x_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ dels vertaders valors de la solució $\{x(t_k)\}_{k\in\mathbb{N}}$ a partir d'un cert nombre d'aproximacions anteriors *consecutives* $x_{k-1}, x_{k-2}, x_{k-3}, \ldots, x_{k-s}$.
El nombre $s \geq 1$ s'anomena *nombre de passos del mètode*.

Definició (Mètodes d'un pas i mètodes multi-pas)

Un mètode numèric per a l'aproximació d'un problema de valor inicial s'anomena *mètode d'un pas* quan el nombre de passos s del mètode és 1.
Quan $s > 1$ el mètode s'anomena *multi-pas*.

Definició (Mètodes explícits i implícits)

Es diu que un mètode és *implícit* quan cada aproximació x_k depèn implícitament d'ella mateixa.
El mètodes que no són implícits s'anomenen *explícits*.

Observació

Si llegim atentament la definició del nombre de passos d'un mètode veurem que solament es tenen en compte les aproximacions *anteriors* a x_k. Per tant, quan les aproximacions x_k depenen implícitament d'elles mateixes, no s'incrementa el nombre de passos del mètode.

En particular, hi ha mètodes d'un pas explícits i implícits.

Mètode d'Euler: $x_{k+1} = x_k + h\,f(t_k, x_k)$.

Mètode d'Euler endarrere: $x_{k+1} = x_k + h\,f(t_{k+1}, x_{k+1})$.

Mètode d'Euler modificat (mètode de Ruge-Kutta-2):

$$x_{k+1} = x_k + h\,f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, x_k + \tfrac{h}{2} f(t_k, x_k)\right).$$

Mètode de Taylor d'ordre 2:

$$x_{k+1} = x_k + h\,f(t_k, x_k) + \frac{h^2}{2}\left(f_t(t_k, x_k) + f_x(t_k, x_k) f(t_k, x_k)\right).$$

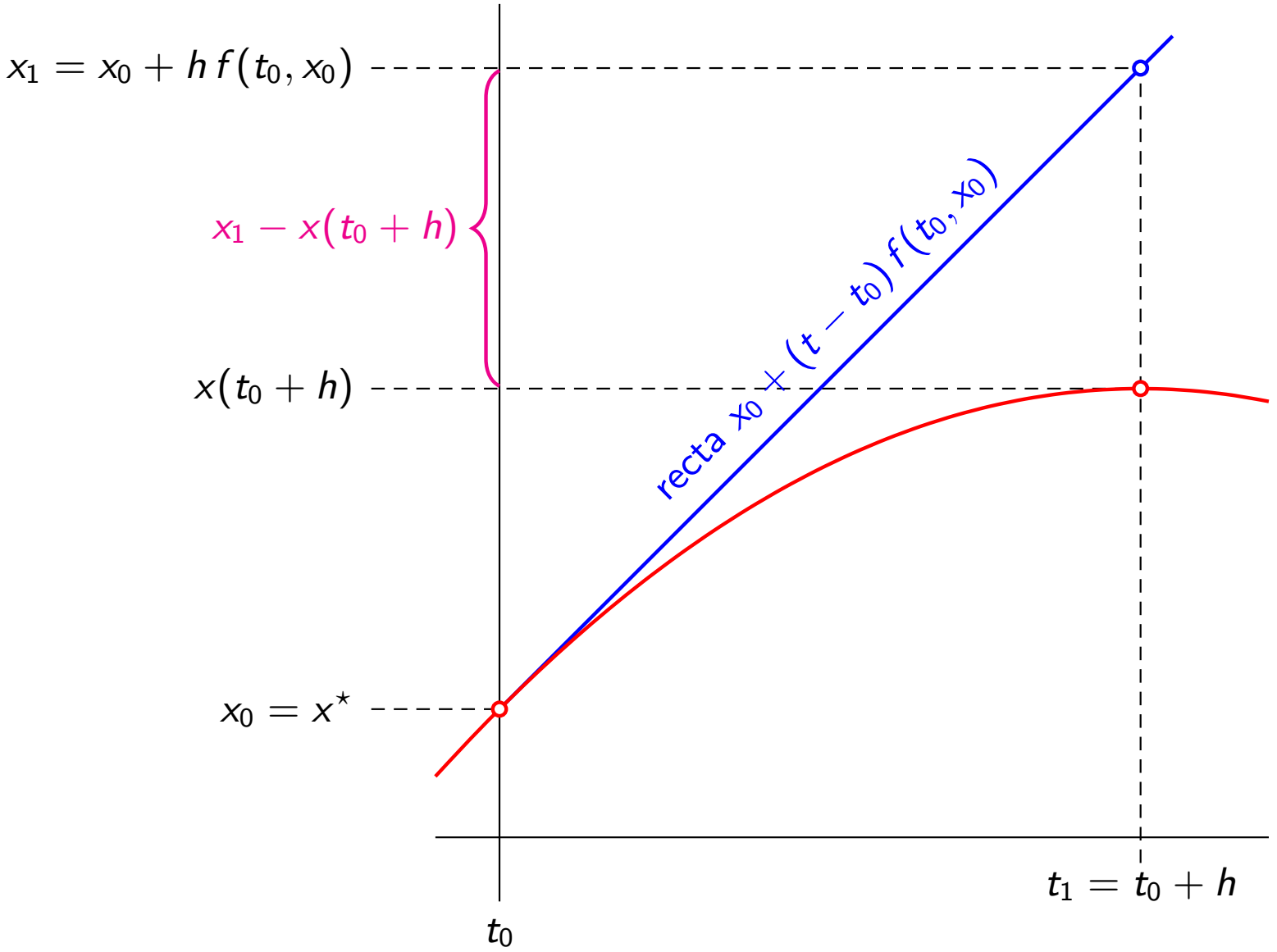
Mètode Trapezoidal o Crank-Nicolson:

$$x_{k+1} = x_k + \tfrac{h}{2}\left(f(t_k, x_k) + f(t_{k+1}, x_{k+1})\right).$$

Mètode de Heun (Ruge-Kutta-2):

$$x_{k+1} = x_k + \tfrac{h}{2}\left(f(t_k, x_k) + f(t_k + h, x_k + h\,f(t_k, x_k)\right).$$

Observem que el *Mètode d'Euler endarrere* i el *Mètode Trapezoidal o Crank-Nicolson* són implícits mentre que tots els altres exemples anteriors són explícits.


$x_1 = x_0 + h\,f(t_0, x_0)$
$x_1 - x(t_0 + h)$
$x(t_0 + h)$
$x_0 = x^\star$
recta $x_0 + (t - t_0)\,f(t_0, x_0)$
t_0
$t_1 = t_0 + h$

Considerem el problema de Cauchy:

$$\dot{x} = x \qquad \text{amb} \qquad x(0) = 1$$

que té $x(t) = e^t$ com a solució.

El mètode d'Euler per a aproximar aquesta solució és

$$x_{k+1} = x_k + h\, f(t_k, x_k) = x_k + h\, x_k.$$

Si prenem $h = 1$ com a pas, tenim $x_{k+1} = x_k + h\, x_k = 2x_k$.

La taula de la dreta compara els 10 primers iterats x_k del mètode d'Euler per aquest problema amb els corresponents valors exactes de la solució $x(t_k) = x(k) = e^k$.

t_k	x_k	$x(t_k) = e^{t_k}$
0	1	1
1	2	2.71828182845905
2	4	7.38905609893065
3	8	20.0855369231877
4	16	54.5981500331442
5	32	148.413159102577
6	64	403.428793492735
7	128	1096.63315842846
8	256	2980.95798704173
9	512	8103.08392757538
10	1024	22026.4657948067

Considerem el problema de Cauchy anterior:

$$\dot{x} = x \qquad \text{amb} \qquad x(0) = 1,$$

però ara, a més del mètode d'Euler (mètode de Taylor d'ordre 1), usarem el mètode de Taylor d'ordre 2:

$$x_{k+1} = x_k + h\, f(t_k, x_k) + \frac{h^2}{2}\Big(f_t(t_k, x_k) + f_x(t_k, x_k) f(t_k, x_k)\Big) =$$

$$x_k + h\, x_k + \frac{h^2}{2} x_k = x_k \left(1 + h + \tfrac{h^2}{2}\right).$$

A més, en comptes de prendre $h = 1$ ara prendrem $h = \frac{1}{2}$. Llavors,

$$x_{k+1} = x_k + h\, x_k = \frac{3}{2} x_k \qquad \text{(pel mètode d'Euler), i}$$

$$x_{k+1} = x_k \left(1 + h + \tfrac{h^2}{2}\right) = \frac{13}{8} x_k \qquad \text{(pel mètode de Taylor d'ordre 2).}$$

La següent diapositiva mostra una taula d'iterats d'ambdós mètodes. La columna etiquetada **Euler** mostra $x(t_k) - x_k^{\text{Euler}}$, mentre la columna etiquetada **Taylor** mostra $x(t_k) - x_k^{\text{Taylor2}}$.

k	t_k	$x(t_k) = e^{t_k}$	x_k^{Euler}	Euler	$x_k^{\text{Taylor}_2}$	Taylor
0	0	1	1	0	1	0
1	0.5	1.64872127070013	1.5	0.15	1.625	0.02
2	1.0	2.71828182845905	2.25	0.47	2.640625	0.08
3	1.5	4.48168907033806	3.375	1.11	4.291015625	0.19
4	2.0	7.38905609893065	5.0625	2.33	6.972900390625	0.42
5	2.5	12.1824939607035	7.59375	4.59	11.3309631347656	0.85
6	3.0	20.0855369231877	11.390625	8.69	18.4128150939941	1.67
7	3.5	33.1154519586923	17.0859375	16.03	29.9208245277405	3.19
8	4.0	54.5981500331442	25.62890625	28.97	48.6213398575783	5.98
9	4.5	90.0171313005218	38.443359375	51.57	79.0096772685647	11.01
10	5.0	148.413159102577	57.6650390625	90.75	128.390725561418	20.02
11	5.5	244.69193226422	86.49755859375	158.19	208.634929037304	36.06
12	6.0	403.428793492735	129.746337890625	273.68	339.031759685618	64.40
13	6.5	665.141633044362	194.619506835938	470.52	550.92660948913	114.22
14	7.0	1096.63315842846	291.929260253906	804.70	895.255740419836	201.38
15	7.5	1808.04241445606	437.893890380859	1370.15	1454.79057818223	353.25
16	8.0	2980.95798704173	656.840835571289	2324.12	2364.03468954613	616.92
17	8.5	4914.76884029913	985.261253356934	3929.51	3841.55637051246	1073.21
18	9.0	8103.08392757538	1477.8918800354	6625.19	6242.52910208275	1860.55
19	9.5	13359.7268296619	2216.8378200531	11142.89	10144.1097908845	3215.62
20	10.0	22026.4657948067	3325.25673007965	18701.21	16484.1784101873	5542.29

Observacions

- *El mètode de Taylor d'ordre 2 té menys error que el mètode d'Euler* (com ha de ser ja que estem usant una millor aproximació a l'EDO).
  La cosa no és per "tirar coets" pero és que estem aproximant l'exponencial!!
- Si comparem les aproximacions obtingudes amb el mètode d'Euler amb pas $h = \frac{1}{2}$ als nodes $t_k \in \{0, 1, 2, \ldots, 10\}$, amb les de la taula de la Pàgina 6 obtingudes amb pas $h = 1$; veiem que les aproximacions obtingudes amb pas $h = \frac{1}{2}$ són millors.
  Per tant, *sembla* que (si oblidem els errors d'arrodoniment) la precisió dels mètodes te una relació inversa amb la mida del pas.

Estem tractant amb tres objectes relacionats però totalment diferents:

- la vertadera solució $x(t)$ d'un PVI,
- un mètode numèric *teòric* per a aproximar $x(t)$ als nodes (temps) de discretització, i finalment,
- la *implementació* del mètode numèric que dóna *una aproximació (amb errors d'arrodoniment) de l'aproximació* donada pel mètode numèric a la solució $x(t)$ als nodes de discretització.

Més precisament:

1. Tenim un PVI
$$\begin{cases} \dot{x} = f\big(t, x(t)\big), \\ x(t_0) = x^\star, \end{cases}$$
del qual suposem que té una solució única $x(t)$ definida a tot l'interval d'integració $I = [t_0, t_0 + T]$.

   Aquesta solució $x(t)$, que suposem incalculable, genera la successió
$$\big\{x(t_k)\big\}_{k=0,1,\ldots,L_h}$$
de valors (discretitzats) de la solució als nodes d'integració.

2. Tenim un mètode numèric
$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + h\,\Phi\big(t_k, x_k, h\big), \\ x_0 = x^\star, \end{cases}$$
que genera la successió $\big\{x_k\big\}_{k=0,1,\ldots,L_h}$ de valors aproximats de la successió $\big\{x(t_k)\big\}_{k=0,1,\ldots,L_h}$.

3. I, per acabar, tenim una implementació del mètode numèric anterior:

$$\begin{cases} z_{k+1} = z_k + h\,\Phi\big(t_k, z_k, h\big) + h\,\delta_{k+1}, \\ z_0 = x_0 + \delta_0 = x^\star + \delta_0, \end{cases}$$

que genera la successió $\{z_k\}_{k=0,1,\ldots,L_h}$ de valors aproximats de la successió $\{x_k\}_{k=0,1,\ldots,L_h}$ amb errors d'arrodoniment.

Aquesta és la corba $t \longmapsto z_k + (t - t_k)\,\Phi(t_k, z_k, h)$, que descriu l'aproximació donada pel mètode a partir del punt (t_k, z_k) per tot $t \in [t_k, t_{k+1}]$. En particular dóna l'aproximació z_{k+1} a $t = t_{k+1}$.

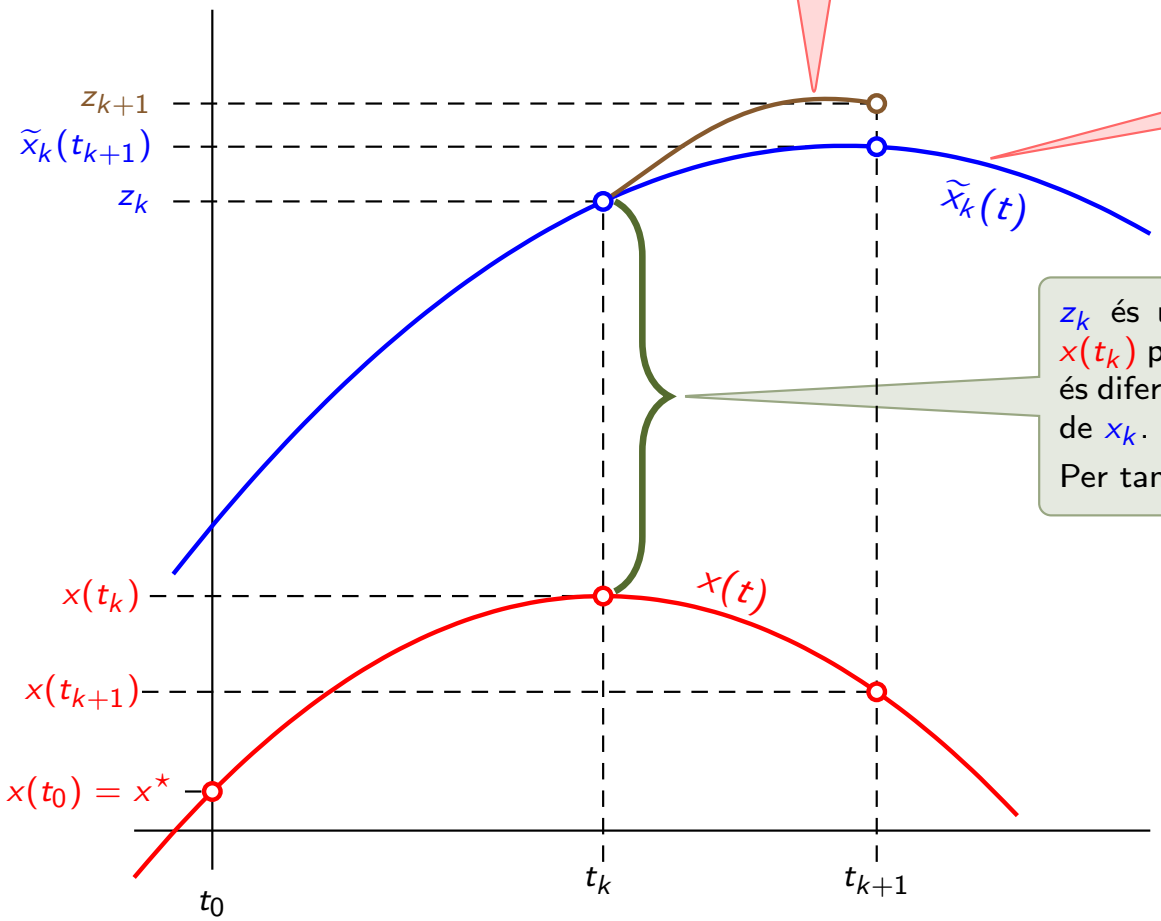
$\widetilde{x}_k(t)$ és la vertadera solució del PVI

$$\begin{cases} \dot{x} = f(t, x), \\ x(t_k) = z_k. \end{cases}$$

En particular, z_{k+1} és una aproximació local de $\widetilde{x}_k(t_{k+1})$ més que de $x(t_{k+1})$.

