Exercício 5: Sistemas de equações (parte II)

Ernesto González 52857, Fábio Vasconcelos 52841

Pretende-se resolver sistemas de equações usando o método de Newton e os métodos de Gauss-Seidel com e sem relaxação em Python e comparar com os valores obtidos no *Wolfram Mathematica* para o método de Gauss-Seidel, discutindo o método usado pelo mesmo.

I. Metodologia

Método de Gauss-Seidel sem relaxação: inicialmente definem-se as matrizes A, B e X em que [A|B] é a matriz ampliada do sistema e X é a hipótese inicial de solução sobre a qual se itera. Itera-se sobre X enquanto o módulo do erro for superior à precisão ou o número de iterações (k) inferior a k_{mx}. É percorrido um ciclo de $i = 1, 2, ..., n$ onde definem-se as variáveis $soma_{antes}$ e $soma_{depois}$. Itera-se sobre a primeira variável, percorrendo um ciclo de $j = 1, 2, ..., i-1$ e somando $a[i][j]x[j]$ e itera-se sobre a segunda variável, percorrendo o ciclo de $j = i-1, ..., n$. Por último e ainda no ciclo inicial, iguala-se $x[i]$ a $(b[i] - soma_{antes} - soma_{depois})/a[i][i]$ e o erro máximo passa a ser $(x[i] - x_{anterior}[i])/x[i]$, se for maior que o da iteração anterior.

Método de Gauss-Seidel com relaxação: este método é semelhante ao método anterior e apenas difere no passo em que iguala-se $x[i]$ a $(b[i] - soma_{antes} - soma_{depois})/a[i][i]$, ao invés, sobre cada constante de relaxação (λ) temos $x[i] = \lambda(b[i] - soma_{antes} - soma_{depois})/a[i][i] + (1+\lambda)x[i]$.

Método de Newton: inicialmente define-se a matriz X que é a hipótese inicial de solução sobre a qual se itera e o erro máximo inicial. O programa corre enquanto o módulo do erro for superior à precisão e o número de iterações (k) inferior a k_{mx}. Definem-se a matriz Jacobiana (J) e a matriz da função (F) e resolve-se a equação $Jd = F$. Por último, percorre-se um ciclo de $i = 1, 2, ..., n$ que itera sobre $x[i]$ igualando-o a $x[i] - d[i]$ e o erro máximo igualando-o a $d[i]/x[i]$ se o valor atual for maior que o da iteração anterior.

II. Sistema de blocos e molas

No primeiro exercício considerou-se um sistema de blocos e molas cujo equilíbrio é descrito pelo sistema de equações 1, em que se considera x_i o deslocamento do bloco$_i$ em mm.

$$\begin{cases} 3(x_2 - x_1) - 2x_1 = -80 \\ 3(x_3 - x_2) - 3(x_2 - x_1) = 0 \\ 3(x_4 - x_3) - 3(x_3 - x_2) = 0 \\ 3(x_5 - x_4) - 3(x_4 - x_3) = 60 \\ -2x_5 - 3(x_5 - x_4) = 0 \end{cases} \tag{1}$$

Inicialmente implementámos o método de Gauss-Seidel sem relaxação em *Python* e comparámos com os valores obtidos recorrendo á função *Solve* do *Wolfram Mathematica*, os mesmos encontram-se na tabela I. Para os dois métodos, verificam-se diferenças nos valores a partir da terceira casa decimal, isso deve-se a diferenças nos processos de resolução dos sitemas: o *Solve* usa transformações não equivalentes para encontrar soluções de equações transcendentais, podendo dar soluções que não correspondam exactamente ao sistema apresentado..

Tabela I. Valores das variáveis x_i obtidos com o *Wolfram Mathematica* e implementando o método de Gauss-Seidel sem relaxação usando como critério de convergência $\varepsilon = 0,0001$ e um máximo de 50 iterações. Ao correr, os valores convergiram ao fim de 39 iterações e obtivemos x_i com uma precisão de 4 casas decimais.

Variável	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
Python	20.71569	7.85901	-4.99813	-17.85565	-10.71339
Mathematica	20,71429	7,85714	-5	-17,85714	-10,71429

De seguida, aplicou-se o método de Gauss-Seidel com relaxação, usaram-se as constantes de relaxação $\lambda \in \{0.5, 1, 1.2, 2\}$.

Para todos os valores de constante de relaxação os valores de x_i convergiram com uma precisão da ordem de 10^{-4} à exceção dos valores cujo método usa uma constante igual a 2, nesse caso não se verificou convergência dos valores. A constante é demasiado grande e o que acontece é que a cada iteração o erro sobe ou desce continuamente e ocorrem erros que o método não prevê/cobre como a divisão por zero.

