Trabalho 1 **Processos Iterativos**

Solução de equações não-lineares

Dayanne Fernandes da Cunha, 13/0107191 Yurick Hauschild, 12/0024136

¹Dep. Matemática – Universidade de Brasília (UnB) Cálculo Numérico – Turma A

dayannefernandesc@gmail.com, yurick.hauschild@gmail.com

Resumo. Este relatório corresponde aos informativos das resoluções do Trabalho 1 de Cálculo Numérico da Turma A do semestre 2016/2.

1. Parte I : Processos iterativos

Esta primeira questão será sobre as bifurcações do mapa logístico. Considere o processo iterativo da Equação 1, chamado de mapa logístico. Este processo iterativo, apesar de aparentar ser bastante simples, tem uma dinâmica muito rica, que será analisada em detalhes ao longo desta parte 1 do trabalho.

$$x_{n+1} = \lambda x_n (1 - x_n) \tag{1}$$

De suas análises, você deve obter que para $\lambda > 3$, nenhum ponto fixo é assintoticamente estável. Porém, vamos ver o que acontece quando $\lambda \geq 3$. Já em $\lambda = 3$, você verá que o sistema tem um comportamento interessante: apesar das iterações não convergirem para um ponto fixo, o sistema irá oscilar, depois de algumas iterações, entre dois valores fixos. Quando isto acontece, dizemos que o processo iterativo tem uma órbita de período 2, isto é, $x_n = x_{n+2} = x_{n+4} = \dots = x_1^*$ e $x_{n+1} = x_{n+3} = x_{n+5} = \dots = x_2^*$. Este comportamento persistirá até $\lambda \approx 3.449$.

Se aumentarmos um pouco mais λ , veremos agora que o processo passa a ter órbita de período 4. Se seguirmos aumentando λ , veremos que o período das órbitas irá dobrar repetidas vezes até $\lambda \approx 3.569$. Isto é o que chamamos de uma bifurcação no sistema e, em particular, esta bifurcação se chama de duplicação de períodos (period doubling). O sistema se torna ainda mais rico, porém, se aumentarmos ainda mais λ . Neste caso, órbitas de qualquer período $k \in \mathbb{N}$ aparecem, intercaladas com sequências de bifurcações de duplicação de períodos. Isto é o que chamamos de caos determinístico. Este comportamento é observado até $\lambda = 4$. A partir deste ponto, as iterações simplesmente divergem.

1.1. Questão 1

Determine analiticamente pontos fixos x^* do mapa logístico, Equação 1 e determine as condições para que sejam assintoticamente estáveis. Veja que o parâmetro crucial deste problema é λ .

Resolução: A partir do processo iterativo descrito na Equação 1 é possível achar os pontos fixos x^* resolvendo a seguinte equação:

$$x^* = \lambda x^* (1 - x^*)$$

$$\lambda x^* - \lambda x^{*^2} - x^* = 0$$

$$x^* (\lambda - \lambda x^* - 1) = 0$$
(2)

Pela Equação 2 temos o ponto fixo $x^* = 0$. Agora quando $x^* \neq 0$:

$$\lambda - \lambda x^* - 1 = 0$$

$$-x^* = \frac{1 - \lambda}{\lambda}$$

$$x^* = \frac{\lambda - 1}{\lambda}$$
(3)

Pela Equação 3 temos o ponto fixo $x^* = \frac{\lambda - 1}{\lambda}$.

Para que a Equação 1 do processo iterativo do mapa logístico tenha pontos fixos assintoticamente estáveis é necessário que a condição da dicotomia na Equação 4 seja válida para todos os pontos fixos do sistema.

$$g(x^*) = \lambda x^* (1 - x^*) |g'(x^*)| < 1 |\lambda - 2\lambda x^*| < 1$$
 (4)

Para $x^* = 0$, temos:

$$\begin{aligned} |\lambda - 2\lambda 0| &< 1\\ |\lambda| &< 1 \end{aligned} \tag{5}$$

Para $x^* = \frac{\lambda - 1}{\lambda}$, por sua vez:

$$\left| \lambda - 2\lambda \frac{\lambda - 1}{\lambda} \right| < 1$$

$$\left| \lambda - 2\lambda + 2 \right| < 1$$

$$\left| \lambda - 2 \right| < 1$$

$$\left| \lambda \right| < 3$$
(6)

Concluímos, então, que, dado o apropriado $x_0,\,x^*$ vai para 0 com $\lambda<1$ e para $\frac{\lambda-1}{\lambda}$ com $1<\lambda<3$.