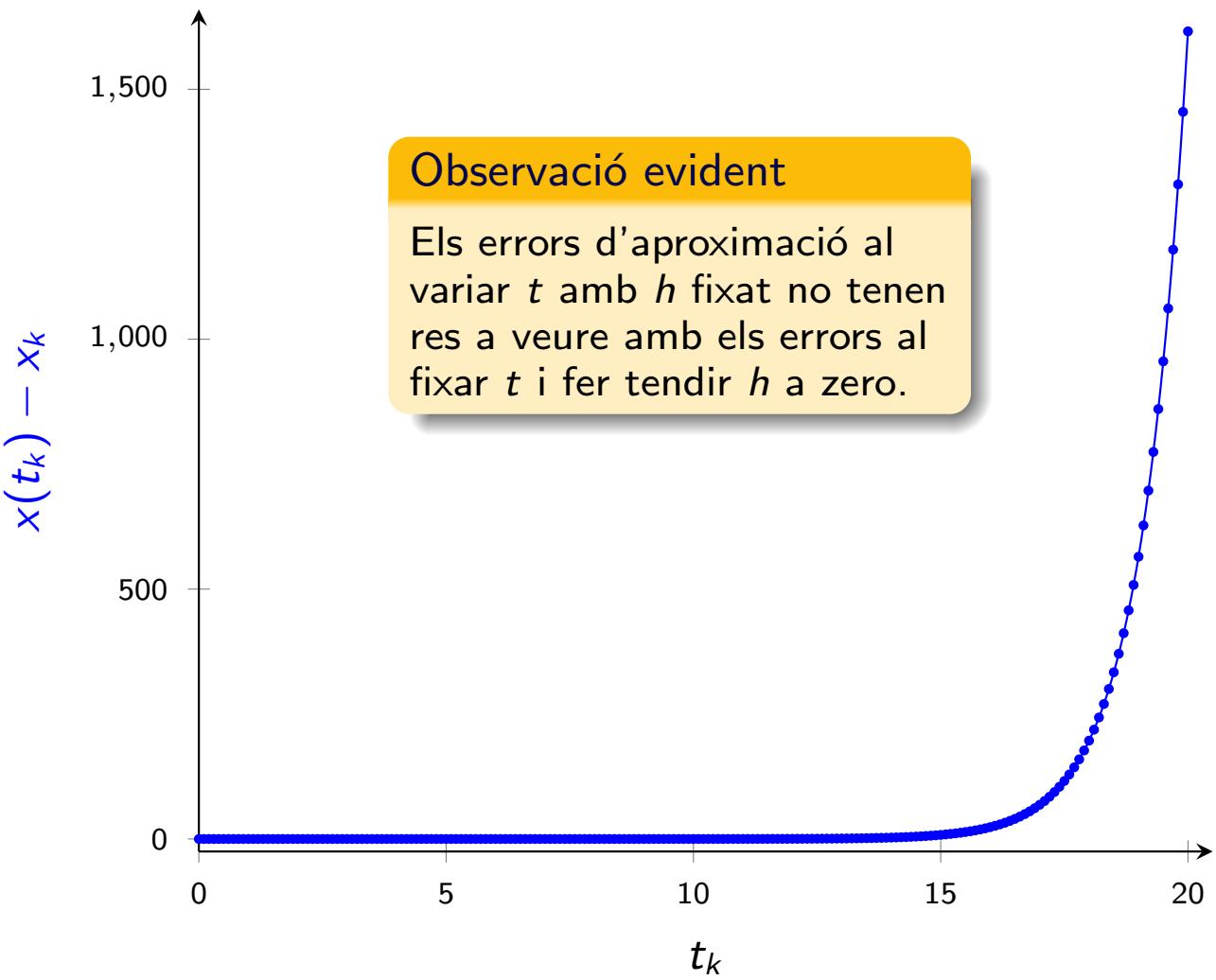
z_k és una aproximació (bona o dolenta) de $x(t_k)$ però, com en aquesta figura, en general, és diferent de $x(t_k)$ i, de fet, també és diferent de x_k.

Per tant $\widetilde{x}_k(t)$ i $x(t)$ són funcions diferents.



Mètodes numèrics per problemes de valor inicial

Una reflexió/avís sobre els errors per iteració del mètode: a quin joc estem jugant; ho visualitzem a partir de l'exemple "més senzill impossible" de la Pàgina 7



Observació evident

Els errors d'aproximació al variar t amb h fixat no tenen res a veure amb els errors al fixar t i fer tendir h a zero.

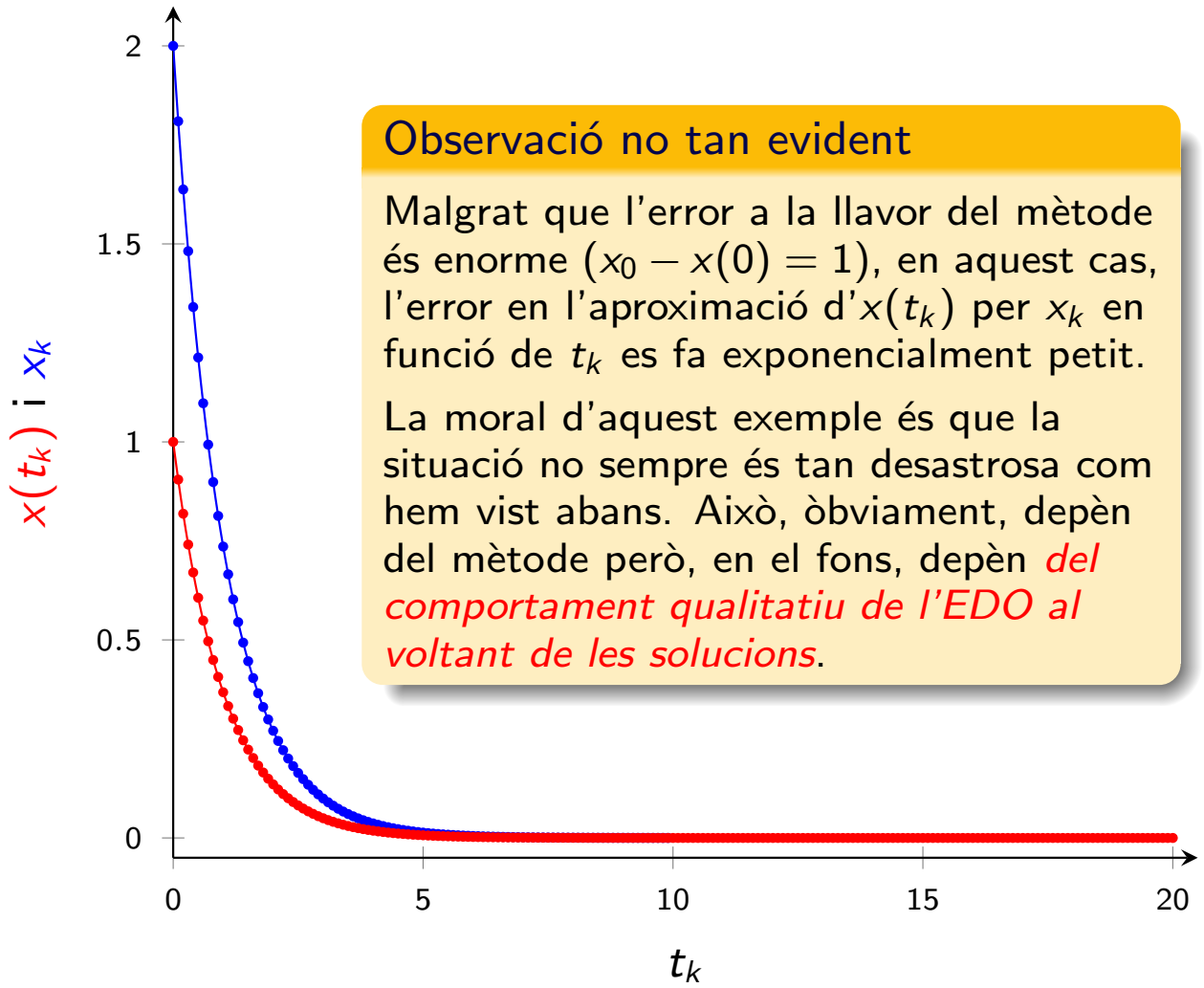
La gràfica de l'esquerra mostra $x(t_k) - x_k$ quan $h = 10^{-3}$. És a dir, mostra *l'error en l'aproximació d'$x(t_k)$ per x_k en funció de t_k, amb un pas fix*.

A la figura, $x(t) = e^t$ és la solució del problema de Cauchy

$$\dot{x} = x \quad \text{amb} \quad x(0) = 1,$$

i x_k és l'aproximació d'$x(t_k)$ donada pel mètode de Taylor d'ordre 2 amb pas h:

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right), \\ x_0 = x(0) = 1. \end{cases}$$



Observació no tan evident

Malgrat que l'error a la llavor del mètode és enorme ($x_0 - x(0) = 1$), en aquest cas, l'error en l'aproximació d'$x(t_k)$ per x_k en funció de t_k es fa exponencialment petit.

La moral d'aquest exemple és que la situació no sempre és tan desastrosa com hem vist abans. Això, òbviament, depèn del mètode però, en el fons, depèn *del comportament qualitatiu de l'EDO al voltant de les solucions*.

La gràfica de l'esquerra mostra $x(t_k)$ en vermell i x_k en blau, també calculats amb pas $h = 10^{-3}$.

$x(t) = e^{-t}$ és la solució del problema de Cauchy $\dot{x} = -x$ amb $x(0) = 1$, i x_k és l'aproximació d'$x(t_k)$ donada pel mètode de Taylor d'ordre 2 amb pas h, que en aquest cas és:

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k \left(1 - h + \frac{h^2}{2}\right), \\ x_0 = 2 \neq x(0) = 1. \end{cases}$$

L'objectiu de la segona part d'aquestes notes és el d'introduir i estudiar les nocions d'error local i global de truncament, ordre, consistència i convergència.

Tota aquesta "artilleria" apunta al control dels errors d'aproximació dels mètodes numèrics a la vertadera solució en instants de temps fixats *quan varia el pas h*.

Més concretament, ens situem en el marc de l'exemple de les Pàgines 7 i 8, amb la intenció de donar suport teòric a la segona afirmació de la Pàgina 9. O més ben dit, volem determinar en quines condicions aquesta afirmació és certa.

Observem que aquest anàlisi és totalment transversal al de la Pàgina 13, i als exemples de les Pàgines 14 i 15.

Els mètodes explícits d'un pas, usualment, es poden escriure com

$$x_{k+1} = x_k + h\,\Phi(t_k, x_k, h),$$

on la funció Φ s'anomena *funció d'increment del mètode*. Òbviament, és la funció d'increment la que determina el mètode.

Usant el Teorema de Taylor, el vertader valor de la solució del PVI al punt $t_k + h$ es pot escriure en termes de la funció d'increment del mètode:

$$\begin{aligned} x(t_k + h) &= x(t_k) + h\,\Delta(t_k, x(t_k), h) \\ &= x(t_k) + h\,\Phi(t_k, x(t_k), h) + h\,\tau(t_k, h, \Phi) \end{aligned}$$

amb

$$\begin{aligned} \tau(t_k, h, \Phi) &= \Delta(t_k, x(t_k), h) - \Phi(t_k, x(t_k), h) \\ &= \frac{x(t_{k+1}) - \Big(x(t_k) + h\,\Phi(t_k, x(t_k), h)\Big)}{h}. \end{aligned}$$

Definició (Error local de truncament)

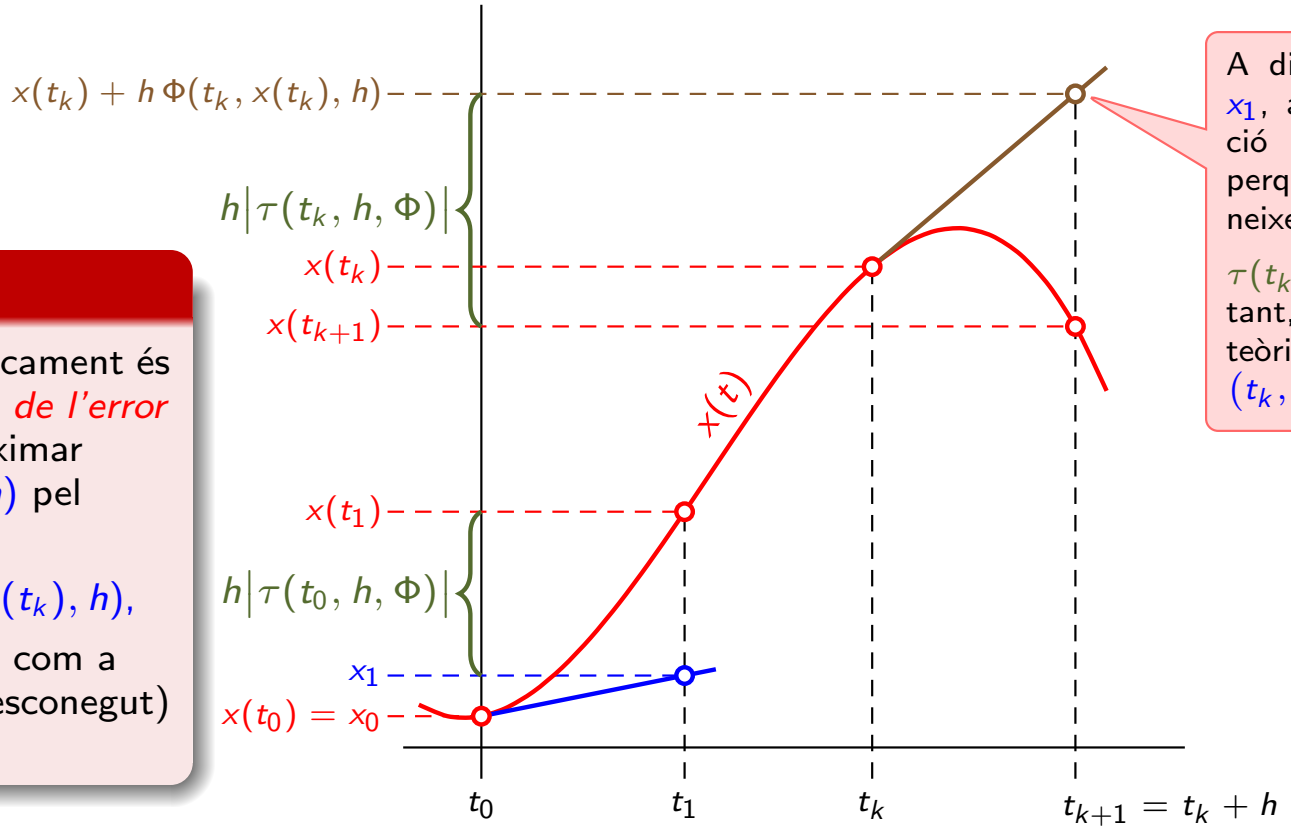
La quantitat $\tau(t_k, h, \Phi)$ s'anomena *error local de truncament (o de discretització) del mètode Φ al node t_k*.

