# Cálculo Numérico

## Trabalho Computacional 1
## Data de Entrega: 06/10/16, até 23h55

**Instruções básicas.**

1. Este trabalho deve ser realizado em grupos de três alunos, em conjunto. O trabalho deve ser entregue em forma de relatório, no qual estão discutidos os problemas e os resultados obtidos para cada uma das questões. **Tenha certeza de que todas as perguntas realizadas no trabalho sejam respondidas de maneira clara e objetiva.**

2. **O relatório final deve ser ao professor pela página da disciplina no Moodle. Não serão aceitas versões impressas do relatório nem relatórios contendo apenas as listagens dos códigos desenvolvidos.** É imprescindível que o grupo anexe, em sua submissão, além do relatório com os resultados do trabalho, os arquivos dos códigos desenvolvidos para resolver o problema.

3. Os códigos podem ser escritos em qualquer linguagem computacional, sendo fortemente recomendado (mas não exigido) que sejam escritos em linguagens gratuitas abertas e que **possam ser compiladas no computador do professor**. Os códigos devem ser comentados e devem conter as informações básicas sobre o que cada rotina faz e o que cada variável representa. Todos os cálculos devem ser feitos com variáveis de precisão simples. Não usar rotinas pré-implementadas.

4. Os resultados devem ser claramente apresentados, isto é, tabelas e gráficos devem conter todas as identificações necessárias para sua compreensão, incluindo título de colunas, nome dos eixos, legenda de cores e símbolos, etc.

5. Plágios não serão tolerados em hipótese alguma e implicarão em nota zero no trabalho para todos os grupos envolvidos. Reincidência implicará em reprovação automática do aluno na disciplina.

**Parte I: Processos iterativos.**

Esta primeira questão será sobre as *bifurcações do mapa logístico*. Considere o processo iterativo

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

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 questão.

**Questão 1:** Determine analiticamente pontos fixos $x^\star$ do mapa logístico, eq.(1) e determine as condições para que sejam assintoticamente estáveis. Veja que o parâmetro crucial deste problema é $\lambda$.

**Questão 2:** Escreva um programa computacional para calcular os pontos fixos da eq.(1) a partir de seus resultados analíticos e trace um gráfico $\lambda \times x^\star$. Trace, para seis valores representativos de $\lambda$, o resultado das iterações $x_{(n)} \times n$.

De suas análises, você deve obter que para $\lambda \geq 3$, 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, $x_n = x_{n+2} = x_{n+4} = \cdots = x_1^\star$ e $x_{n+1} = x_{n+3} = x_{n+5} = \cdots = x_2^\star$. Este comportamento persistirá até $\lambda \approx 3.449$.

Se aumentarmos um pouco mais $\lambda$, veremos agora que o processo passa a ter *órbita de período 4*. Se seguirmos aumentando $\lambda$, 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 $\lambda$. Neste caso, órbitas de qualquer período $k \in I\!N$ aparecem, intercaladas com seqüências 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.

**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 $\lambda \times x_k^\star$, para $\lambda$ variando no intervalo $[0, 4]$, e surpreenda-se com a representação gráfica do *caos*!

**Questão 4:** Para cada valor de $\lambda$ 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?

**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 $x \geq 0$. 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 $\alpha$ e que a temperatura da barra seja $T = T(x, t)$. Este problema é governado pela equação do calor,

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

cuja solução pode ser facilmente encontrada pela aplicação da Transformada de Laplace (**Não é preciso resolver a equação!**):

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

A função $\mathrm{erfc}(x)$ é a função erro complementar, definida como:

$$\mathrm{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_z^\infty e^{-w^2}dw = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^z e^{-w^2}dz = 1 - \mathrm{erf}(z). \tag{3}$$

A segunda integral (lado direito) na equação acima é a chamada função erro, $\mathrm{erf}(z)$.

A função $\mathrm{erfc}(z)$ 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 $\mathrm{erfc}(z)$ é uma função decrescente, tal que $\mathrm{erfc}(z) \to 0$ quando $z \to \infty$, e que $\mathrm{erfc}(0) = 1$. Assim, é fácil perceber o que a eq.(2) representa fisicamente.

A eq.(2) 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 eq.(2) envolve funções muito complicadas, que não permitem a avaliação direta de valores numéricos. Vamos explorar a eq.(2) computacionalmente e vamos ver o que podemos aprender sobre este sistema. Neste trabalho, consideraremos que a função erro erf($z$) será dada seguinte aproximação racional (Abramowitz & Stegun, 1964):

$$\text{erf}(z) = 1 - \frac{1}{(1 + a_1 z + a_2 z^2 + \cdots + a_6 x^6)^{16}} \tag{4}$$

com os seguintes valores para as constantes $a_1, \ldots, a_6$:

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.0705230784, & a_2 &= 0.0422820123, \\ a_3 &= 0.0092705272, & a_4 &= 0.0001520143, \\ a_5 &= 0.0002765672, & a_6 &= 0.0000430638. \end{aligned}$$

A função erfc($z$) que aparece na eq.(2) deverá ser calculada a partir destas expressões.

**Questão 5:** Suponha que queiramos determinar, a partir da eq.(2), quando a temperatura atingirá um determinado valor especificado $T_f$, para valores de $\alpha$, $q$ e $x$ conhecidos. Apresente a formulação para o Método de Newton-Raphson aplicado a este problema.

**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.

**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.

**Questão 8:** Para os mesmos valores dos parâmetros $T_i$, $q$, $\alpha$, 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?

**Questão 9:** Repita o procedimento da Questão 8, 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 $\alpha$ entre $\alpha = 1$ e $\alpha = 10$. O que acontece quando $\alpha$ aumenta?

**Questão 10:** Que outras análises poderiam ser feitas neste problema e com as ferramentas disponíveis? Escolha uma e apresente seus resultados, comentando-os adequadamente.