1.2. Questão 2

Escreva um programa computacional para calcular os pontos fixos da Equação 1 a partir de seus resultados analíticos e trace um gráfico λ x x^* . Trace, para seis valores representativos de λ , o resultado das iterações x_n x n.

Resolução: Primeiro foi avaliado à escolha do x_0 , que, através da análise do comportamento da função para diferentes valores de x, percebeu-se que o intervalo ideal para escolha do x_0 está contido entre 0.33 < x < 0.5 como podemos observar na resolução abaixo:

$$0 < g'(x^*) < 1$$

$$0 < \lambda - 2\lambda x < 1$$

$$-\lambda < -2\lambda x < 1 - \lambda$$

$$\lambda > 2\lambda x > \lambda - 1$$

$$0.5 > x > \frac{\lambda - 1}{2\lambda}$$

$$(7)$$

Dado que $\lambda < 3$ para o processo iterativo ser assintoticamente estável temos que um x_0 ideal deve repousar no intervalo 0.33 < x < 0.5. Escolhemos então o valor $x_0 = 0.4$.

O algoritmo implementado para gerar os dados do processo iterativo pode ser encontrado no arquivo "parte1/questao2.f90".

Foram gerados então dois gráficos para demonstrar os resultados analíticos dos pontos fixos, onde, na primeira Figura 1 mostramos o plano cartesiano de λ x x^* e na Figura 2 é focado nos resultados das iterações x_n x n.

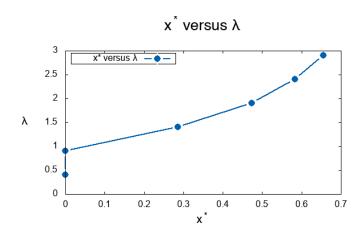


Figura 1. Gráfico de λ versus x^* .

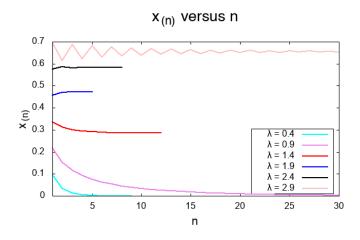


Figura 2. Gráfico de x_n versus n

1.3. Questão 3

Escreva um programa para determinar, iterativamente, os elementos distintos de suas órbitas para $\lambda \in [3,4]$, em incrementos de 0.001. Salve os seus resultados em um arquivo e, juntando-os com os pontos fixos encontrados na questão anterior, trace os resultados λ x x_k^* , para λ variando no intervalo [0,4], e surpreenda-se com a representação gráfica do caos!

Resolução: Foi implementado o programa para gerar os dados de $\lambda \in [3,4]$ em incrementos de 0.001, ele pode ser encontrado no arquivo "parte1/questao34.f90". Os resultados encontrados podem ser encontrados no arquivo "parte1/data/questao3.dat". Este arquivo possui na primeira coluna os valores de λ entre [3,4] e nas colunas restantes os valores de cada iteração até formar uma órbita completa para cada valor iterado de λ .

Traçamos o gráfico λ x x_k^* com os resultados encontrados com o programa desta Questão 1.3 e da Questão 1.2 variando o λ no intervalo [0,4] e a Figura 3 foi encontrada. O gráfico encontrado mostra o comportamento oscilatório esperado de $4 \geq \lambda \geq 3$, encontrando bifurcações a partir de $\lambda=3$.

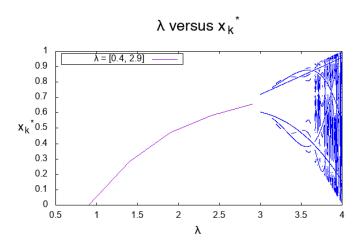


Figura 3. Gráfico de λ versus x_k^* .

1.4. Questão 4

Para cada valor de λ utilizado nos cálculos, salve em uma tabela o período de cada uma das órbitas obtidas e, posteriormente, trace este resultado em um gráfico. Qual é o maior período de uma órbita observada em sua simulação? Quantas vezes a órbita de período 2 foi obtida? E a de período 5?