És a dir

l'error local de truncament és una *mesura teòrica de l'error relatiu a h* en aproximar $x(t_{k+1}) = x(t_k + h)$ pel mètode

$$x(t_k) + h\,\Phi(t_k, x(t_k), h),$$

prenent $\big(t_k, x(t_k)\big)$ com a punt (certament desconegut) de partida.



A diferència del punt x_1, aquesta aproximació no es calculable perquè, de fet, no coneixem el punt $x(t_k)$.

$\tau(t_k, h, \Phi)$ és, per tant, una mesura teòrica de l'error a $\big(t_k, x(t_k)\big)$.

$$\tau(t_0, h, \Phi) = \frac{x(t_0 + h) - \Big(x(t_0) + h\,\Phi(t_0, x(t_0), h)\Big)}{h} = \frac{x(t_1) - \Big(x_0 + h\,\Phi(t_0, x_0, h)\Big)}{h} = \frac{x(t_1) - x_1}{h}.$$

$$\tau(t_k, h, \Phi) = \frac{x(t_{k+1}) - \Big(x(t_k) + h\,\Phi(t_k, x(t_k), h)\Big)}{h}.$$

Definició (Error global de truncament)

La quantitat

$$\tau(h,\Phi) := \max_{k=0,1,\ldots,L_h-1} \left|\tau(t_k,h,\Phi)\right|$$

s'anomena *error global de truncament (o de discretització) del mètode* Φ.

Definició (Consistència)

Un mètode explícit d'un pas Φ s'anomena *consistent* quan l'error global de truncament tendeix a zero amb h:

$$\lim_{h\to 0} \tau(h,\Phi) = 0.$$

Observació: No volem mètodes que no siguin consistents

En un mètode *no* consistent, encara que coneguem $x(t_k)$, els errors $\left|\tau(t_k,h,\Phi)\right|$ (d'aproximació de $x(t_k+h)$ per $x(t_k)+h\,\Phi(t_k,x(t_k),h)$) es mantenen *desastrosament* afitats quan $h\to 0$.

La noció d'*ordre d'un mètode* parametritza el comportament infinitesimal (és a dir la velocitat de convergència a zero) de l'error local de discretització respecte d'h, quan el mètode és consistent.

Definició (ordre)

Un mètode explicit d'un pas Φ té *ordre* p si

$$\tau(h, \Phi) = \mathcal{O}(h^p).$$

per tot $t \in [t_0, t_0 + T]$.

Com hem vist a la pàgina anterior, necessitem poder mesurar errors a punts arbitraris t de l'interval d'integració $\left[t_0, t_0 + T\right]$.

El problema és que els algorismes de que disposem solament ens permeten calcular aproximacions a la solució del PVI en els nodes de discretització t_k i, en general, t no ho serà. Simultàniament volem poder jugar amb el pas h, fent-el més petit si convé.

La solució d'aquest problema és òbvia: *si Mahoma no va a la muntanya, la muntanya ha d'anar a Mahoma*.

Això es fa prenent, per a cada $m \in \mathbb{N}$, un pas

$$h_m = \frac{t - t_0}{m},$$

i definint els nodes de discretització $t_k := t_0 + kh_m$ per $k = 0, 1, 2, \ldots, m$.

Així, $t = t_m$ si que és un node de discretització.

Començarem usant el Teorema de Taylor per a obtenir una aproximació de la solució d'una EDO[1]. En particular això ens donarà una expressió convenient de $\Delta(t, x(t), h)$.

$$\begin{aligned} x(t+h) &= x(t) + h\,x'(t) + \tfrac{h^2}{2}x''(t) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= x(t) + h\,f(t,x(t)) + \tfrac{h^2}{2}\tfrac{d}{dt}f(t,x(t)) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= x(t) + h\,f(t,x(t)) + \tfrac{h^2}{2}\Big(f_t(t,x(t)) + f_x(t,x(t))\,x'(t)\Big) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= x(t) + h\,f(t,x(t)) + \tfrac{h^2}{2}\Big(f_t(t,x(t)) + f_x(t,x(t))\,f(t,x(t))\Big) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

Per tant,

$$\Delta(t,x(t),h) = f(t,x(t)) + \tfrac{h}{2}\Big(f_t(t,x(t)) + f_x(t,x(t))\,f(t,x(t))\Big) + \mathcal{O}(h^2).$$

[1] Aquest és un càlcul típic al món dels mètodes numèrics d'EDOs.

Ara, l'error local de discretització del mètode d'Euler és

$$\begin{aligned}\tau(t,h,\Phi) &= \Delta(t,x(t),h) - \Phi(t,x(t),h)\\ &= \Delta(t,x(t),h) - f(t,x(t))\\ &= \frac{h}{2}\Big(f_t(t,x(t)) + f_x(t,x(t))\, f(t,x(t))\Big) + \mathcal{O}(h^2)\\ &= \mathcal{O}(h).\end{aligned}$$

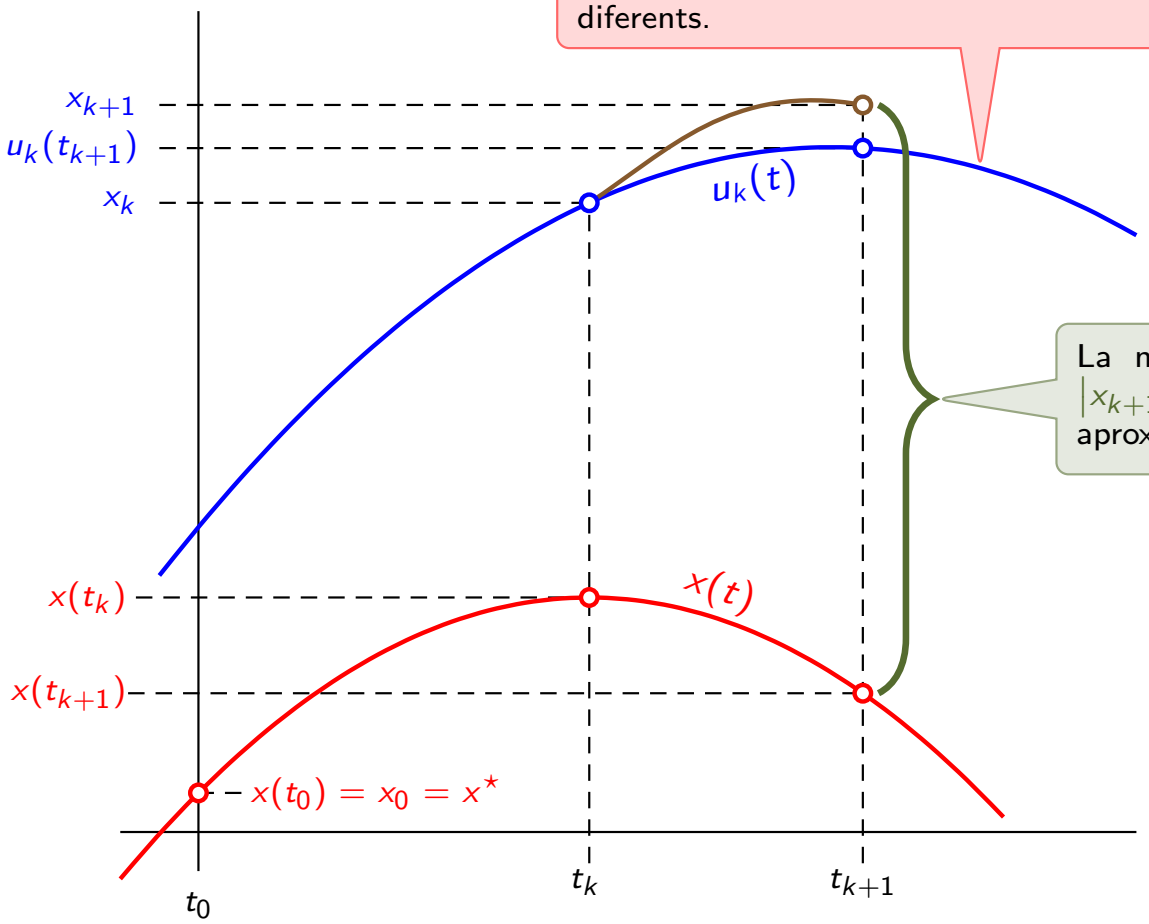
Pel mètode de Taylor d'ordre 2 tenim

$$\Phi(t,x(t),h) = f(t,x(t)) + \frac{h}{2}\Big(f_t(t,x(t)) + f_x(t,x(t))\, f(t,x(t))\Big)$$

i, tal com era d'esperar,

$$\tau(t,h,\Phi) = \Delta(t,x(t),h) - \Phi(t,x(t),h) = \mathcal{O}(h^2).$$

Aquí $u_k(t)$ denota la vertadera solució del PVI
$\dot{x} = f(t, x)$ amb $x(t_k) = x_k$.
Com s'ha dit abans, en general, $u_k(t)$ i $x(t)$ són funcions diferents.



La noció de *convergència* pretén controlar $|x_{k+1} - x(t_{k+1})|$, l'error absolut comès en aproximar $x(t_{k+1})$ per x_{k+1}.

Notació

Recordem que per a cada $t \in \left[t_0, t_0 + T\right]$ i per a cada $m \in \mathbb{N}$ hem denotat

$$h_m := \frac{t - t_0}{m},$$

i definit els nodes de discretització

$$t_k := t_0 + k h_m \qquad \text{per a tot} \qquad k \in \left\{0, 1, 2, \ldots, L_{h_m}\right\}.$$

En particular, $t = t_m$.

En aquest context, per a tot $k \in \left\{0, 1, 2, \ldots, L_{h_m}\right\}$, denotarem per $u(t_k, h_m)$ l'aproximació x_k d'$x(t_k)$ obtinguda amb pas $h = h_m$. Més concretament:

$$\begin{aligned} u(t_0, h_m) &:= x_0 = x^\star, \\ u(t_{k+1}, h_m) &:= u(t_k, h_m) + h_m \, \Phi(t_k, u(t_k, h_m), h_m), \text{ i} \\ u(t, h_m) &= u(t_m, h_m) = x_m. \end{aligned}$$

Definició (Convergència)

Un mètode explicit d'un pas Φ s'anomena *convergent* si

$$\lim_{m\to\infty} u\big(t, h_m\big) - x(t) = 0$$

per tot $t \in \big[t_0, t_0 + T\big]$, i *convergent d'ordre p* si

$$u(t, h_m) - x(t) = \mathcal{O}(h_m^p).$$

Un mètode és *convergent* si

per tot $t \in [t_0, t_0 + T]$, l'error absolut en aproximar $x(t)$ (el vertader valor de la solució al punt t) per $u(t, h_m) = u(t_m, h_m)$ és infinitesimal amb el pas h_m.

És a dir, *disminuint el pas tant com calgui puc obtenir aproximacions a la solució tan bones com vulgui*.

En conclusió: *un mètode que no sigui convergent (amb errors absoluts sistemàtics independentment del pas h) no ens serveix de res*.

La condició que un mètode sigui convergent és difícil de comprovar. Afortunadament la condició de consistència és molt més senzilla de comprovar (encara que és més feble), i tenim el següent teorema que mostra que *consistència amb una condició addicional d'estabilitat del mètode implica convergència*.

Teorema (Estabilitat (Lipschitz) + Consistència $\Longrightarrow$ Convergència)

Sigui $\dot{x} = f\big(t, x(t)\big)$ *amb* $x(t_0) = x^\star$ *un PVI. Considerem un mètode explícit d'un pas tal que la funció,* Φ, *d'increment del mètode és Lipschitz contínua respecte de la segona variable, amb constant* K *independent de* h *i de* $t \in (t_0, t_0 + T]$. *És a dir, existeixen* $h^\star > 0$ *i* $K > 0$ *tals que, per a cada* $h \in (0, h^\star]$ *i* $t \in (t_0, t_0 + T]$,

$$\big|\Phi(t, x, h) - \Phi(t, y, h)\big| \leq K\,|x - y|\,.$$

Llavors,

$$\big|x(t) - u(t, h_m)\big| \leq \tau(h_m, \Phi)\frac{e^{K(t-t_0)} - 1}{K},$$

per a tot $t \in (t_0, t_0 + T]$.
Per tant, si el mètode és consistent aleshores és convergent.
Encara més, si el mètode té ordre p *llavors és convergent d'ordre* p.

Observació

Una noció relacionada amb la de convergència és la d'*estabilitat zero*, que controla els errors d'arrodoniment en l'aplicació d'un mètode afitant la successió

$$\left\{|x_k - z_k|\right\}_{k=0,1,\ldots,L_h},$$

on $\left\{x_k\right\}_{k=0,1,\ldots,L_h}$ és la successió d'iterats generats pel mètode (teòric):

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + h\,\Phi\big(t_k, x_k, h\big), \\ x_0 = x^\star, \end{cases}$$

i $\left\{z_k\right\}_{k=0,1,\ldots,L_h}$ és la successió d'iterats (amb errors d'arrodoniment) generats per la implementació del mètode:

$$\begin{cases} z_{k+1} = z_k + h\,\Phi\big(t_k, z_k, h\big) + h\,\delta_{k+1}, \\ z_0 = x_0 + \delta_0 = x^\star + \delta_0. \end{cases}$$

En general, hi ha dues maneres de millorar la precisió:

1. Reduir el pas de temps h augmentant la quantitat de passos necessaris per a arribar a un temps t.
2. Augmentar l'ordre de convergència (encara que no és raonable augmentar-lo de manera indiscriminada).

La segona via l'explorarem més endavant deduint mètodes (de Runge-Kutta i de Taylor) d'ordre elevat.

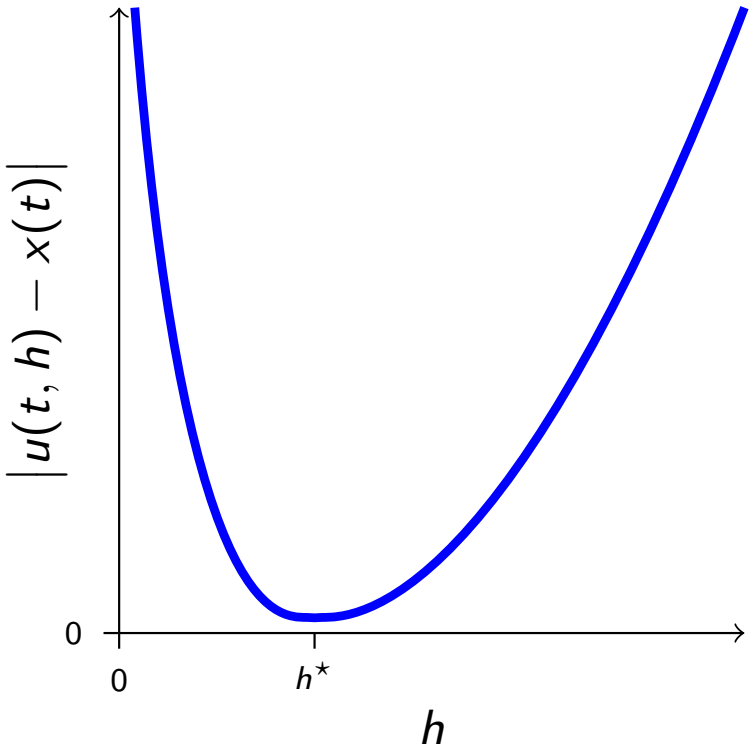
Els avantatges i els contres de la primera alternativa es discuteixen a les tres diapositives següents.

