Trabalho 1
Processos Iterativos
&
Solução de equações não-lineares

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

[1]Dep. 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 $\lambda \geq 3$, 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, $x_n = x_{n+2} = x_{n+4} = ... = x_1^*$ e $x_{n+1} = x_{n+3} = x_{n+5} = ... = x_2^*$. 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:

$$\begin{aligned} x^* &= \lambda x^*(1 - x^*) \\ \lambda x^* - \lambda {x^*}^2 - x^* &= 0 \\ x^*(\lambda - \lambda x^* - 1) &= 0 \end{aligned} \tag{2}$$

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

$$\begin{aligned} \lambda - \lambda x^* - 1 &= 0 \\ -x^* &= \frac{1 - \lambda}{\lambda} \\ x^* &= \frac{\lambda - 1}{\lambda} \end{aligned} \tag{3}$$

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.

$$\begin{aligned} g(x^*) &= \lambda x^*(1 - x^*) \\ |g'(x^*)| &< 1 \\ |\lambda - 2\lambda x^*| &< 1 \end{aligned} \tag{4}$$

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:

$$\begin{aligned} \left|\lambda - 2\lambda \frac{\lambda - 1}{\lambda}\right| &< 1 \\ |\lambda - 2\lambda + 2| &< 1 \\ |\lambda - 2| &< 1 \\ |\lambda| &< 3 \end{aligned} \tag{6}$$

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:

$$
\begin{aligned}
0 < g'(x^*) &< 1 \\
0 < \lambda - 2\lambda x &< 1 \\
-\lambda < -2\lambda x &< 1 - \lambda \\
\lambda > 2\lambda x &> \lambda - 1 \\
0.5 > x &> \frac{\lambda - 1}{2\lambda}
\end{aligned}
\tag{7}
$$

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.

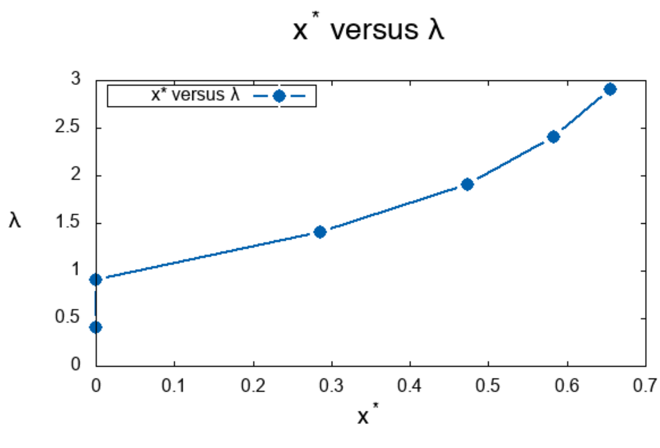

Figura 1. Gráfico de λ versus x^*.

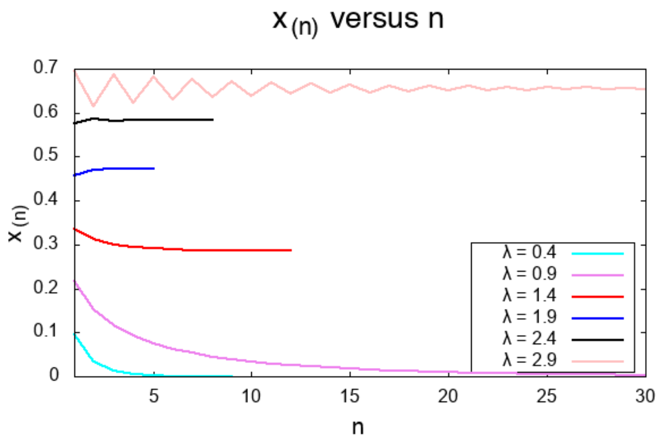

Figura 2. Gráfico de x_n versus n

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 $\lambda = 3$.

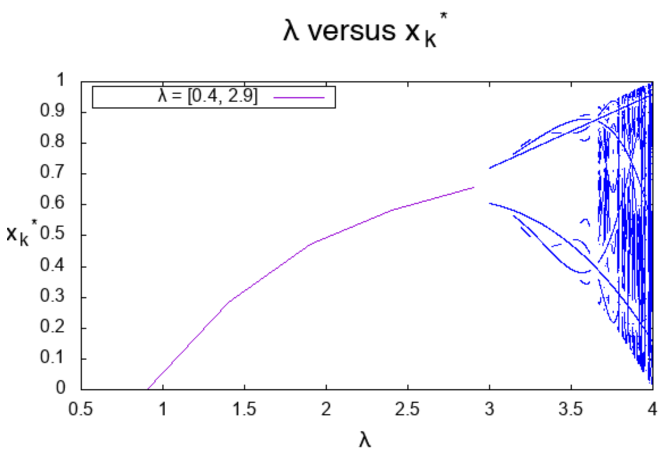

Figura 3. Gráfico de λ versus x_k^*.