Resolução: O algoritmo da Questão 1.4 também está contido no arquivo "parte1/questao34.f90" pois utiliza o mesmo raciocínio. Os dados encontrados através do algoritmo podem ser encontrados no arquivo "parte1/data/questao4.dat". A primeira coluna da tabela de dados contém valores de λ entre [3,4] em incrementos de 0.001, e na segunda coluna possui o número de períodos de cada órbita de λ . O gráfico foi gerado a partir desses dados e podemos observá-lo na Figura 4. Podemos ver no gráfico que o número de ciclos cresce proporcionalmente à λ , porém, foi encontrado erros de decaimento nos períodos das órbitas possivelmente devido à erros de aproximação.

O maior período de uma órbita observado na simulação foi de k=21, sendo o k=2 observado em 194 órbitas e k=5 em 13 órbitas.

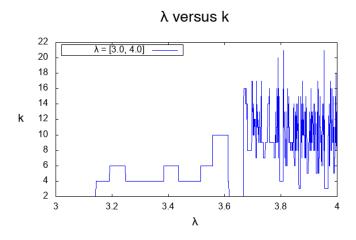


Figura 4. Gráfico de λ versus k.

2. Parte II : Solução de equações não-lineares

Nesta segunda parte, vamos estudar o processo de aquecimento de uma barra muito longa de um material, que é aquecida em uma de suas extremidades com o auxílio de um maçarico. Para isto, vamos modelar este processo da seguinte maneira: vamos considerar uma barra de seção transversal constante, semi-infinita e posicionada no eixo $x \leq 0$. A temperatura inicial da barra é T_i em toda a barra. O maçarico será modelado especificando-se um fluxo de calor constante q na posição x=0. Considere que a barra tenha difusividade térmica α e que a temperatura da barra seja T=T(x,t). Este problema é governado pela Equação 8 do calor, cuja solução pode ser facilmente encontrada pela aplicação da $Transformada\ de\ Laplace\ (Equação\ 9)\ (Não\ é\ preciso\ resolver\ a\ equação\ 1).$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \operatorname{com} \frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = q \operatorname{e} T(x, 0) = T_i$$
(8)

$$T(x,t) = T_i + q \left[2\sqrt{\frac{\alpha t}{\pi}} e^{-\frac{x^2}{4\alpha t}} - xerfc\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}}\right) \right]$$
 (9)

A função erfc(x) é a função erro complementar, definida na Equação 10.

$$erfc(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{z}^{\infty} e^{-w^2} dw = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{z} e^{-w^2} dz = 1 - erf(z)$$
 (10)

A segunda integral (lado direito) na Equação 10 é a chamada função erro, erf(z). A função erfc(z) é uma função especial, definida por uma integral que não pode ser resolvida explicitamente, já que não há uma primitiva trivial para a função e^{-z^2} . Porém, sabemos que erfc(z) é uma função decrescente, tal que $erfc(z) \to 0$ quando $z \to \infty$, e que erfc(0) = 1. Assim, é fácil perceber o que a Equação 9 representa fisicamente.

A Equação 9 descreve como a temperatura do corpo varia em cada posição x ao longo do tempo t. Assim, fixado um x, sabemos como a temperatura vai evoluir nesta posição ao longo do tempo. O problema, porém, é que a Equação 9 envolve funções muito complicadas, que não permitem a avaliação direta de valores numéricos. Vamos explorar a Equação 9 computacionalmente e vamos ver o que podemos aprender sobre este sistema. Nesta parte 2 do trabalho, consideraremos que a função erro erf(z) será dada seguinte aproximação racional (Abramowitz & Stegun, 1964):

$$erf(z) = 1 - \frac{1}{(1 + a_1 z + a_2 z^2 + \dots + a_6 z^6)^{16}}$$
 (11)

Na Equação 11 temos os seguintes valores para as constantes a1, ..., a6:

 $a_1 = 0.0705230784,$ $a_2 = 0.0422820123,$ $a_3 = 0.0092705272,$ $a_4 = 0.0001520143,$ $a_5 = 0.0002765672,$ $a_6 = 0.0000430638.$

A função erfc(z) que aparece na Equação 9 deverá ser calculada a partir destas expressões.