La gràfica (qualitativa) de la figura de la dreta, mostra el comportament típic de l'error absolut $\left|u(t,h) - x(t)\right|$ per un t fixat, en funció del pas h.

Per passos grans, la velocitat amb que es calcula $u(t,h)$ és gran (ja que calen poques iteracions) però l'error de truncament també és gran.

Per passos petits, calen moltes iteracions del mètode per arribar a obtenir $u(t,h)$. Per tant, la computació d'$u(t,h)$ és lenta i, a més, l'error és gran degut a l'acumulació dels errors d'arrodoniment.

Usualment hi ha una zona "privilegiada" on es troba el pas òptim $h^\star$, que permet velocitats acceptables en relació als errors absoluts d'aproximació. En particular, el pas òptim $h^\star$, determina l'error mínim.



Considerem el PVI

$$\begin{cases} \dot{x} = -200tx^2, \\ x(-1) = \frac{1}{101}, \end{cases}$$

que té $x(t) = \frac{1}{1+100t^2}$ per solució.

Volem calcular $\left|u(0,h_m) - x(0)\right| = \left|u(0,h_m) - 1\right|$ a partir de $t_0 = -1$ amb el mètode de Heun (aplicat reiteradament):

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \frac{h_m}{2}\Big(f(t_k,x_k) + f(t_k + h_m, x_k + h_m\, f(t_k,x_k)\Big) \\ &= x_k - 100h_m\left(t_k x_k^2 + (t_k + h_m)\Big(x_k - 200h_m\, t_k x_k^2\Big)^2\right), \text{ amb} \end{aligned}$$

$$x_0 = x(t_0) = x(-1) = \frac{1}{101},$$

amb aritmètica de 7 dígits (que és la que té el C per variables `float`) i diferents passos h_m.

Com a resultat d'aquest exercici obtenim la taula següent:

h_m	10^{-2}	$5 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{-5}
$\lvert u(0, h_m) - x(0)\rvert$	$6.3 \cdot 10^{-2}$	$1.7 \cdot 10^{-2}$	$6.5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-5}$	$8.5 \cdot 10^{-4}$	$1.9 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-3}$

Comentaris il·lustratius a la disquisició de la Pàgina 31

- Per passos grans (10^{-2} i $5 \cdot 10^{-3}$) el mètode fa poques iteracions i, per tant, no hi pot haver molt error d'arrodoniment. És a dir, l'error es degut bàsicament als errors de truncament del mètode.
- Ben al contrari, per passos petits (per exemple $h_m = 10^{-5}$), el mètode fa moltes iteracions (per $h_m = 10^{-5}$, $m = 10^5$ i el mètode s'itera 10^5 vegades) i l'error s'incrementa enormement degut als errors d'arrodoniment. Els errors de truncament del mètode quan es fan moltes iteracions òbviament poden ser grans però també poden ser menyspreables com mostra l'exemple de la Pagina 15.

Més comentaris il·lustratius a la disquisició de la Pàgina 31

- Observem que, efectivament, hi ha un pas òptim. En aquest cas és $5 \cdot 10^{-4}$.
- Desafortunadament, en general no és possible fer l'anàlisi de la taula ja que no coneixem la solució (recordem que tot aquest esforç és precisament per a aproximar-la numèricament degut a que no la coneixem).

Un exercici d'entrenament (amb esperit purament esportiu)

Recalcular la taula de la diapositiva anterior.

Nota I: És un bon exercici de seguiment no local d'una solució.

Nota II: Es gairebé impossible que la taula surti quantitativament com la de la diapositiva anterior però, certament, hauria de sortir similar qualitativament.

Demostració del Teorema de Convergència

Sigui $M^\star \in \mathbb{N}$ tal que $t - t_0 \leq M^\star h^\star$, i prenem $m \geq M^\star$. Llavors tenim $h_m \in (0, h^\star]$, i podem usar la notació de la Pàgina 25. En particular, $t = t_m$.

Com a la definició d'error local de truncament, escrivim:

$$\begin{cases} x(t_{k+1}) = x(t_k + h_m) = x(t_k) + h_m\,\Phi(t_k, x(t_k), h_m) + h_m\,\tau(t_k, h_m, \Phi) \\ x(t_0) = x_0 = u(t_0, h_m), \end{cases}$$

Llavors, per a cada $k \in \{0, 1, \ldots, m-1\}$ tenim

$$\begin{aligned} \big|x(t_{k+1}) - u(t_{k+1}, h_m)\big| & \\ &\leq \big|x(t_k) - u(t_k, h_m)\big| + h_m\big|\tau(t_k, h_m, \Phi)\big| + \\ &\qquad h_m\,\big|\Phi(t_k, x(t_k), h_m) - \Phi(t_k, u(t_k, h_m), h_m)\big| \\ &\leq (1 + h_m\,K)\big|x(t_k) - u(t_k, h_m)\big| + h_m\,\tau(h_m, \Phi). \end{aligned}$$

Demostració del Teorema de Convergència

Per tant,

$$
\begin{aligned}
\big|x(t_1)-u(t_1,h_m)\big| &\le \big(1+h_m K\big)\big|x(t_0)-u(t_0,h_m)\big| + h_m\,\tau(h_m,\Phi)\\
&= h_m\,\tau(h_m,\Phi),\\
\big|x(t_2)-u(t_2,h_m)\big| &\le \big(1+h_m K\big)\big|x(t_1)-u(t_1,h_m)\big| + h_m\,\tau(h_m,\Phi)\\
&\le h_m\,\tau(h_m,\Phi)\big(1+(1+h_m K)\big),\\
\big|x(t_3)-u(t_3,h_m)\big| &\le \big(1+h_m K\big)\big|x(t_2)-u(t_2,h_m)\big| + h_m\,\tau(h_m,\Phi)\\
&\le h_m\,\tau(h_m,\Phi)\big(1+(1+h_m K)+(1+h_m K)^2\big),\\
\cdots \qquad & \cdots \qquad \cdots\\
\big|x(t_m)-u(t_m,h_m)\big| &\le \big(1+h_m K\big)\big|x(t_{m-1})-u(t_{m-1},h_m)\big| + h_m\,\tau(h_m,\Phi)\\
&\le h_m\,\tau(h_m,\Phi)\sum_{k=0}^{m-1}(1+h_m K)^k\\
&= h_m\,\tau(h_m,\Phi)\tfrac{(1+h_m K)^m-1}{(1+h_m K)-1} = \tau(h_m,\Phi)\tfrac{(1+h_m K)^m-1}{K}.
\end{aligned}
$$

Demostració del Teorema de Convergència

Ara cal afitar $(1+h_m\,K)^m$. Tenim,

$$(1+h_m\,K)^m = (1+h_m\,K)^{\frac{t-t_0}{h_m}} = \left((1+h_m\,K)^{\frac{1}{h_m}}\right)^{t-t_0} \leq e^{K(t-t_0)}$$

ja que $\lim_{h\searrow 0}\ (1+h\,K)^{\frac{1}{h}} = e^K = \sup_{h\in(0,h^\star]}\ (1+h\,K)^{\frac{1}{h}}$.

Resumint,

$$\left|x(t_m)-u(t_m,h_m)\right| \leq \tau(h_m,\Phi)\frac{(1+h_m\,K)^m-1}{K} \leq \tau(h_m,\Phi)\frac{e^{K(t-t_0)}-1}{K}.$$

Aquesta part del curs es dedicarà a l'estudi sistemàtic dels mètodes de Runge-Kutta (RK) amb l'objectiu de poder construir mètodes amb ordre de convergència (arbitràriament) elevat[2].

Els mètodes de Runge-Kutta són mètodes *interpolatoris* que, per a obtenir l'estimació x_{k+1} d'$x(t_{k+1})$, usen avaluacions de la funció f a diversos nodes d'interpolació a l'interval $\left[t_k, t_{k+1} = t_k + h\right]$.

Formalment són mètodes *d'un pas* i poden ser explícits o implícits.

En el que segueix, ens concentrarem principalment en els mètodes RK explícits.

[2] Recordem que aquesta línia de treball no és la única poder a aconseguir mètodes amb ordre arbitràriament elevat. També hi ha la via dels mètodes de Taylor, que tractarem més endavant.

Un *mètode de Runge-Kutta d'm etapes* es defineix com

$$x_{k+1} := x_k + h \sum_{i=1}^{m} c_i \, \kappa_i(t_k, x_k),$$

on

$$\begin{aligned}
\kappa_1(t_k, x_k) &= f(t_k, x_k), \\
\kappa_2(t_k, x_k) &= f\big(t_k + \alpha_2 h, x_k + h\,\beta_{2,1}\,\kappa_1(t_k, x_k)\big), \\
\kappa_3(t_k, x_k) &= f\big(t_k + \alpha_3 h, x_k + h\,\beta_{3,1}\,\kappa_1(t_k, x_k) + h\,\beta_{3,2}\,\kappa_2(t_k, x_k)\big), \\
&\vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
\kappa_m(t_k, x_k) &= f\left(t_k + \alpha_m h, x_k + h \sum_{j=1}^{m-1} \beta_{m,j}\,\kappa_j(t_k, x_k)\right).
\end{aligned}$$

Els paràmetres del mètode són: el nombre d'etapes m, els coeficients $c_1, c_2, \ldots, c_m$, els coeficients $\alpha_2, \alpha_3, \ldots, \alpha_m$ i els coeficients $\beta_{i,j}$ per $i \in \{2, 3, \ldots, m\}$ i $j \in \{1, 2, \ldots, i-1\}$.

Aquests coeficients, usualment, es presenten en forma compacta en una *taula de Butcher*:

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \alpha_2 & \beta_{2,1} & & & \\ \alpha_3 & \beta_{3,1} & \beta_{3,2} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \alpha_m & \beta_{m,1} & \beta_{m,2} & \cdots & \beta_{m,m-1} \\ \hline & c_1 & c_2 & \cdots & c_{m-1} \quad c_m \end{array}$$

Observació

Els mètodes de Runge-Kutta són mètodes *interpolatoris* que usen avaluacions de la funció f a m nodes d'interpolació a l'interval $\left[t_k, t_{k+1} = t_k + h\right]$. Formalment són mètodes *d'un pas*.

El mètode de Runge-Kutta d'una etapa és

$$x_{k+1} = x_k + hc_1\,\kappa_1(t_k, x_k) = x_k + hc_1\,f(t_k, x_k),$$

on cal determinar la constant c_1. Òbviament determinarem c_1 amb l'objectiu de maximitzar l'ordre del mètode.

De la Pàgina 22 (Taylor) tenim

$$\Delta(t, x(t), h) = f(t, x(t)) + \mathcal{O}(h).$$

Llavors, repetint el càlcul de la Pàgina 23,

$$\tau(t, h, \Phi) = \Delta(t, x(t), h) - \Phi(t, x(t), h) = (1 - c_1) f(t, x(t)) + \mathcal{O}(h).$$

Per tant, $c_1 = 1$ i el mètode de Runge-Kutta d'una etapa acaba essent el mètode d'Euler i tenint ordre 1.

En aquest cas el mètode és

$$x_{k+1} = x_k + h\big(c_1\,\kappa_1(t_k, x_k) + c_2\,\kappa_2(t_k, x_k)\big)$$
$$= x_k + h\Big(c_1\,f(t_k, x_k) + c_2\,f\big(t_k + \alpha_2 h, x_k + h\,\beta_{2,1} f(t_k, x_k)\big)\Big).$$

Una altra vegada de la Pàgina 22 tenim,

$$\Delta(t, x(t), h) = f(t, x(t)) + \tfrac{h}{2}\Big(f_t(t, x(t)) + f_x(t, x(t))\,f(t, x(t))\Big) + \mathcal{O}(h^2).$$

D'altra banda,

$$\kappa_2(t, x(t)) = f\big(t + \alpha_2 h, x(t) + h\,\beta_{2,1} f(t, x(t))\big) = f(t, x(t)) +$$
$$h\,\alpha_2 f_t(t, x(t)) + h\,\beta_{2,1} f(t, x(t)) f_x(t, x(t)) + \mathcal{O}(h^2).$$

Per tant,

$$\begin{aligned}\Phi(t, x(t), h) &= c_1 f(t, x(t)) + \\ &\qquad c_2 f\left(t + \alpha_2 h, x(t) + h\,\beta_{2,1} f(t, x(t))\right) \\ &= (c_1 + c_2) f(t, x(t)) + \\ &\qquad h\Big(c_2\,\alpha_2 f_t(t, x(t)) + c_2\,\beta_{2,1} f(t, x(t)) f_x(t, x(t))\Big) + \\ &\qquad\quad \mathcal{O}(h^2),\end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned}\tau(t, h, \Phi) &= \Phi(t, x(t), h) - \Delta(t, x(t), h) \\ &= (c_1 + c_2 - 1) f(t, x(t)) + h\Big(c_2\,\alpha_2 - \tfrac{1}{2}\Big) f_t(t, x(t)) + \\ &\qquad h\Big(c_2\,\beta_{2,1} - \tfrac{1}{2}\Big) f(t, x(t)) f_x(t, x(t))\Big) + \\ &\qquad\quad \mathcal{O}(h^2).\end{aligned}$$

El mètode de Runge-Kutta de dues etapes té ordre 2 si i només si

$$c_1 + c_2 = 1, \qquad c_2\,\alpha_2 = \tfrac{1}{2} \quad \text{i} \quad c_2\,\beta_{2,1} = \tfrac{1}{2}.$$

El sistema té quatre incògnites i tres equacions. Per a resoldre'l cal afegir una condició addicional.

- En primer lloc imposarem $\alpha_2 = 1$. Això dona la taula de Butcher següent (on $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$ i $\beta_{2,1} = 1$):

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Per tant, finalment, ens queda el mètode de Heun:

$$x_{k+1} = x_k + \tfrac{h}{2}\Big(f(t_k, x_k) + f\big(t_k + h, x_k + hf(t_k, x_k)\big)\Big)$$

En particular, acabem de demostrar que el mètode de Heun té ordre 2.

- Ara imposarem $\alpha_2 = \frac{1}{2}$. Això dona la taula de Butcher següent (on $c_1 = 0$, $c_2 = 1$ i $\beta_{2,1} = \frac{1}{2}$):

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

En aquest cas obtenim el mètode d'Euler modificat o Runge-Kutta-2:

$$x_{k+1} = x_k + h\, f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, x_k + \tfrac{h}{2} f(t_k, x_k)\right)$$

que també té ordre 2.

Exercici llarguet i pesadet

Deduir un mètode de Runge-Kutta de 3 etapes i mostrar que té ordre 3.

El mètode de Runge-Kutta de 4 etapes és

$$x_{k+1} = x_k + h \sum_{i=1}^{4} c_i \, \kappa_i(t_k, x_k),$$

$$\kappa_1(t_k, x_k) = f(t_k, x_k),$$

$$\kappa_2(t_k, x_k) = f\big(t_k + \alpha_2 h, x_k + h\,\beta_{2,1}\kappa_1(t_k, x_k)\big),$$

$$\kappa_3(t_k, x_k) = f\big(t_k + \alpha_3 h, x_k + h\,\beta_{3,1}\kappa_1(t_k, x_k) + h\,\beta_{3,2}\kappa_2(t_k, x_k)\big),$$

$$\kappa_4(t_k, x_k) = f\left(t_k + \alpha_4 h, x_k + h \sum_{j=1}^{3} \beta_{4,j}\kappa_j(t_k, x_k)\right),$$

que té paràmetres c_1, c_2, c_3, c_4, α_2, α_3, α_4 i $\beta_{i,j}$ amb $i \in \{2, 3, 4\}$ i $j \in \{1, 2, \ldots, i-1\}$.