III. Sistema de equações não lineares

Considere-se, agora, o sistema não linear

$$\begin{cases} x^2 = 5 - y^2 \\ y + 1 = x^2 \end{cases} \tag{2}$$

Uma forma simples de encontrar a solução deste sistema é graficamente. Para tal, definam-se as curvas parametrizadas $f_1(x) = \sqrt{5 - x^2}$, $f_2(x) = -\sqrt{5 - x^2}$ e $g(x) = x^2 - 1$. É fácil ver que os pares ordenados $(x, f_1(x)), (x, f_2(x)) \in \mathbb{R}$ são as soluções de $x^2 = 5 - y^2$ e os pares ordenados $(x, g(x)) \in \mathbb{R}$ são as soluções de $y + 1 = x^2$. Encontram-se representados na Figura X os gráficos de f_1, f_2 e g. Podemos ver como as duas

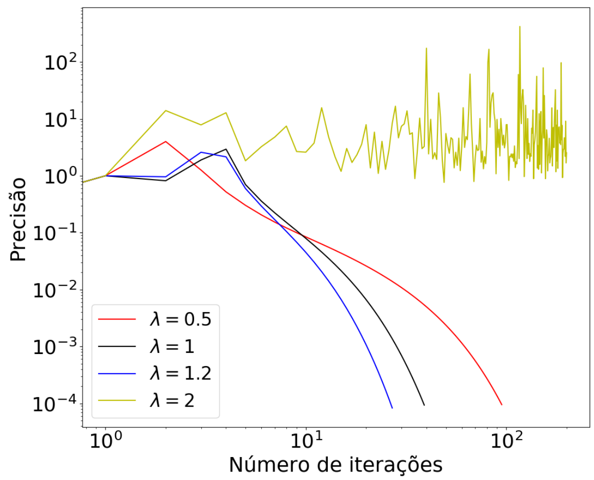

Figura 1. Gráfico da precisão em função do número de iterações para o método de Gauss-Seidel com constantes de relaxação $\lambda = 0.5, 1, 1.2, 2$, usou-se como critério de convergência $\varepsilon = 0,0001$ e um número máximo de 200 iterações. Para $\lambda = 0.5$ os valores convergiram ao fim de 23 iterações, com $\lambda = 1.0$ os valores convergiram ao fim de 8 iterações e para $\lambda = 1.2$ convergiram após 9 iterações. Para $\lambda = 1.2$ o método diverge.

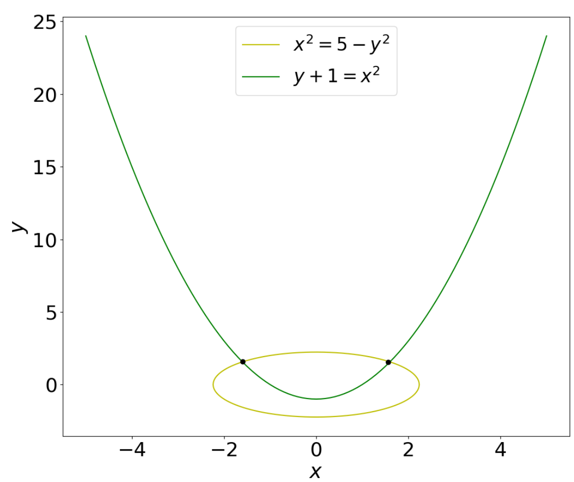

Figura 2. Trajetórias das curvas parametrizadas $x^2 = 5 - y^2$ e $y + 1 = x^2$ com destaque para os seus pontos de interseção (a preto) nas coordenadas $(x, y) = (1.60049, 1.56155)$ e $(x, y) = (-1.60049, 1.56155)$,

curvas se intercetam em $(x, y) = (1.60049, 1.56155)$ e $(x, y) = (-1.60049, 1.56155)$, que, desta forma, são as soluções reais do sistema (2).
Definamos agora a função

$$f(x,y) = \begin{bmatrix} x^2 + y^2 - 5 \\ -x^2 + y + 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad J(x,y) = \begin{bmatrix} 2x & 2y \\ -2x & 1 \end{bmatrix}$$