2.1. Questão 5

Suponha que queiramos determinar, a partir da Equação 9, quando a temperatura atingirá um determinado valor especificado T_f , para valores de α , q e x conhecidos. Apresente a formulação para o $M\acute{e}todo$ de Newton-Raphson aplicado a este problema.

Resolução: O *Método de Newton-Raphson* é representado da seguinte forma:

$$t_{n+1} = t_n - \frac{f(t_n)}{f'(t_n)} \tag{12}$$

Sendo $f(t_n)$ e $f'(t_n) = \frac{\partial T(x,t)}{\partial t}$ representadas a seguir:

$$f(t_n) = T_i - T_f + q \left[2\sqrt{\frac{\alpha t_n}{\pi}} e^{-\frac{x^2}{4\alpha t_n}} - xerfc\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t_n}}\right) \right]$$
 (13)

$$f'(t_n) = \frac{\partial T(x, t_n)}{\partial t_n} = \frac{q\alpha e^{\frac{-x^2}{4\alpha t_n}}}{\sqrt{\pi \alpha t_n}}$$
(14)

Logo aplicando a Equação 13 e a Equação 14 no método da Equação 12 teremos:

$$t_{n+1} = t_n - \left(\frac{T_i - T_f - qx.erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t_n}}\right)}{\frac{q\alpha e^{\frac{-x^2}{4\alpha t_n}}}{\sqrt{\pi \alpha t_n}}} + 2t_n\right)$$
(15)

2.2. Questão 6

Escreva um programa que, para $T_i=10,\ q=1$ e $\alpha=1$, determina o tempo t^* para que a temperatura em x=1 seja $T_f=50$, usando o método de Newton-Raphson. Apresente esta resposta com precisão de 6 casas decimais, indicando quantas iterações foram necessárias para alcançar esta precisão. Faça uma estimativa a priori do chute inicial t_0 , isto é, faça estimativas de valores, justificando seus passos. Apresente, com base no chute inicial, argumentos analíticos para justificar a existência de uma raiz para a equação em questão. Faça um teste da convergência do Método de Newton-Raphson em função do chute inicial. Por exemplo, escolha valores para o chute inicial iguais a 2, 3, 4, 5 e 10 vezes o chute estimado no item anterior e compare, num gráfico, a quantidade de iterações necessárias para alcançar a precisão desejada.

Resolução: O algoritmo da Questão 2.2 pode ser encontrado no arquivo "parte2/questao6.f90". Nele possui o processo iterativo utilizando o método de Newton-Raphson apresentado na questão anterior (Questão 2.1) utilizando os valores constantes de $T_i=10,\ q=1$ e $\alpha=1$. O arquivo "parte2/data/questao6.dat" possui o tempo t^* encontrado após 5 iterações para quando a temperatura final em x=1 seja $T_f=50$. A resposta é apresentada com uma precisão de 6 casas decimais e foi encontrado utilizando o chute inicial de $t_0=800$.

Analisando a fisionomia de f(t), o chute inicial t_0 não pode ter valores negativos pois ele está contido dentre raizes quadradas e nem pode ser nulo pois ele tem papel de divisor em alguns termos. Analisando o comportamento da equação para grandes valores de t, percebe-se que:

$$T_{f} = T_{i} + q \left[2\sqrt{\frac{\alpha t}{\pi}} e^{-\frac{x^{2}}{4\alpha t}} - xerfc\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}}\right) \right]$$

$$50 = 10 + \left[2\sqrt{\frac{t}{\pi}} e^{-\frac{1}{4t}} - erfc\left(\frac{1}{2\sqrt{t}}\right) \right]$$

$$40 = 2\sqrt{\frac{t}{\pi}} - 1$$

$$41 = 2\sqrt{\frac{t}{\pi}}$$

$$(20.5)^{2} = \frac{t}{\pi}$$

$$420.25\pi = t$$

$$t = 1320$$

Um bom chute, portanto, seria 1320. Ao utilizar o ponto fixo gerado pelo algoritmo desta questão (Figura 5) como entrada de $f(t^*)$ foi obtido como resultado $f(t^*)=0$, o que indica que a raiz encontrada está correta.

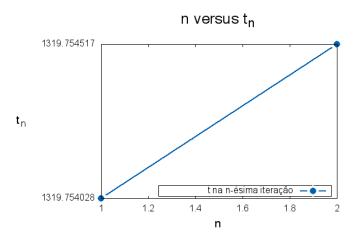


Figura 5. Gráfico de n versus t_n .