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.

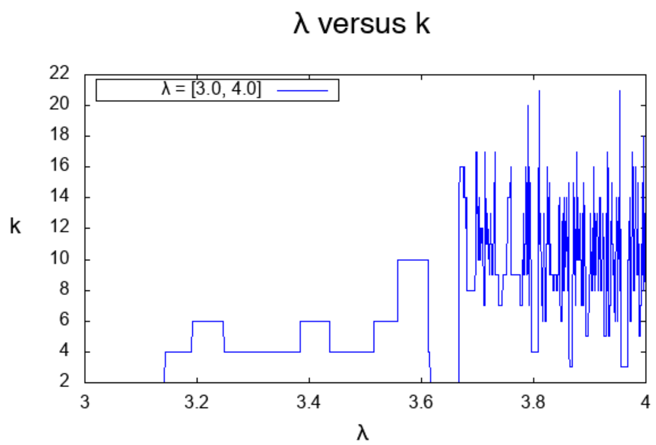

Figura 4. Gráfico de λ versus k.

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!).

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

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

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

$$erfc(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_z^\infty e^{-w^2}dw = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^z e^{-w^2}dz = 1 - erf(z) \tag{10}$$

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*):

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

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

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

A função $erfc(z)$ que aparece na 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 *Método 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:

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

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

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

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

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:

$$
\begin{aligned}
T_f = T_i + q\left[2\sqrt{\frac{\alpha t}{\pi}}e^{-\frac{x^2}{4\alpha t}} - xerfc\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}}\right)\right] \\
50 = 10 + \left[2\sqrt{\frac{t}{\pi}}e^{-\frac{1}{4t}} - erfc\left(\frac{1}{2\sqrt{t}}\right)\right] \\
40 = 2\sqrt{\frac{t}{\pi}} - 1 \\
41 = 2\sqrt{\frac{t}{\pi}} \\
(20.5)^2 = \frac{t}{\pi} \\
420.25\pi = t \\
t \tilde{=} 1320
\end{aligned}
\tag{16}
$$

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.

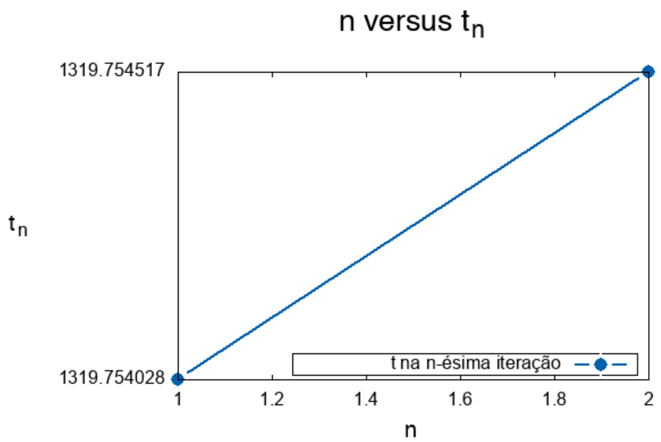

Figura 5. Gráfico de n versus t_n.

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.

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

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.

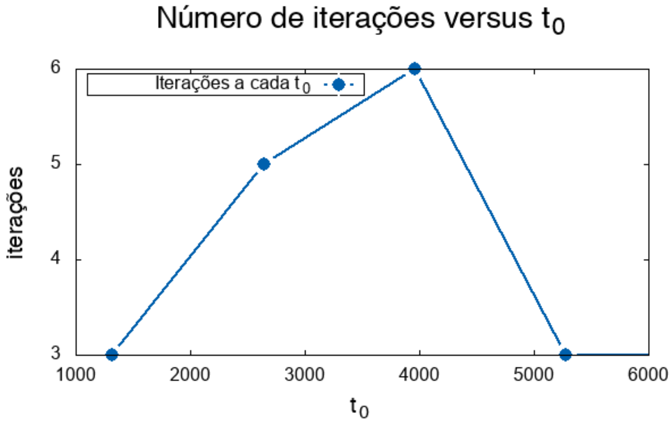

Figura 6. Gráfico de número de iterações a cada t_0.

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.

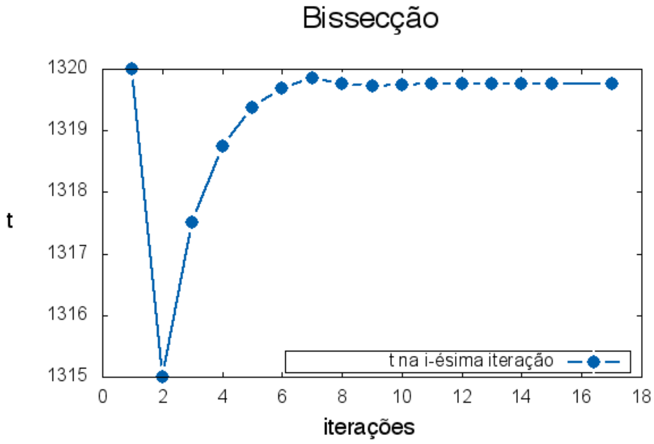

Figura 7. Gráfico de iterações da bissecção.