De manera similar als mètodes Runge-Kutta de dues etapes (però amb més paciència) obtenim el sistema

$$\begin{cases} c_1 + c_2 + c_3 + c_4 & = 1, \\ \beta_{2,1} & = \alpha_2, \\ \beta_{3,1} + \beta_{3,2} & = \alpha_3, \\ c_2\alpha_2 + c_3\alpha_3 + c_4\alpha_4 & = \frac{1}{2}, \\ c_2\alpha_2^2 + c_3\alpha_3^2 + c_4\alpha_4^2 & = \frac{1}{3}, \\ c_2\alpha_2^3 + c_3\alpha_3^3 + c_4\alpha_4^3 & = \frac{1}{4}, \\ c_3\alpha_2\beta_{3,2} + c_4\left(\alpha_2\beta_{4,2} + \alpha_3\beta_{4,3}\right) & = \frac{1}{6}, \\ c_3\alpha_2\alpha_3\beta_{3,2} + c_4\alpha_4\left(\alpha_2\beta_{4,2} + \alpha_3\beta_{4,3}\right) & = \frac{1}{8}, \\ c_3\alpha_2^2\beta_{3,2} + c_4\left(\alpha_2^2\beta_{4,2} + \alpha_3^2\beta_{4,3}\right) & = \frac{1}{12}, \\ c_4\alpha_2\beta_{3,2}\beta_{4,3} & = \frac{1}{24}. \end{cases}$$

El sistema anterior té tretze incògnites en onze equacions. Per tant cal imposar dues condicions més. Les més útils, que donen l'anomenat *Mètode Runge-Kutta-4 Clàssic*, són

$$\alpha_2 = \frac{1}{2} \qquad \text{i} \qquad \beta_{3,1} = 0.$$

Resolent el sistema amb aquestes condicions addicionals obtenim la següent taula de Butcher:

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \alpha_2 & \beta_{2,1} & & & \\ \alpha_3 & \beta_{3,1} & \beta_{3,2} & & \\ \alpha_4 & \beta_{4,1} & \beta_{4,2} & \beta_{4,3} & \\ \hline & c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

$$x_{k+1} = x_k + \frac{h}{6}\Big(\kappa_1(t_k, x_k) + 2\kappa_2(t_k, x_k) + 2\kappa_3(t_k, x_k) + \kappa_4(t_k, x_k)\Big)$$

amb

$$\begin{aligned}
\kappa_1(t_k, x_k) &= f(t_k, x_k),\\
\kappa_2(t_k, x_k) &= f\Big(t_k + \tfrac{h}{2}, x_k + \tfrac{h}{2} f(t_k, x_k)\Big)\\
\kappa_3(t_k, x_k) &= f\Big(t_k + \tfrac{h}{2}, x_k + \tfrac{h}{2}\kappa_2(t_k, x_k)\Big), \text{ i}\\
\kappa_4(t_k, x_k) &= f\Big(t_k + h, x_k + h\,\kappa_3(t_k, x_k)\Big).
\end{aligned}$$

Observació

El fet que hi hagi alguns coeficients β igual a zero simplifica les fórmules i, per tant, redueix els *errors d'arrodoniment del mètode*.

Observeu que, jugant amb les dues condicions addicionals que cal afegir al sistema d'equacions anterior, es poden construir altres mètodes RK-4. Un dels més anomenats és el *mètode Runge-Kutta-3/8*.

La taula de Butcher d'aquest mètode és:

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & & \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 1 & & \\ 1 & 1 & -1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8} \end{array}$$

La successió $\{x(t_k)\}_{k\in\mathbb{Z}^+}$, de valors discretitzats de la solució $x(t)$ d'un PVI als nodes de discretització $\{t_k\}_{k\in\mathbb{Z}^+}$, es pot obtenir per integració directa de l'EDO:

$$x(t_{k+1}) - x(t_k) = \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(s, x(s))\, ds.$$

Si apliquem la regla de Simpson per a aproximar la integral de la darrera equació obtenim

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} f(s, x(s))\, ds \approx \frac{h}{6}\left(f\left(t_k, x(t_k)\right) + 4f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, x\left(t_k + \tfrac{h}{2}\right)\right) + f\left(t_{k+1}, x(t_{k+1})\right)\right)$$

Tenim,

$$\kappa_1\big(t_k, x(t_k)\big) = f\big(t_k, x(t_k)\big), \text{ i}$$
$$\kappa_4\big(t_k, x(t_k)\big) = f\Big(t_k + h, x(t_k) + h\,\kappa_3\big(t_k, x(t_k)\big)\Big) \approx f\big(t_{k+1}, x(t_{k+1})\big),$$

on la segona equació se segueix de la continuïtat d'f i de

$$\begin{aligned} x(t_{k+1}) = x(t_k + h) &= x(t_k) + h\,\Delta\big(t_k, x(t_k)\big) \\ &\approx x(t_k) + h\,\kappa_3\big(t_k, x(t_k)\big), \end{aligned}$$

que és certa per h prou petit per la continuïtat de f, Δ i κ_3.

Finalment, $f\Big(t_k + \frac{h}{2}, x\big(t_k + \frac{h}{2}\big)\Big)$ és el pendent de la recta tangent a $x(t)$ en el punt $\Big(t_k + \frac{h}{2}, x\big(t_k + \frac{h}{2}\big)\Big)$.

Usant arguments similars als d'abans per $\frac{h}{2}$, podem veure que

$$\kappa_2\big(t_k, x(t_k)\big) := f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, x(t_k) + \tfrac{h}{2} f\big(t_k, x(t_k)\big)\right), \text{ i}$$
$$\kappa_3\big(t_k, x(t_k)\big) := f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, x(t_k) + \tfrac{h}{2} \kappa_2\big(t_k, x(t_k)\big)\right)$$

són sengles aproximacions d'$f\left(t_k + \frac{h}{2}, x\big(t_k + \frac{h}{2}\big)\right)$. Per tant, en aquest cas, podem prendre l'aproximació següent:

$$f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, x\big(t_k + \tfrac{h}{2}\big)\right) = \frac{f\left(t_k + \frac{h}{2}, x\big(t_k + \frac{h}{2}\big)\right) + f\left(t_k + \frac{h}{2}, x\big(t_k + \frac{h}{2}\big)\right)}{2} \approx \frac{\kappa_2\big(t_k, x(t_k)\big) + \kappa_3\big(t_k, x(t_k)\big)}{2}.$$

Resumint,

$$
\begin{aligned}
x(t_{k+1}) - x(t_k) &= \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(t, x(s))\, ds \\
&\approx \frac{h}{6}\left(f\left(t_k, x(t_k)\right) + 4f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, x\left(t_k + \tfrac{h}{2}\right)\right) + f\left(t_{k+1}, x(t_{k+1})\right)\right) \\
&\approx \frac{h}{6}\left(\kappa_1\left(t_k, x(t_k)\right) + 4\frac{\kappa_2\left(t_k, x(t_k)\right) + \kappa_3\left(t_k, x(t_k)\right)}{2} + \kappa_4\left(t_k, x(t_k)\right)\right) \\
&\approx \frac{h}{6}\left(\kappa_1\left(t_k, x(t_k)\right) + 2\kappa_2\left(t_k, x(t_k)\right) + 2\kappa_3\left(t_k, x(t_k)\right) + \kappa_4\left(t_k, x(t_k)\right)\right)
\end{aligned}
$$

que, substituint $x(t_{k+1}) = x_{k+1}$ i $x(t_k) = x_k$, dóna el mètode RK-4 Clàssic.

L'error local de truncament del mètode RK-4 Clàssic es pot estimar a partir de l'error de la regla de Simpson:

$$h_k\,\tau(t_k,h_k,RK4) = x(t_{k+1}) - x(t_k)$$
$$- \frac{h_k}{6}\Big(\kappa_1\big(t_k,x(t_k)\big)+2\kappa_2\big(t_k,x(t_k)\big)+2\kappa_3\big(t_k,x(t_k)\big)+\kappa_4\big(t_k,x(t_k)\big)\Big)$$
$$= -\frac{f^{(4)}\big(\xi,x(\xi)\big)}{90}\left(\frac{h_k}{2}\right)^5 = -\frac{f^{(4)}\big(\xi,x(\xi)\big)}{2880}\,h_k^5.$$

En conseqüència,

$$\tau(t_k,h_k,RK4) = \mathcal{O}\big(h_k^4\big),$$

i *el mètode RK-4 Clàssic és d'ordre 4*.

A més, si la funció d'increment del mètode

$$\frac{1}{6}\Big(\kappa_1(t,x)+2\kappa_2(t,x)+2\kappa_3(t,x)+\kappa_4(t,x)\Big)$$

és Lipschitz contínua respecte de la segona variable, *el mètode RK-4 Clàssic és d'ordre de convergència 4*.

Exercici

En quines condicions la funció d'increment del mètode de RK-4 Clàssic és Lipschitz contínua respecte de la segona variable.

Observació

Amb el mètode RK-4 Clàssic ja dissenyat és molt més fàcil determinar així el seu ordre. Si estiguéssim deduint el mètode (com hem fet per exemple amb l'RK-2), el sistema d'onze equacions que s'obté ja ens diu quins termes del desenvolupament de Taylor de l'error local de truncament del mètode s'anul·len i, per tant, l'ordre.

Sobre l'ordre dels mètodes de Runge-Kutta

La *barrera Butcher* diu que la quantitat d'etapes m creix més ràpidament que l'ordre p. En particular, *per a $m \geq 5$ etapes, no hi ha cap mètode de Runge-Kutta explícit amb ordre de convergència m* (el sistema corresponent és irresoluble).

La taula següent, que confirma explícitament la barrera Butcher, mostra l'ordre dels mètodes de Runge-Kutta en funció de les etapes, fins a 11 etapes:

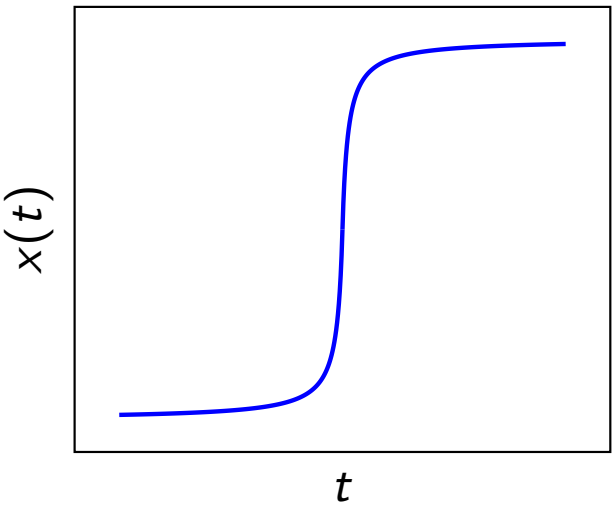
Etapes	1	2	3	4	5	6	7	8	9	11
Ordre	1	2	3	4	4	5	6	6	7	8

Notem que no és eficient usar el mètode RK-5 ja que amb l'RK-4 tenim el mateix ordre de convergència amb més rapidesa. Anàlogament és millor usar l'RK-7 que l'RK-8.

Com hem vist, la derivació i anàlisi dels mètodes numèrics per a PVI's normalment es basa en una mida fixa del pas h i el comportament de l'error, $\mathcal{O}(h^p) = Ch^p$, està garantit pel Teorema de Convergència.

Tot i així, no es coneix (l'ordre de magnitud de) la constant C que multiplica h^p a la fita $\mathcal{O}(h^p)$ i, en conseqüència, en el fons no tenim estimacions fiables de l'error.

D'altra banda, l'estratègia de fixar un pas únic a tot l'interval d'integració $I = [t_0, t_0+T]$ no és la més òptima. En efecte, la mateixa solució pot ser "plana" en certs subintervals de temps de l'interval I i de ràpida variació o "complicada" en d'altres zones.



Pas adaptatiu

Introducció (extreta parcialment de la Wikipedia)

Una manera de resoldre els dos problemes plantejats és la d'usar *mètodes amb pas adaptatiu*.

Els mètodes adaptatius estan dissenyats per produir una estimació fiable de l'error local de truncament a cada pas del mètode.

Durant la integració, la mida del pas h s'adapta de manera que l'error estimat es mantingui per sota d'un llindar definit per l'usuari: Si l'error és massa alt, es repeteix una iteració amb una mida de pas h inferior; si l'error és molt menor, s'augmenta la mida del pas h per estalviar iteracions. Això resulta en una mida d'h (gairebé) òptima, que estalvia temps de càlcul. A més, l'usuari no ha de dedicar temps a trobar una mida de pas adequada.

En el cas del mètodes de Runge-Kutta l'estimació de l'error local de truncament s'obté usant dos mètodes diferents amb ordres de consistència consecutius. A més, aquests mètodes es poden entrellaçar (és a dir, tenen passos intermedis comuns) de manera que el cost computacional total és equivalent al del mètode amb més etapes. Gràcies a això, l'estimació de l'error té un cost computacional baix o insignificant en comparació amb l'avaluació dels dos mètodes.

Estratègies generals de pas adaptatiu

Considerem un PVI: $\begin{cases} \dot{x} = f(t,x), \\ x(t_0) = x^\star, \end{cases}$

i un mètode numèric explícit d'un pas d'ordre de consistència p, per a calcular $x(t)$:

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + h\,\Phi(t_k, x_k, h), \\ x_0 = x(t_0) = x^\star. \end{cases}$$

Amb aquest mètode numèric calculem dues solucions aproximades d'$x(t_k + h)$ a partir d'$x(t_k)$. Una amb pas h:

$$x_{k+1}^{[1],h} := x(t_k) + h\,\Phi(t_k, x(t_k), h);$$

i l'altra iterant dues vegades el mètode amb pas $\frac{h}{2}$:

$$\widetilde{x}_{k+1/2} := x(t_k) + \tfrac{h}{2}\,\Phi\left(t_k, x(t_k), \tfrac{h}{2}\right), \text{ i}$$

$$x_{k+1}^{[2],h/2} := \widetilde{x}_{k+1/2} + \tfrac{h}{2}\,\Phi\left(t_k + \tfrac{h}{2}, \widetilde{x}_{k+1/2}, \tfrac{h}{2}\right).$$

Estratègies generals de pas adaptatiu

De la definició d'error local de truncament tenim

$$\begin{aligned} x(t_k+h) &= x(t_k) + h\,\Phi(t_k, x(t_k), h) + h\,\tau(t_k, h, \Phi) \\ &= x_{k+1}^{[1],h} + C(t_k)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}). \end{aligned}$$

D'altra banda,

$$\begin{aligned} x\left(t_k+\tfrac{h}{2}\right) &= x(t_k) + \tfrac{h}{2}\,\Phi\left(t_k, x(t_k), \tfrac{h}{2}\right) + \tfrac{h}{2}\,\tau\left(t_k, \tfrac{h}{2}, \Phi\right) \\ &= \widetilde{x}_{k+1/2} + C(t_k)\left(\tfrac{h}{2}\right)^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}), \text{ i} \\ x(t_k+h) &= x\left(t_k+\tfrac{h}{2}\right) + \tfrac{h}{2}\,\Phi\left(t_k+\tfrac{h}{2}, x\left(t_k+\tfrac{h}{2}\right), \tfrac{h}{2}\right) + \tfrac{h}{2}\,\tau\left(t_k+\tfrac{h}{2}, \tfrac{h}{2}, \Phi\right) \\ &= \widetilde{x}_{k+1/2} + C(t_k)\left(\tfrac{h}{2}\right)^{p+1} + C\left(t_k+\tfrac{h}{2}\right)\left(\tfrac{h}{2}\right)^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}) \\ &\qquad + \tfrac{h}{2}\,\Phi\left(t_k+\tfrac{h}{2}, x\left(t_k+\tfrac{h}{2}\right), \tfrac{h}{2}\right) \\ &\approx \widetilde{x}_{k+1/2} + \tfrac{h}{2}\,\Phi\left(t_k+\tfrac{h}{2}, \widetilde{x}_{k+1/2}, \tfrac{h}{2}\right) + 2C(t_k)\left(\tfrac{h}{2}\right)^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}) \\ &= x_{k+1}^{[2],h/2} + 2C(t_k)\left(\tfrac{h}{2}\right)^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}). \end{aligned}$$

Ara,

$$\begin{aligned} x_{k+1}^{[2],h/2} - x_{k+1}^{[1],h} &= C(t_k)h^{p+1} - 2C(t_k)\left(\tfrac{h}{2}\right)^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}) \\ &= C(t_k)h^{p+1}\left(1 - \tfrac{1}{2^p}\right) + \mathcal{O}(h^{p+2}) \end{aligned}$$

i, en conseqüència,

$$C(t_k)h^{p+1} = \frac{x_{k+1}^{[2],h/2} - x_{k+1}^{[1],h}}{1 - 2^{-p}} + \mathcal{O}(h^{p+2}) \text{ i, finalment,}$$

$$\begin{aligned} x(t_k + h) &= x_{k+1}^{[2],h/2} + \frac{1}{2^p} C(t_k)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}) \\ &= x_{k+1}^{[2],h/2} + \frac{1}{2^p} \frac{x_{k+1}^{[2],h/2} - x_{k+1}^{[1],h}}{1 - 2^{-p}} + \mathcal{O}(h^{p+2}) \\ &= x_{k+1}^{[2],h/2} + \frac{x_{k+1}^{[2],h/2} - x_{k+1}^{[1],h}}{2^p - 1} + \mathcal{O}(h^{p+2}). \end{aligned}$$

Estratègies generals de pas adaptatiu

Observem que, abusant una mica de la notació, $x_{k+1}^{[2],h/2}$ és una aproximació d'$x(t_k+h)$ obtinguda a partir d'$x(t_k)$ amb un mètode $\widetilde{\Phi}$ que consisteix a iterar Φ dues vegades.