Logo, para verificar a convergência do Método de *Newton-Raphson* utilizamos a dicotomia $|f'(t^*)| < 1$. Quanto mais próximo de 0 $f'(t^*)$ se aproximar melhor será a convergência, logo, se tivermos $f'(t^*) = 0$ teremos uma convergência quadrática. Portanto como podemos ver na Equação 17 a função irá convergir quase quadraticamente.

$$f'(t_n) = \frac{\partial T(x, t_n)}{\partial t_n} = \frac{q\alpha e^{\frac{-x^2}{4\alpha t_n}}}{\sqrt{\pi \alpha t_n}} = \frac{1.1.e^{\frac{-1}{4.1.(1319,754395)}}}{\sqrt{\pi .1.(1319.754395)}} = 1.55273098E - 02 \quad (17)$$

A partir do valor inicial de $t_0=1320$, pegamos este valor e multiplicamos ele por 2, 3, 4, 5 e 10 para conferir a quantidade de iterações necessárias para alcançar a precisão desejada de 6 casas decimais. O resultado pode ser observado na Figura 6.

Número de iterações versus to

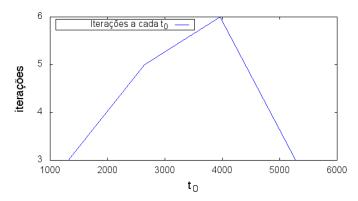


Figura 6. Gráfico de número de iterações a cada t_0 .

2.3. Questão 7

Implemente, também, o método da bisseção para este mesmo problema e, partindo de um intervalo de menor tamanho possível (como escolhê-lo?) centrado no chute inicial da questão anterior, compare a quantidade de iterações necessárias para se alcançar a mesma precisão para t^* . Mostre como prever este resultado teoricamente.

Resolução: O método de bisseção foi implementado para o mesmo problema na parte 2 deste trabalho e pode ser encontrado no arquivo "parte2/questao78910.f90". O intervalo escolhido para aplicar o método foi de [1310,1330], pois f(1310)=-0.151741028, f(1330)=0.158782959 e, como seus sinais são opostos, isto significa que há uma raiz da função no intervalo.

O professor pode notar que o código não utiliza este intervalo para os seus cálculos. Isto é decorrente do fato de que o arquivo *parte2/questao78910.f90* contém um código flexível, que abrange as soluções das questões 7, 8, 9 e 10. Portanto, um intervalo próprio para uma configuração de constantes pode não ser próprio para outra, e vice-versa.

Para modificar o intervalo no código, basta corrigir os parâmetros que o subprograma *bissect()* recebe, na linha 54.

Com o dado intervalo, foram necessárias 16 iterações para encontrar o valor com a precisão desejada. As iterações estão visíveis na Figura 7 abaixo.

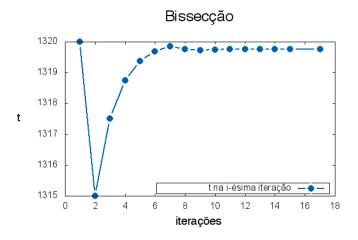


Figura 7. Gráfico de iterações da bissecção.

O número de iterações máximo para o espaço amostral utilizado (de 20.000.000 de entradas, por causa da precisão de 6 dígitos) é $log_2(20.000.000) = 24$. É fácil verificar que o número de iterações encontrado está na margem aceitável para o algoritmo, e que este número é muito maior que o número de iterações encontrado na questão 6 (6 iterações), indicando uma maior eficiência do método de Newton sobre a busca por bissecção.

2.4. Questão 8

Para os mesmos valores dos parâmetros T_i , q, α , automatize o seu programa para encontrar os valores de t^* para posições x variando entre x=1 e x=5. Faça este procedimento para pelo menos 10 pontos neste intervalo, trace um gráfico do seu resultado e comente-o. Você consegue definir uma velocidade da frente de calor que está se propagando por esta barra?