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 0.015466 x/t.

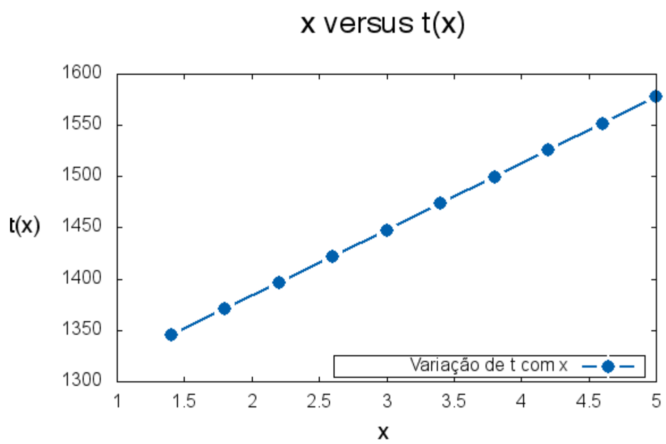

Figura 8. Gráfico de x versus $t(x)$.

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.

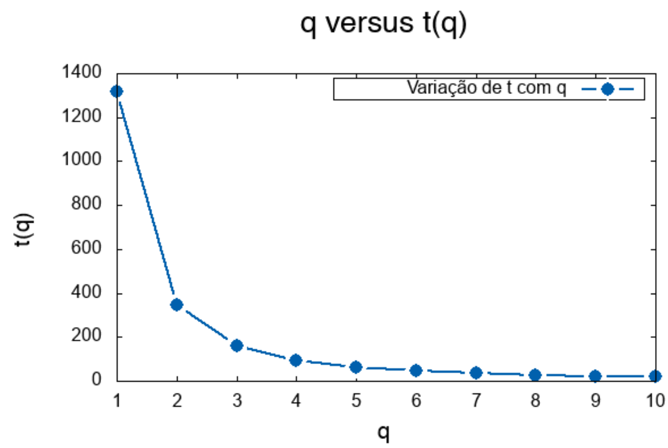

Figura 9. Gráfico de variação de t com q.

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 $e^{-\alpha}$.

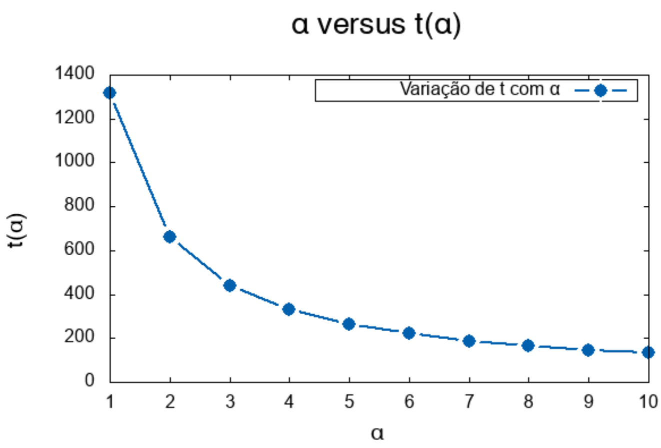

Figura 10. Gráfico de variação de t com α.

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_i em $[4, 40]$. Temos como valores constantes $q = 1$, $\alpha = 1$, $x = 1$ e $T_f = 50$, 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.

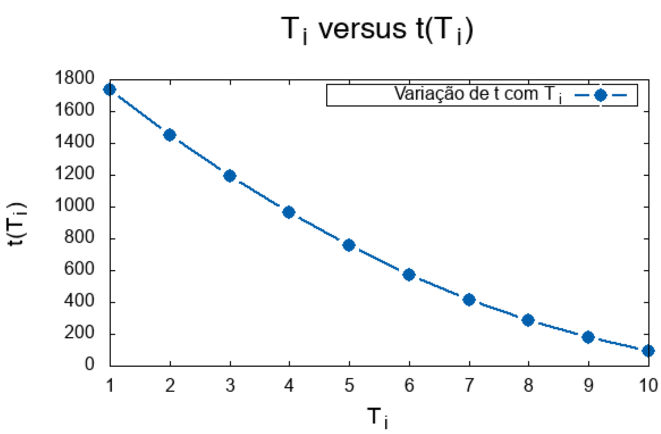

Figura 11. Gráfico de variação de t com T_i

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