L'error absolut d'aquesta aproximació és

$$\left|x(t_k+h)-x_{k+1}^{[2],h/2}\right| = \frac{1}{2^p}\varepsilon_{k+1}+\mathcal{O}(h^{p+2}), \quad \text{amb}$$

$$\varepsilon_{k+1} := \frac{\left|x_{k+1}^{[2],h/2}-x_{k+1}^{[1],h}\right|}{1-2^{-p}} = |C(t_k)|\ h^{p+1},$$

que dóna una aproximació de $x(t_k+h)$ d'ordre $p+1$.

Observació: aquest mètode d'estimar l'error no és eficient.

En primer lloc, requereix una quantitat important de càlcul: cal usar el mètode Φ com a mínim tres vegades a cada pas del temps. El segon punt negatiu és que no tenim cap possibilitat de controlar l'error real de truncament del mètode (un ordre més alt no sempre significa una precisió més alta).

Estratègies generals de pas adaptatiu

Amb aquesta nova determinació de l'error (local) podem calcular el pas més gran possible $h_{\max}$ tal que l'error absolut de truncament en aproximar $x(t_k + h_{\max})$ a partir d'$x(t_k)$ es mantingui per sota d'un *error màxim acceptable* $\varepsilon^\star$, predefinit. Dels càlculs anteriors s'obté,

$$\varepsilon_{k+1}\left(\frac{h_{\max}}{h}\right)^{p+1} = |C(t_k)|\ h_{\max}^{p+1} \approx \left|x(t_k + h_{\max}) - x_{k+1}^{[1],h_{\max}}\right| \leq \varepsilon^\star,$$

que és equivalent a:

$$h_{\max} \approx h\left(\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon_{k+1}}\right)^{\frac{1}{p+1}}.$$

Una primera conseqüència de la fórmula anterior és que si $\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon_{k+1}} \approx 1$, $h_{\max} \approx h$ i el pas h era correcte. El significat de *correcte* aquí és doble. D'una banda l'error absolut de truncament es manté per sota de l'error màxim acceptable $\varepsilon^\star$; i per l'altra, el pas és aproximadament el més gran possible amb aquesta restricció. Això implica que minimitzem el nombre d'iteracions del mètode i, per tant, el temps de càlcul.

La desigualtat $\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon_{k+1}} \gneqq 1$, implica que el pas h era correcte des del punt de vista d'afitar l'error màxim acceptable però que, per eficiència, cal augmentar el pas al proper iterat. Alternativament, $\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon_{k+1}} \lneqq 1$, implica que el pas h *no* era correcte i, per tant, cal disminuir-lo i repetir els càlculs de les aproximacions $x_{k+1}^{[1],h}$ i $x_{k+1}^{[2],h/2}$.

Com que la nostra estimació de l'error no és exacta, en comptes de comparar $\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon_{k+1}}$ amb 1, l'hauríem de comparar amb un factor de seguretat $\rho < 1$. Resumint, això dóna el següent algorisme de determinació del pas màxim per a la iteració següent:

$$h_{\max} = \rho\, h \left(\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon_{k+1}} \right)^{\frac{1}{p+1}}$$

amb $\rho \approx 0.9$.

Estratègies generals de pas adaptatiu

De la fórmula d'error de l'aproximació d'$x(t_k + h)$ per $x_{k+1}^{[2],h/2}$,

$$\varepsilon^\star \geq \left| x(t_k + h) - x_{k+1}^{[2],h/2} \right| = \frac{1}{2^p}\varepsilon_{k+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}),$$

s'obté un algorisme de pas adaptatiu més empíric i més senzill que l'anterior, en forma de tres regles:

$$\begin{cases} \text{Si } \varepsilon_{k+1} > 2^p\varepsilon^\star & \boxed{\text{dividim el pas } h \text{ per 2 } (h \mapsto \tfrac{h}{2}) \text{ i recalculem } x_{k+1}^{[1],h},\ x_{k+1}^{[2],h/2} \text{ i } \varepsilon_{k+1}.} \\ \text{Si } \varepsilon_{k+1} \ll 2^p\varepsilon^\star & \boxed{\text{acceptem } h \text{ i } x_{k+1}^{[2],h/2} \text{ com a aproximació d'} x(t_{k+1}) \text{ amb } t_{k+1} := t_k + h\text{; multipliquem el pas } h \text{ per 2 } (h \mapsto 2h) \text{ per a la iteració següent.}} \\ \text{Si } \varepsilon_{k+1} \leq 2^p\varepsilon^\star \text{ però } \varepsilon_{k+1} \not\ll 2^p\varepsilon^\star & \boxed{\text{acceptem } h \text{ i } x_{k+1}^{[2],h/2} \text{ com a aproximació d'} x(t_{k+1}) \text{ amb } t_{k+1} := t_k + h.} \end{cases}$$

Com hem explicat a la introducció, usarem *dos mètodes de Runge-Kutta entrellaçats, amb ordres de consistència consecutius*. Aquesta estratègia, originalment inventada per Fehlberg, dóna lloc als mètodes anomenats de Runge-Kutta-Fehlberg.

A cada pas, es calculen i comparen dues aproximacions d'$x(t+h)$, generades amb dos mètodes entrellaçats diferents; un d'ordre p i l'altre d'ordre $p+1$. Per eficiència computacional cada un dels dos mètodes ha de tenir el mínim nombre d'etapes compatible amb l'entrellaçament i els ordres desitjats.

La parella de mètodes de Runge-Kutta entrellaçats es representa mitjançant l'anomenada *Taula de Butcher Extesa*:

$$\begin{array}{c|cccc|c}
0 & & & & & \\
\alpha_2 & \beta_{2,1} & & & & \\
\alpha_3 & \beta_{3,1} & \beta_{3,2} & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
\alpha_m & \beta_{m,1} & \beta_{m,2} & \cdots & \beta_{m,m-1} & \\
\hline
 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{m-1} & c_m \\
 & c_1^\star & c_2^\star & \cdots & c_{m-1}^\star & c_m^\star
\end{array}$$

Les estimacions d'$x(t_k + h)$ donades pels dos mètodes entrellaçats a partir d'$x_k \approx x(t_k)$ (calculat en una iteració anterior) són:

$$x_{k+1}^{[p]} := x_k + h\,\Phi_{[p]}(t_k, x_k, h) = x_k + h \sum_{i=1}^{m} c_i\,\kappa_i(t_k, x_k), \text{ i}$$

$$x_{k+1}^{[p+1]} := x_k + h\,\Phi_{[p+1]}(t_k, x_k, h) = x_k + h \sum_{i=1}^{m} c_i^\star\,\kappa_i(t_k, x_k),$$

amb

$$\kappa_1(t_k, x_k) = f(t_k, x_k), \text{ i}$$

$$\kappa_\ell(t_k, x_k) = f\left(t_k + \alpha_\ell h, x_k + h \sum_{j=1}^{\ell-1} \beta_{\ell,j}\,\kappa_j(t_k, x_k)\right),$$

per $\ell = 2, 3, \ldots, m$.

Recordem que el mètode $\Phi_{[p]}$ té ordre p, mentre que $\Phi_{[p+1]}$ té ordre $p+1$.

La definició d'error local de truncament (acceptant x_k com el vertader valor d'$x(t_k)$) dóna:

$$\begin{aligned} x(t_k+h) &= x_{k+1}^{[p]} + h\,\tau(t_k,h,\Phi_{[p]}) \\ &= x_{k+1}^{[p]} + C(t_k)h^{p+1} + \mathcal{O}\left(h^{p+2}\right), \text{ i} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x(t_k+h) &= x_{k+1}^{[p+1]} + h\,\tau(t_k,h,\Phi_{[p+1]}) \\ &= x_{k+1}^{[p+1]} + C^{\star}(t_k)h^{p+2} + \mathcal{O}\left(h^{p+3}\right). \end{aligned}$$

En conseqüència, si denotem

$$\varepsilon_{k+1} := x_{k+1}^{[p+1]} - x_{k+1}^{[p]},$$

tenim

$$\varepsilon_{k+1} = \left(x(t_k+h) - x_{k+1}^{[p]}\right) - \left(x(t_k+h) - x_{k+1}^{[p+1]}\right) = C(t_k)h^{p+1} + \mathcal{O}\left(h^{p+2}\right).$$

Mètodes de Runge-Kutta entrellaçats amb pas adaptatiu

El primer requeriment fonamental que cal fer al mètode és que l'error de l'aproximació obtinguda estigui controlat. Més precisament, donat un *error màxim acceptable* $\varepsilon^\star$, volem que l'error de l'aproximació $x_{k+1}^{[p+1]}$ d'$x(t_k+h)$ estigui per sota d'$\varepsilon^\star$:

$$\varepsilon^\star > |\varepsilon_{k+1}| \approx \left| x(t_k+h) - x_{k+1}^{[p+1]} \right|.$$

Llavors, del càlcul de la pàgina anterior tenim:

$$\varepsilon^\star \gtrapprox \left| C(t_k) h^{p+1} \right|.$$

Pel càlcul de l'error i el pas adaptatiu estem seguint

Introduction to Numerical Analysis, J. Stoer and R. Bulirsch, Springer-Verlag, New York, 1980.
http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4757-5592-3

D'altra banda, seguint la mateixa filosofia de control de l'error, estem buscant el pas més gran possible h_{nou} tal que l'error de l'aproximació

$$x_{k+2}^{[p+1]}[h_{\text{nou}}] := x_{k+1}^{[p+1]} + h_{\text{nou}} \sum_{i=1}^{m} c_i^\star \, \kappa_i(t_{k+1}, x_{k+1}^{[p+1]}, h_{\text{nou}})$$

d'$x(t_{k+1} + h_{\text{nou}})$ (on $t_{k+1} = t_k + h$), calculada amb pas h_{nou} a partir de $\left(t_{k+1}, x_{k+1}^{[p+1]}\right)$, també estigui controlat per $\varepsilon^\star$:

$$\varepsilon^\star \geq \left| x(t_{k+1} + h_{\text{nou}}) - x_{k+2}^{[p+1]}[h_{\text{nou}}] \right|.$$

De la pàgina anterior i de la darrera identitat de la Pàgina 71 deduïm:

$$\varepsilon^\star \gtrapprox \left| C(t_{k+1}) h_{\text{nou}}^{p+1} \right| \approx \left| C(t_k) \right| \left| h_{\text{nou}}^{p+1} \right| \approx \frac{|\varepsilon_{k+1}|}{\left| h^{p+1} \right|} \left| h_{\text{nou}}^{p+1} \right|.$$

Per tant,

$$h_{\text{nou}} \approx h \left(\frac{\varepsilon^\star}{|\varepsilon_{k+1}|} \right)^{\frac{1}{p+1}}.$$

Com hem fet abans, donat que l'estimació de l'error no és exacta, es recomana implementar un factor de seguretat $\rho < 1$ que dóna la següent fórmula per h_{nou}:

$$h_{\text{nou}} \approx \rho\, h \left(\frac{\varepsilon^\star}{|\varepsilon_{k+1}|} \right)^{\frac{1}{p+1}},$$

amb $\rho \approx 0.9$.

Observació

Alguns autors, basats en experimentació numèrica intensiva, recomanen la següent versió modificada de la fórmula anterior:

$$h_{\text{nou}} \approx \rho\, h \left(\frac{\varepsilon^\star\, |h|}{|\varepsilon_{k+1}|} \right)^{\frac{1}{p}}.$$

Mètodes de Runge-Kutta entrellaçats amb pas adaptatiu

I ara, l'**RKF7(8)**

$$m = 13$$

0													
$\frac{2}{27}$	$\frac{2}{27}$												
$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{12}$											
$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{24}$	0	$\frac{1}{8}$										
$\frac{5}{12}$	$\frac{5}{12}$	0	$\frac{-25}{16}$	$\frac{25}{16}$									
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{20}$	0	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{5}$								
$\frac{5}{6}$	$\frac{-25}{108}$	0	0	$\frac{125}{108}$	$\frac{-65}{27}$	$\frac{125}{54}$							
$\frac{1}{6}$	$\frac{31}{300}$	0	0	0	$\frac{61}{225}$	$\frac{-2}{9}$	$\frac{13}{900}$						
$\frac{2}{3}$	2	0	0	$\frac{-53}{6}$	$\frac{704}{45}$	$\frac{-107}{9}$	$\frac{67}{90}$	3					
$\frac{1}{3}$	$\frac{-91}{108}$	0	0	$\frac{23}{108}$	$\frac{-976}{135}$	$\frac{311}{54}$	$\frac{-19}{60}$	$\frac{17}{6}$	$\frac{-1}{12}$				
1	$\frac{2383}{4100}$	0	0	$\frac{-341}{164}$	$\frac{4496}{1025}$	$\frac{-301}{82}$	$\frac{2133}{4100}$	$\frac{45}{82}$	$\frac{45}{164}$	$\frac{18}{41}$			
0	$\frac{3}{205}$	0	0	0	0	$\frac{-6}{41}$	$\frac{-3}{205}$	$\frac{-3}{41}$	$\frac{3}{41}$	$\frac{6}{41}$	0		
1	$\frac{-1777}{4100}$	0	0	$\frac{-341}{164}$	$\frac{4496}{1025}$	$\frac{-289}{82}$	$\frac{2193}{4100}$	$\frac{51}{82}$	$\frac{33}{164}$	$\frac{12}{41}$	0	1	
	$\frac{41}{840}$	0	0	0	0	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{41}{840}$	0	0
	0	0	0	0	0	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{280}$	0	$\frac{41}{840}$	$\frac{41}{840}$

L'**RKF7(8)** està completament determinat per la seva Taula de Butcher Extesa. La que es mostra és la versió de Fehlberg.

Notem però que la Taula de Butcher extesa d'un mètode de Runge-Kutta-Fehlberg entrellaçat no és única.

Descripció dels paràmetres

paràmetre	tipus	valor
t	E/S	Node de discretització actual
x	E/S	Aproximació d'$x(t)$ actual (obtinguda amb l'RK-8)
h	E/S	A l'entrada: pas d'integració proposat. A la sortida: h_{nou} calculat internament
$h_{\min}$	E	Valor absolut del pas mínim permès
$h_{\max}$	E	Valor absolut del pas màxim permès
ε	S	Error estimat de l'aproximació obtinguda
$\varepsilon^\star$	E	Error màxim acceptable
f	E	Funció que calcula el camp de vectors al punt (t, x)

Llegenda de la segona columna: **E** denota paràmetre d'entrada; **S** denota paràmetre de sortida.