Resolução: O algoritmo implementado para resolver esta questão pode ser encontrado no arquivo "parte2/questao78910.f90". Para os mesmo valores $T_i = 10$, q = 1, $\alpha = 1$, buscamos encontrar t^* para posições de x variando de [1,5]. Na tabela de dados que se encontra no arquivo "parte2/data/questao8.dat" contém 10 pontos dentro do intervalo sugerido. O gráfico que geramos pode pode ser visto na Figura 8 abaixo. Podemos analisar pelo gráfico abaixo que ao variar x, t(x) cresce proporcionalmente.

A velocidade média de propagação pode ser encontrada utilizando a variação de espaço no tempo, logo, temos a variação de x sendo igual 5-1=4 e a de t igual a 232.753905, resultando então em 0.015466x/t.

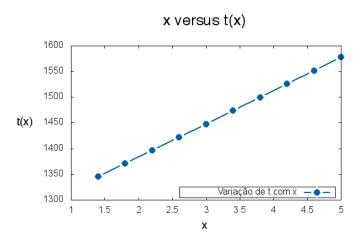


Figura 8. Gráfico de x versus t(x).

2.5. Questão 9

Repita o procedimento da Questão 2.4, mas desta vez mantendo-se em um ponto fixo x e variando o valor de q entre q=1 e q=10. Faça este procedimento para pelo menos 10 pontos neste intervalo, trace um gráfico do seu resultado e comente-o. O que acontece quando q aumenta? Agora, faça a mesma análise mantendo-se q=1, mas variando α entre $\alpha=1$ e $\alpha=10$. O que acontece quando α aumenta?

Resolução: O mesmo procedimento da Questão 2.4 foi seguido e o algoritmo implementado para resolver esta questão também está presente no arquivo "parte2/questao78910.f90", porém desta vez x está em ponto fixo e temos uma variação de q entre [1,10]. A tabela de dados que se encontra no arquivo "parte2/data/questao9.1.dat" contém 10 pontos entre este intervalo sugerido. O gráfico que geramos pode ser visto na Figura 9 abaixo. Podemos analisar pelo gráfico abaixo que ao variar q, t(q) varia na forma frac1q, conforme esperado.

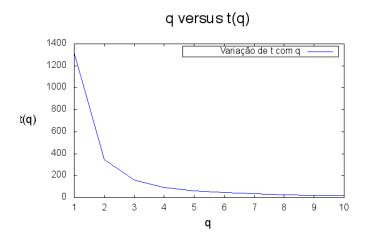


Figura 9. Gráfico de variação de t com q.

Logo após variamos α entre $\alpha=1$ e $\alpha=10$ com ponto fixo de q=1. A tabela de dados que se encontra no arquivo "parte2/data/questao9.2.dat" contém 10 pontos dentro

do intervalo sugerido. O gráfico gerado é representado na Figura 10 abaixo. Pode-se analisar pelo gráfico que ao variar α , $t(\alpha)$ encontramos a variação da forma $e^{-\alpha}$.

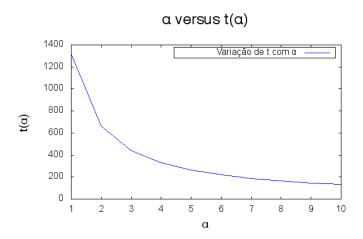


Figura 10. Gráfico de variação de t com α .

2.6. Questão 10

Que outras análises poderiam ser feitas neste problema e com as ferramentas disponíveis? Escolha uma e apresente seus resultados, comentando-os adequadamente.

Resolução: É possível verificar o comportamento do processo de aquecimento de uma barra a partir de temperaturas iniciais diferentes. Por exemplo, vamos supor uma variação de $T_iem[0,100]$. Temos como valores constantes $q=1, \alpha=1, x=1$ e $T_f=500$, sendo assim, o mesmo procedimento da Questão 2.4 e Questão 2.5 é utilizado para 10 pontos neste intervalo. Uma tabela de dados foi gerada e o gráfico foi plotado a partir destes dados, como podemos analisar na Figura 11 abaixo.

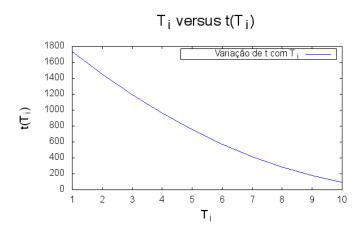


Figura 11. Gráfico de variação de t com T_i

O comportamento aproximadamente linear seguindo $t(T_i) \propto -T_i$ foi exatamente o esperado da análise da fisionomia da função.