em que $J(x, y)$ é a matriz jacobiana de f. De seguida aplicamos o método de Newton para encontrar os mínimos de f, que serão também as soluções do sistema (2), com uma precisão de 10^{-6} e um máximo de 100 iterações. O método de Newton implica a resolução do sistema linear $Jd_k = f$, em que d_k é o salto a ser dado na direção do eixo $0k$. Para resolver este sistema linear recorreu-se ao método de eliminação de Gauss com escolha parcial de pivot. Na Figura 3 encontra-se representada a trajetória seguida pelo método de Newton para encontrar soluções do sistema (2), partindo de pontos iniciais diferentes. Veja-se como nenhuns dos caminhos seguidos passam pela reta $y = 0$. Para pontos iniciais escolhidos em $y < 0$ os pontos convergem para $(x, y) \in \mathbb{R} : 1.6 < x < 2.7, y = 1.5615528128$. Já para pontos iniciais escolhidos em $y > 0$ os pontos convergem para $(x, y) \in \mathbb{R} : 1.6 < x < 2.7, y = -2.5615528128$. Veja-se como para pontos bastante distantes destas "zonas de soluções"temos saltos maiores do que na vizinhança destas, deve-se à derivadas direcionais maiores nessas zonas mais distantes que fazem com que o salto d_k seja maior. Um caso interessante é o do caminho que parte de $(4, -1)$ (a preto), que aproxima-se inicialmente da zona de soluções e depois afasta-se para $x \approx -80$, no entanto já tendo encontrado o valor de y da solução, convergindo para o x da solução nas próximas7 iterações. Isto pode ser justificado por uma derivada parcial df/dx muito alta o que fez com que o caminho se afasta-se tanto para a esquerda.

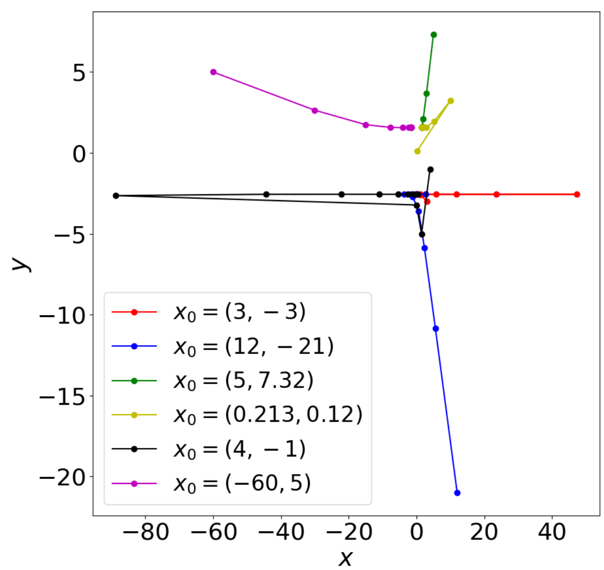

Figura 3. Trajetórias seguidas pelo método de Newton para a resolução do sistema $x^2 = 5 - y^2 \wedge y + 1 = x^2$ partindo de pontos iniciais diferentes.

IV. Máximo de um potencial

Consideremos agora a função $U(x,y) = e^{-(x-5)^2-(y-5)^2}$. Pretendemos encontrar o máximo de U pelo método de Newton. Na Figura 4 encontra-se o gráfico de $U(x,y)$. Atendendo à Figura 4, vemos que o máximo está em $(0,0)$

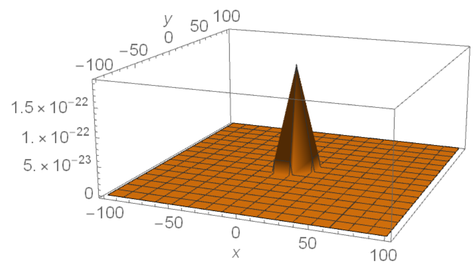

Figura 4. Gráfico da função $U(x,y)$ em $-100 < x < 100$ e $-100 < y < 100$

e que a função é simétrica em relação à reta $y = -x$. Tendo isto em conta, se nos restringirmos a encontrar o máximo de $U|_{y=-x}$, encontramos também o máximo de U. Assim, substituindo em $U(x,y)$, o nosso problema resume-se a encontrar zeros de $U(x) = e^{-2x^2-50}$. Para tal vamos aplicar o método de Newton à função $\frac{dU}{dx} = -4xe^{-2x^2-50}$, com precisão 10^{-6} e um número máximo de iterações $k_{max} = 150$. Sabendo que o zero da função é em $x = 0$, partimos de um ponto inicial próximo a este. Por exemplo $x_0 = 0.2$. Neste caso, a raíz de $\frac{dU}{dx}$ encontrada é $x = -4.4021166106886916 \times 10^{-11}$, e portanto é o máximo de $U(x)$ encontrado pelo método de Newton.

Tendo em conta a nossa restrição a $y = -x$, o máximo encontrado para $u(x,y)$ corresponde a $(x,y) = (-4.4021166106886916 \times 10^{-11}, 4.4021166106886916 \times 10^{-11})$.