RKF7(8) en pseudocodi

procedure $\mathrm{RKF7(8)}(t,\ x,\ h,\ h_{\min},\ h_{\max},\ \varepsilon,\ \varepsilon^\star,\ f)$

$\alpha[2:13] \leftarrow \frac{2}{27}, \frac{1}{9}, \cdots, 1$

$\beta[\ell = 2:13][1:\ell-1] \leftarrow \frac{2}{27}, \frac{1}{36}, \frac{1}{12}, \cdots, 1$

$c[1:11] \leftarrow \frac{41}{840}, 0, 0, 0, 0, \frac{34}{105}, \cdots, 0$

$c^\star[1:13] \leftarrow 0, 0, 0, 0, 0, \frac{34}{105}, \cdots, \frac{41}{840}$

$\rho \leftarrow 0.9$

▷ *Inicialització de la Taula de Butcher Ampliada i de ρ*

$h \leftarrow \mathrm{sign}(h) \cdot \min\{h_{\max}, \max\{h_{\min}, |h|\}\}$ ▷ *Per seguretat forcem h dins del seu rang*

$\kappa[1] \leftarrow f(t, x)$ ▷ *κ_1 no depèn d'h; no cal que estigui al llaç principal*

while `true` **do** ▷ *Un llaç infinit (a priori)*

  for ℓ from 2 to 13 **do**

    $\kappa[\ell] \leftarrow f\left(t + \alpha[\ell]\cdot h, x + h\sum_{j=1}^{\ell-1}\beta[\ell][j]\cdot\kappa[j]\right)$ ▷ *Calculem la resta de κ_ℓ's (que depenen d'h)*

  end for

  $x7 \leftarrow h\sum_{i=1}^{11} c[i]\cdot\kappa[i]$

  $x8 \leftarrow h\sum_{i=6}^{13} c^\star[i]\cdot\kappa[i]$

  if `isnan`$(x8)$ **or** `isnan`$(x7)$ **then return** `error`; **end if**

  $\varepsilon \leftarrow |x7 - x8|$

  if $\varepsilon < \varepsilon^\star$ **then** ▷ *El nivell d'error de la nova aproximació és acceptable. Sortim actualitzant t, x i calculant la nova h.*

    $t \leftarrow t + h$ ▷ *Actualitzem t*

    $x \leftarrow x + x8$ ▷ *Actualitzem x*

    if $\varepsilon < \frac{\varepsilon^\star}{2^8}$ **then** $h \leftarrow \operatorname{sign}(h)\cdot\min\{h_{\max}, 2\rho|h|\}$; **return**; **end if**

    $h \leftarrow \operatorname{sign}(h)\cdot\min\left\{h_{\max}, \max\left\{h_{\min}, |h|\cdot\rho\cdot\sqrt[8]{\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon}}\right\}\right\}$

    return

  end if ▷ *A partir d'aquí l'error és gran: $\varepsilon \geq \varepsilon^\star$. En particular $\sqrt[8]{\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon}} \leq 1$.*

  if $|h| \leq h_{\min}$ **then** $t \leftarrow t + h$; $x \leftarrow x + x8$; $h \leftarrow h_{\min}$; **return**; **end if**

  $h \leftarrow \operatorname{sign}(h)\cdot\max\left\{h_{\min}, |h|\cdot\rho\cdot\sqrt[8]{\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon}}\right\}$ ▷ *Actualització d'h quan l'error és gran, per a recalcular x7 i la predicció $x + x8$. Donat que $|h| \leq h_{\max}$, ja es compleix $|h|\cdot\rho\cdot\sqrt[8]{\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon}} \leq \rho\, h_{\max} < h_{\max}$.*

end while

end procedure

Encara que l'error de la nova aproximació sigui molt petit, no volem que el nou pas sigui massa gran.

El controlem i sortim.

En aquesta situació l'error és gran i *no podem reduir el pas*. És a dir, *no es pot aconseguir una aproximació amb el nivell d'error desitjat*.

El pas no es pot reduir perquè

$$\min\left\{h_{\max}, \max\left\{h_{\min}, |h|\cdot\rho\cdot\sqrt[8]{\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon}}\right\}\right\} = h_{\min},$$

que se segueix trivialment de la desigualtat

$$|h|\cdot\rho\cdot\sqrt[8]{\frac{\varepsilon^\star}{\varepsilon}} \leq \rho\, h_{\min} < h_{\min}.$$

El valor de l'error (de sortida) mesura el nivell de qualitat de l'aproximació, i informa de que aquest és baix.

Implementació en C del mètode Runge-Kutta-Fehlberg-7(8): declaracions i inicialitzacions
ATENCIÓ: La declaració de les β's és infinita i s'acaba dues pàgines més endavant

```
#define MIN(x,y) ((x) < (y) ? (x) : (y))
#define MAX(a,b) ((a) > (b) ? (a) : (b))

double eighthroot (double);

/* alpha[i]'s DICTIONARY: α_1 = 0; α_i = alpha[i-2] for i=2,3,4,...,10;
                          α_{11} = 1; α_{12} = 0; α_{13} = 1 */
static double alpha[9] = { 2.e0/27.e0, 1.e0/9.e0, 1.e0/6.e0, 5.e0/12.e0,
                           0.5e0, 5.e0/6.e0, 1.e0/6.e0, 2.e0/3.e0, 1.e0/3.e0 };

/* beta's DICTIONARY is intertwinned with the declaration and initialization:
 *            β_{2,1} = beta21 */
static double beta21 = 2.e0/27.e0,
/*            β_{3,j} = beta3[j-1] for j = 1,2 */
              beta3[2] = { 1.e0/36.e0, 1.e0/12.e0 },
/*            β_{4,1} = beta41; β_{4,2} = 0; β_{4,3} = beta43 */
              beta41 = 1.e0/24.e0, beta43 = 1.e0/8.e0,
/*            β_{5,1} = beta51; β_{5,2} = 0; β_{5,3} = beta53; β_{5,4} = beta54 */
              beta51 = 5.e0/12.e0, beta53 = -25.e0/16.e0, beta54 = 25.e0/16.e0,
/*            β_{6,1} = beta61; β_{6,2} = β_{6,3} = 0;
 *                          β_{6,j} = beta6[j-4] for j = 4,5 */
              beta61 = 0.5e-1, beta6[2] = { 0.25e0, 0.2e0 },
```

Implementació en **C** del mètode Runge-Kutta-Fehlberg-7(8): declaracions i inicialitzacions (II)

```
/*              β_{7,1} = beta71; β_{7,2} = β_{7,3} = 0;
 *                              β_{7,j} = beta7[j-1] for j = 4,5,6 */
                beta71 = -25.e0/108.e0,
                beta7[3] = { 125.e0/108.e0, -65.e0/27.e0, 125.e0/54.e0 },
/*              β_{8,1} = beta81; β_{8,2} = β_{8,3} = β_{8,4} = 0;
 *                              β_{8,j} = beta8[j-5] for j = 5,6,7 */
                beta81 = 31.e0/300.e0,
                beta8[3] = { 61.e0/225.e0, -2.e0/9.e0, 13.e0/900.e0 },
/*              β_{9,1} = beta91; β_{9,2} = β_{9,3} = 0;
 *                              β_{9,j} = beta9[j-4] for j = 4,5,6,7,8 */
                beta91 = 2.e0, beta9[5] = { -53.e0/6.e0, 704.e0/45.e0,
                                            -107.e0/9.e0, 67.e0/90.e0, 3.e0 },
/*              β_{10,1} = betax1; β_{10,2} = β_{10,3} = 0;
 *                               β_{10,j} = betax[j-4] for j = 4,5,6,7,8,9 */
                betax1 = -91.e0/108.e0, betax[6] = { 23.e0/108.e0, -976.e0/135.e0,
                        311.e0/54.e0, -19.e0/60.e0, 17.e0/6.e0, -1.e0/12.e0 },
/*              β_{11,1} = betaxi1; β_{11,2} = β_{11,3} = 0;
 *                               β_{11,j} = betaxi[j-4] for j = 4,5,6,7,8,9,10 */
                betaxi1 = 2383.e0/4100.e0,
                betaxi[7] = { -341.e0/164.e0, 4496.e0/1025.e0, -301.e0/82.e0,
                          2133.e0/4100.e0, 45.e0/82.e0, 45.e0/164.e0, 18.e0/41.e0 },
```

Implementació en **C** del mètode Runge-Kutta-Fehlberg-7(8): declaracions i inicialitzacions (III)

```
/*            β_{12,1} = betaxii1; β_{12,2} = β_{12,3} = β_{12,4} = β_{12,5} = 0;
 *            β_{12,j} = betaxii[j-6] for j = 6,7,8,9,10; β_{12,11} = 0 */
              betaxii1 = 3.e0/205.e0, betaxii[5] = { -6.e0/41.e0, -3.e0/205.e0,
                                                     -3.e0/41.e0, 3.e0/41.e0, 6.e0/41.e0 },
/*            β_{13,1} = betaxiii1; β_{13,2} = β_{13,3} = 0;
 *                                  β_{13,j} = betaxiii[j-4] for j=4,5,6,7,8,9,10;
 *                                  β_{13,11} = 0; β_{13,11} = 1 */
              betaxiii1 = -1777.e0/4100.e0,
              betaxiii[7] = { -341.e0/164.e0, 4496.e0/1025.e0, -289.e0/82.e0,
                     2193.e0/4100.e0, 51.e0/82.e0, 33.e0/164.e0, 12.e0/41.e0 };
/* β's end of declaration and initialization */

/* c78[i]'s DICTIONARY: c_1 = c78_0xi; c_2 = c_3 = c_4 = c_5 = 0;
                        c_i = c78[i-6] for i = 6,7,8,9,10;
                        c_{11} = c78_0xi; c_{12} = c_{13} = 0.
                        c*_1 = c*_2 = c*_3 = c*_4 = c*_5 = 0;
                        c*_i = c78[i-6] for i = 6,7,8,9,10;
                        c_{11} = 0; c_{12} = c_{13} = c78_0xi.     */
static double c78[5] = { 34.e0/105.e0, 9.e0/35.e0, 9.e0/35.e0,
                         9.e0/280.e0, 9.e0/280.e0 },
              c78_0xi = 41.e0/840.e0;

static double rho = 0.9;
```

Implementació en C del mètode Runge-Kutta-Fehlberg-7(8)

```
/* The procedure RKF78 integrates forward the vector field: it computes an
 * approximation of x(t + h) starting at x \approx x(t) WITH h POSITIVE.
 * This function assumes WITHOUT CHECKING IT that 0 < hmin <= h <= hmax. */

int RKF78 (double *t, double *x,
           double *h, double *err,
           double hmin, double hmax, double tol,
           void *ParmsStruct,
           void (*ODE)(double, double, double *, void *))
{   double kappa[13]; // kappa's DICTIONARY: k_i = kappa[i-1]

/* k_1 */       ODE(*t, *x, kappa, ParmsStruct);

    while (1) {
/* k_2 */       ODE(*t + alpha[0] * *h,
                    *x + *h * beta21 * kappa[0], kappa+1, ParmsStruct);
/* k_3 */       ODE(*t + alpha[1] * *h,
                    *x + *h * (beta3[0] * kappa[0] + beta3[1] * kappa[1]),
                    kappa+2, ParmsStruct);
/* k_4 */       ODE(*t + alpha[2] * *h,
                    *x + *h * (beta41 * kappa[0] + beta43 * kappa[2]),
                    kappa+3, ParmsStruct);
```

Que és més ràpid?:

- `betax[5] * kappa[8];`
- `kappa[8] / 12;` o
- `kappa[8] * 8.33333333333333333e-2;`

Implementació en C del mètode Runge-Kutta-Fehlberg-7(8): continuació del càlcul de les κ's

```
/* k_5 */       ODE(*t + alpha[3] * *h,
                    *x + *h * (beta51 * kappa[0] + beta53 * kappa[2] +
                               beta54 * kappa[3]),
                    kappa+4, ParmsStruct);
/* k_6 */       ODE(*t + alpha[4] * *h,
                    *x + *h * (beta61 * kappa[0] + beta6[0] * kappa[3] +
                               beta6[1] * kappa[4]),
                    kappa+5, ParmsStruct);
/* k_7 */       ODE(*t + alpha[5] * *h,
                    *x + *h * (beta71 * kappa[0] + beta7[0] * kappa[3] +
                               beta7[1] * kappa[4] + beta7[2] * kappa[5]),
                    kappa+6, ParmsStruct);
/* k_8 */       ODE(*t + alpha[6] * *h,
                    *x + *h * (beta81 * kappa[0] + beta8[0] * kappa[4] +
                               beta8[1] * kappa[5] + beta8[2] * kappa[6]),
                    kappa+7, ParmsStruct);
/* k_9 */       ODE(*t + alpha[7] * *h,
                    *x + *h * (beta91 * kappa[0] + beta9[0] * kappa[3] +
                               beta9[1] * kappa[4] + beta9[2] * kappa[5] +
                               beta9[3] * kappa[6] + beta9[4] * kappa[7]),
                    kappa+8, ParmsStruct);
```

Implementació en C del mètode Runge-Kutta-Fehlberg-7(8): continuació del càlcul de les κ's (II)

```
/* k_10 */      ODE(*t + alpha[8] * *h,
                    *x + *h * (betax1 * kappa[0] + betax[0] * kappa[3] +
                               betax[1] * kappa[4] + betax[2] * kappa[5] +
                               betax[3] * kappa[6] + betax[4] * kappa[7] +
                               betax[5] * kappa[8]),
                    kappa+9, ParmsStruct);
/* k_11 */      ODE(*t + *h,
                    *x + *h * (betaxi1 * kappa[0] + betaxi[0] * kappa[3] +
                               betaxi[1] * kappa[4] + betaxi[2] * kappa[5] +
                               betaxi[3] * kappa[6] + betaxi[4] * kappa[7] +
                               betaxi[5] * kappa[8] + betaxi[6] * kappa[9]),
                    kappa+10, ParmsStruct);
/* k_12 */      ODE(*t,
                    *x + *h * (betaxii1 * kappa[0] + betaxii[0] * kappa[5] +
                               betaxii[1] * kappa[6] + betaxii[2] * kappa[7] +
                               betaxii[3] * kappa[8] + betaxii[4] * kappa[9]),
                    kappa+11, ParmsStruct);
/* k_13 */      ODE(*t + *h,
                    *x + *h * (betaxiii1 * kappa[0] + betaxiii[0] * kappa[3] +
                               betaxiii[1] * kappa[4] + betaxiii[2] * kappa[5] +
                               betaxiii[3] * kappa[6] + betaxiii[4] * kappa[7] +
                               betaxiii[5] * kappa[8] + betaxiii[6] * kappa[9] +
                               kappa[11]),
                    kappa+12, ParmsStruct);
```

Implementació en C del mètode Runge-Kutta-Fehlberg-7(8): El nucli del pas adaptatiu

```
        double x7  = c78[0] * kappa[5] + c78[1] * kappa[6] + c78[2] * kappa[7] +
                     c78[3] * kappa[8] + c78[4] * kappa[9],
               x8  = x7 + c78_0xi * (kappa[11] + kappa[12]);
               x7 += c78_0xi * (kappa[0] + kappa[10]);

               if (isnan(x7) || isnan(x8)) return 66;

               *err   = *h * fabs (x8 - x7);
               x8     = *x + *h * x8;
        double tolrel = tol * (1 + fabs(x8)/100.0);

               if (*err < tolrel) { *t += *h; *x = x8;
                   if (*err <= ldexp(tolrel, -8)) {
                       *h *= (rho + rho);
                       *h  = MIN(hmax, *h);
                       return 0;
                   }
                   *h *= rho * eighthroot(tolrel / *err);
                   *h  = MIN(hmax, MAX(hmin, *h))
                   return 0;
               }

               if (*h <= hmin) { *t += *h; *x = x8; *h = hmin; return 0; }

               *h *= rho * eighthroot(tolrel / *err); *h = MAX(hmin, *h);
    } // End of main while loop; going to recompute the RK78 estimates
    return 0;
} /* and this is the end */
```

L'error màxim acceptable `tol` es "tuneja" en funció de `fabs(x8)` penalitzat dos digits.

- Quan `fabs(x8)` és petit, `tolrel` $\approx$ `tol` i, com diu la teoria, s'usa com *error absolut*.
- Quan `fabs(x8)` és gran,

`tolrel` $=$ `tol`$\cdot(1+\delta)$ *amb* $\delta = \frac{\texttt{fabs(x8)}}{100}$.

Com que `tol` > 0, $\delta = \frac{\texttt{tolrel}-\texttt{tol}}{\texttt{tol}}$ i `tolrel` és una aproximació de `tol` amb *error relatiu* $\delta = \frac{\texttt{fabs(x8)}}{100}$.

Exercici fàcil i mecànic de programació (temps indicatiu 5 minuts)

Programar una variant de l'**RKF7(8)**, que es podria dir

```
int RKF78backward (double *t, double *x, double *h, double *err,
                   double hmin, double hmax, double tol,
                   void *ParmsStruct,
                   void (*ODE)(double, double, double *, void *))
```

que, mantenint la h positiva, integri a temps negatiu.

Exercici mecànic però no tan fàcil

Programar l'**RKF7(8)** per camps vectorials (sistemes).

Un exemple complet i comentat d'integració d'un PVI

Considerem el següent problema de valor inicial

$$\begin{pmatrix} \dot{w}(t) \\ \dot{s}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s(t) \\ \alpha w(t)^r \end{pmatrix} \qquad \text{amb} \qquad w(t_0) = w_0 \text{ i } s(t_0) = s_0,$$

on α és un paràmetre.

Volem integrar aquest PVI per diferents valors d's_0, desde $t_0 = 0$ amb $w_0 = 4$ fins a $t_{\text{final}} = 1$, prenent $\alpha = \frac{3}{2}$ i $r = 2$.

Els resultats es mostren a la taula següent

s_0	$w(t_{\text{final}})$	**Error Màxim**
10	2.00066e+24	1.79769e+308 ($t_{\text{final}} = 0.966803$)
2	199.191416	1.41689e-14
0	87.080122	4.98599e-15
-2	40.780432	1.95395e-15
-5	12.057576	7.51366e-16
-10	-2.400837	9.10855e-16

Atenció: Que ha passat a la primera línia de la taula (per $s_0 = 10$).

Mirar el significat d'**Error Màxim** directament al codi.

Un exemple complet i comentat d'integració d'un PVI

L'inici del programa

`Integra2tfin`: un procediment prescindible que es podria posar al `main`

```
#include <stdio.h>
#include "RKF78.h"

double
Integra2tfin (double *t, double w[], double tfin, void *Parms,
              void (*CV) (double,double *,unsigned,double *,void *))
{
  double hmin = 1.e-8, hmax = 1.0, h = 1.e-6, err, maxerr = -1.0;

  while (*t + h < tfin)
    {
      if (RKF78_VF_forward
          (t, w, 2, &h, &err, hmin, hmax, 1.e-15, Parms, CV))
        return MAXDOUBLE;
      maxerr = MAX (maxerr, err);
    }

  double tt = *t;
  h = tfin - *t;
  *t = tfin;
  maxerr = MAX (maxerr, RKF78_VF_1step(tt, w, 2, h, Parms, CV));
  return maxerr;
}
```

"Header" condicionat per les crides als procediments d'integració **RKF7(8)**.

Aquest **while** és la solució estàndard d'un dels problemes típics del pas variable: "clavar" el temps final.

Aquí és realment on s'integra exactament fins el temps final.

Volem que `*t` retorni el tems final d'integració (especialment en cas d'error).

Un exemple complet i comentat d'integració d'un PVI

El programa (ara si)

struct és un (l'únic?) contenidor universal. Admet variables de tots els tipus, vectorialitzades o no. És la manera més senzilla d'agrupar un **double** i un **int**.

```
typedef struct { double alpha; int r; } ODE_Parameters;

void
CampVectorial (double t, double w[], unsigned n,
               double f[], void *pars)
{
  f[0] = w[1];
  f[1] = ((ODE_Parameters *) pars)->alpha *
         pow (w[0], ((ODE_Parameters *) pars)->r);
}

int
main ()
{ double max_error;
  ODE_Parameters CVPars = {1.5e0, 2};
  double t = 0.0,
         s = -10.0,
         w[2] = { 4.0, s };

  max_error = Integra2tfin (&t, w, 1.0, &CVPars, CampVectorial);

  printf("s_0 = %lf; tfinal = %lf; w(tfin) = %lf; max_error = %g\n",
          s, t, w[0], max_error);
  return 0;
}
```

Forçament de tipus (cast). Per a poder usar `alpha` i `r` hem de passar `pars` de `void *` a `ODE_Parameters *`.

Imposada per la implementació de la **RKF7(8)**: `void(*)(double, double *, unsigned, double *, void *)`
El fet de declarar `pars` com `void *` és un truc estàndard per a no condicionar el tipus de paràmetre que es passa (o dit d'altra manera, per passar qualsevol cosa). El preu que es paga és que després `pars` s'ha de convertir a alguna cosa útil (i coneguda) per la funció.

En aquest cas, la `t` i la `n` no s'usen (camp autònom).

Cal passar un apuntador a l'estructure `CVPars`.

Molt malament que s_0 estigui "hardcoded" en comptes que sigui un paràmetre del **main**. Això obliga a compilar el programa cada vegada que cal canviar s_0.

És molt mala idea que una potència sigui un paràmetre. La funció `pow` és (moooolt) lenta i fa augmentar l'error. Per potències enteres que obligatòriament hagin de ser paràmetres això s'hauria de programar millor.

Un exemple complet i comentat d'integració d'un PVI

Observació terminològica

Tenim in problema amb la paraula *paràmetres*. A la discussió següent, la paraula surt fent referència al conjunt de paràmetres d'una EDO barrejada amb referències als paràmetres de la crida a un procediment informàtic (o subrutina). Per evitar confusions, encara que sigui una mica pesat, usarem la següent terminologia que, de fet, és bastant òbvia:

- Conjunt de paràmetres d'una EDO.
- Paràmetre o paràmetres de capçalera d'una subrutina.

Exercici fàcil i mecànic de programació

Modificar el programa anterior de manera que en comptes de donar, com ara, l'aproximació $w(\texttt{tfin})$ de la solució a $t = \texttt{tfin}$ doni les aproximacions (i temps) obtinguts a tots el passos d'integració, de manera que es pugui dibuixar la solució aproximada entre $t_0 = 0$ i $t = \texttt{tfin}$. A més, ja que hi estem posats, dibuixar les solucions.

Un exemple complet i comentat d'integració d'un PVI

Comentaris detallats sobre les subrutines RKF7(8): Els paràmetres de capçalera

paràmetre de capçalera	tipus	valor
`*t`	E/S	Node de discretització actual
x	E/S	Aproximació actual d'$x(t)$ (obtinguda amb l'RKF8)
`dim`	E	Dimensió del vector x i de la funció f
h	E/S	A l'entrada: pas d'integració proposat. A la sortida: h_{nou} calculat internament
$\varepsilon =$ `*err`	S	Norma de l'error estimat de l'aproximació obtinguda
$h_{\min}$	E	Valor absolut del pas mínim permès
$h_{\max}$	E	Valor absolut del pas màxim permès
$\varepsilon^\star =$ `tol`	E	Error màxim acceptable en norma
`*Parms`	E	Apuntador (pot ser **NULL**) al contenidor del conjunt de paràmetres de l'EDO f. Aquesta funció, òbviament, està programada depenent del contingut de `*Parms`

`*VF`	E	(Apuntador a la) Funció f, que avalua el camp de vectors al punt $(t, x(t))$. Aquest procediment *ha de tenir* el següent prototipus:
		`void (*)(double, double *, unsigned, double *, void *)`
		o, per més claredat (encara que els noms de les variables no estan fixats), la següent capçalera:
		`void (*)(double t, double x[], unsigned dim, double f[], void *Parms)`

Tipus de paràmetres de capçalera de les RKF7(8): **E** = Entrada; **S** = Sortida

El procediment RKF78_VF_forward

```
int RKF78_VF_forward (double *t, double x[], unsigned dim,
    double *h, double *err,
    double hmin, double hmax, double tol,
    void *Parms,
    void (*VF)(double, double *, unsigned, double *, void *))
```

És el procediment Runge-Kutta-Fehlberg-7(8) vist anteriorment (veure les pàgines 77, 79 i següents), adaptat per camps de vectors (és a dir per dimensió més gran que 1) i amb integració endavant (és a dir, amb $t \longmapsto t + h$).

Observem com s'utilitza dins d'`Integra2tfin` per aproximar el temps final d'integració final sense superar-lo.

El procediment `RKF78_VF_1step`: És realment necessari?

```
double RKF78_VF_1step (double t, double x[], unsigned dim,
       double h, void *Parms,
       void (*VF)(double, double *, unsigned, double *, void *))
```

És una simplificació del procediment `RKF78_VF_forward` sense el control automàtic de pas. Solament calcula la predicció `RKF8` a $t + h$ a partir d'$x(t)$, juntament amb l'error de predicció $\varepsilon =$ `*err`. Observem que, t i h són paràmetres (només) d'entrada de la subrutina `RKF78_VF_1step`, $h_{\min}$, $h_{\max}$ i $\varepsilon^\star =$ `tol` no són necessaris i $\varepsilon =$ `*err` s'obté com a valor de retorn.

NOTA: Això també es podria fer amb el codi

```
h = tfin - *t;
RKF78_VF_forward
  (t, w, 2, &h, &err, hmin, hmax, 1.e-15, Parms, CV);
```

però hi ha un problema: el procediment `RKF78_VF_forward` té permís per canviar el pas h. El pas h_{nou}, s'ha calculat a la iteració anterior (la darrera del **while**) al node `*t` - h_{vell}, amb el $w(t)$ anterior. Llavors, `h = tfin - *t` és més petit que el pas h_{nou} però l'`RKF78_VF_forward`, internament, pot decidir recalcular h i donar una predicció de la solució a un punt `*t < tfin`.

Perquès i cóms del paràmetre de capçalera `void *Parms`

Quin és el problema?

Els procediments d'integració **RKF7(8)** necessiten cridar les funcions que calculen les EDO's i Camps de Vectors (veure les pàgines 77 i 82–84).
Si aquestes funcions usen un conjunt de paràmetres per avaluar l'EDO, cal passar els hi des del mòdul que crida els procediments **RKF7(8)**.

Una pràctica habitual per a fer això és usar variables globals; un estil dolent i perillós de programació. La manera correcta de fer-ho és passar el conjunt de paràmetres de l'EDO a l'**RKF7(8)** i programar-la de manera que l'**RKF7(8)**, al seu torn, el passi a les funcions que avaluen les EDOS.

El problema d'això és que les EDO's tenen moltes classes de conjunts paràmetres: des de *no hi ha paràmetres* fins a un barrejat de tipus diferents de dades; vectors o no (com a l'exemple que estem discutint, on hem forçat artificialment que els paràmetres siguin un **double** i un **int**).

El paràmetre de capçalera `void *Parms` de les subrutines RKF7(8)

Dóna una manera general, independent de les diferents combinacions possibles de tipus de dades, de passar un conjunt de paràmetres a les EDO's a través de l'**RKF7(8)**.

Òbviament, en aquest context, cal unificar part de les capçaleres dels procediments **RKF7(8)** i de les funcions que calculen les EDO's i els Camps de Vectors. Així mateix el codi d'aquestes darreres funcions també està condicionat pel contingut de `*Parms`.

Ho veurem amb uns exemples concrets (apart del programa anterior).

Perquès i cóms del paràmetre de capçalera `void *Parms`

Exemples concrets (a més del programa anterior) d'us de `void *Parms`

L'exemple més simple: no hi ha paràmetres

```
void CV (double t, double w[], unsigned n, double f[], void *Pars){
     f[0] = w[1]; f[1] = 1.5e0 * w[0] * w[0];
}

int main () {
    RKF78_VF_forward (., ., ., ., ., ., ., ., NULL, CV);
```

Exemple d'un sol paràmetre (també és pot fer amb **typedef struct**)

```
void CV (double t, double w[], unsigned n, double f[], void *Pars){
     f[0] = w[1]; f[1] = *((double *) Pars) * w[0] * w[0];
}

int main () { double alpha = 1.5e0;
              RKF78_VF_forward (., ., ., ., ., ., ., ., &alpha, CV);
```

Exemple de paràmetres vectoritzats del mateix tipus i amb nombre fixat

```
void CV (double t, double w[], unsigned n, double f[], void *Pars){
     f[0] = w[1];
     f[1] = ((double *) Pars)[0] * pow (w[0], ((double *) Pars)[1]);
}

int main () { double CVPars[2] = { 1.5e0, 2.0 };
              RKF78_VF_forward (., ., ., ., ., ., ., ., CVPars, CV);
```

Atenció: un vector ja és un apuntador. No cal &.

Perquès i cóms del paràmetre de capçalera `void *Parms`

Recapitulant: com funciona

El procés de passar un conjunt de paràmetres a les EDO's a través dels procediments **RKF7(8)** es basa en el següent:

1. Cal "empaquetar" el conjunt de paràmetres de l'EDO en *un únic contenidor de paràmetres*. Quan el conjunt de paràmetres té estructura complicada (diversos tipus de dades; vectors i dimensions dels vectors, ...) cal crear un nou tipus de dades dedicat amb **typedef struct** (veure el programa d'exemple a la pàgina 89).

2. El prototip de les subrutines **RKF7(8)** obliga a passar el contenidor del conjunt de paràmetres de l'EDO com a apuntador, sense especificar-ne el tipus. És a dir, com a `void *`. Si el conjunt de paràmetres de l'EDO és buit, es passa **NULL** com a paràmetre de capçalera de la subrutina.

Perquès i cóms del paràmetre de capçalera `void *Parms`

Recapitulant: com funciona (cont.)

3. Les funcions que calculen les EDO's i els Camps de Vectors reben el contenidor del conjunt de paràmetres igual com es passa: com a `void *`. Com a conseqüència l'EDO no coneix el tipus (ni el contingut) del contenidor del conjunt de paràmetres i, per a poder usar-lo, cal fer un forçament de tipus (o `cast`) que el passi de `void *` al tipus correcte predefinit (veure les funcions `CampVectorial` i `CV` als quatre exemples anteriors).

   Òbviament, aquests `cast`'s estan determinats per la declaració del tipus de dades del contenidor del conjunt de paràmetres de l'EDO.

Perquè cal passar el contenidor del conjunt de paràmetres com apuntador

Un primer motiu senzill és que els apuntadors admeten el valor **NULL = no definit**. Amb variables caldria definir un codi específic de **no hi ha conjunt de paràmetres**.

El motiu important és que *quasi mai* s'ha de passar una estructura a una subrutina. Cal passar un *apuntador a l'estructura*.

Recordem que, en C, els paràmetres de capçalera de les subrutines es passen *per valor*. Això vol dir que, quan un programa crida una subrutina i l'hi passa una variable com a paràmetre de capçalera, el contingut de la variable es còpia a la variable local corresponent de la subrutina. En particular si estem passant, per exemple, una estructura que ocupa 2MB en memòria, estem copiant *per valor* 2MB cada vegada que cridem la subrutina. En canvi, si passem un apuntador a l'estructura estem copiant solament els 8 bytes de l'adreça inicial de l'estructura.


GOOD LUCK