UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

BC1419 Cálculo Numérico (2º 2021) - LISTA 1
Entrega: até 13/07/2021

Prof. André Pierro de Camargo

Orientações gerais

- A linguagem de programação utilizada na implementação dos métodos é de livre escolha.
- Peça ajuda ao professor sempre que necessário.
- Realize testes preliminares com cada método para identificar possíveis erros de implementação. Por exemplo: teste o método de eliminação de Gauss em sistemas de equações cuja solução seja previamente conhecida e veja se o resultado obtido é coerente.
- Discuta com os outros grupos e também com o professor caso encontre resultados aparentemente sem sentido. Isso pode (ou não) ser um erro de implementação, ou mesmo um indicativo de que o método utilizado possui as suas limitações.

Cada grupo deverá entregar

- Um relatório contendo a resolução dos exercícios teóricos e **TUDO** o que foi solicitado nos exercícios práticos (leiam a descrição com bastante atenção).
- O arquivo contendo o código fonte utilizado nos exercícios práticos.

Enviar o material por e-mail para andre.camargo@ufabc.edu.br, **especificando o número do grupo**.

Observação: Na Seção 3 encontram-se alguns dos algoritmos que serão utilizados nos exercícios práticos.

1 Introdução

Sejam $p, q, r : [a, b] \to \mathbb{R}$ funções contínuas. Sabe-se que, dado um par de números reais α, β, existe uma única função duas vezes diferenciável tal que

$$y''(x) \ = \ p(x)y'(x) + q(x)y(x) + r(x), \ a \ \leq x \leq b, \ \ y(a) = \alpha, \ \ y(b) = \beta. \quad (1)$$

Por exemplo, a única solução do problema de contorno

$$y''(x) \ = \ \pi^2 y(x) - 2\pi^2 \sin(\pi x), 0 < x < 1, \ \ y(0) = 0, \ \ y(1) = 0, \qquad (2)$$

é $y(x) = \sin(\pi x)$. Encontrar a solução do problema de contorno (1) nem sempre é uma tarefa fácil e, por isso, na prática, utilizamos métodos numéricos para encontrar aproximações para a solução do problema dado.

1.1 O método de diferenças finitas

De modo suscinto, o método de diferenças finitas consiste em estimar os valores da solução $y(x)$ do problema (1) em uma malha de pontos $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$. Nesse trabalho, utilizaremos nós igualmente espaçados, isto é,

$$x_i = a + ih, \ i = 0, 1, \ldots, n, \ h = \tfrac{b-a}{n}.$$

A aproximação do vetor

$$Proj_h(y) = [\ y(x_1) \quad y(x_2) \quad \ldots \quad y(x_{n-1})\ ]^t \qquad (3)$$

fornecida pelo método de diferenças finitas é a solução y_h do seguinte sistema de $n-1$ equações lineares dada na forma matricial

$$A_h \times w \ = \ v_h \ \text{ sendo } \ v_h \ = \qquad (4)$$

$$h^2 \left[\ \left(-r(x_1) + \left[\tfrac{1}{h^2} + \tfrac{1}{2h}p(x_1)\right]\alpha\right) \quad -r(x_2) \quad \ldots \quad -r(x_{n-2}) \quad \left(-r(x_{n-1}) + \left[\tfrac{1}{h^2} - \tfrac{1}{2h}p(x_{n-1})\right]\beta\right) \ \right]^t,$$

$$A_h = \begin{bmatrix} 2+h^2q(x_1) & -1+\frac{h}{2}p(x_1) & 0 & \dots & 0 \\ -1-\frac{h}{2}p(x_2) & 2+h^2q(x_2) & -1+\frac{h}{2}p(x_2) & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & -1-\frac{h}{2}p(x_{n-2}) & 2+h^2q(x_{n-2}) & -1+\frac{h}{2}p(x_{n-2}) \\ 0 & \dots & 0 & -1-\frac{h}{2}p(x_{n-1}) & 2+h^2q(x_{n-1}) \end{bmatrix}. \qquad (5)$$

A idéia por trás do método de diferenças finitas é aproximar as derivadas que entram na equação (1) utilizando a série de Taylor da solução $y(x)$. Para o nosso problema, utilizamos as seguintes aproximações

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_i+h)-y(x_i-h)}{2h}; \qquad y''(x_i) \approx \frac{y(x_i+h)-2y(x_i)+y(x_i-h)}{h^2}.$$

Para $n \geq 2$, defina

$$E_n := \max\{|Proj_h(y)_j - (y_h)_j|, j = 1, 2, \dots, n-1. \qquad (6)$$

Pode-se provar que $\lim_{n\to\infty} E_n = 0$, ou seja, conforme aumentamos o número de pontos $n+1$ da malha, o vetor de aproximações y_h se aproxima cada vez mais do vetor de soluções (3).

Exercício 1

O sistema de equações (4) pode ser resolvido utilizando-se o Método da eliminação de Gauss: em cada passo, adiciona-se um múltiplo da i-ésima linha de A_h à $(i+1)$-ésima linha de A_h de modo a eliminar o elemento na posição $(i+1, i)$ de A_h. Isso é ilustrado na Figura 1. No final do processo, chegaremos a um sistema triangular

$$A_h^* \times w = v_h^*, \qquad (7)$$

sendo que A_h^* coincide com A_h acima da diagonal principal e os elementos da diagonal $(A_h^*)_{i,i}, 1 \leq i \leq n-1$ satisfazem $(A_h^*)_{1,1} = 2 + h^2q(x_1)$ e

$$(A_h^*)_{i+1,i+1} = 2 + h^2q(x_{i+1}) - \frac{\left[-1-\frac{h}{2}p(x_{i+1})\right]\left[-1+\frac{h}{2}p(x_i)\right]}{(A_h^*)_{i,i}}, \ i = 1, 2, \dots, n-2. \qquad (8)$$

$$
\begin{array}{cc}
\begin{bmatrix}
\ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \\
\dots & (D_h^*)_{i-1,i-1} & -1+\frac{h}{2}p(x_{i-1}) & 0 & 0 & 0 & \dots \\
\dots & 0 & (D_h^*)_{i,i} & -1+\frac{h}{2}p(x_i) & 0 & 0 & \dots \\
\dots & 0 & -1-\frac{h}{2}p(x_{i+1}) & 2+h^2q(x_{i+1}) & -1+\frac{h}{2}p(x_{i+1}) & 0 & \dots \\
\dots & 0 & 0 & -1-\frac{h}{2}p(x_{i+2}) & 2+h^2q(x_{i+2}) & -1+\frac{h}{2}p(x_{i+2}) & \dots \\
\dots & 0 & 0 & 0 & -1-\frac{h}{2}p(x_{i+3}) & 2+h^2q(x_{i+3}) & \dots \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots &
\end{bmatrix}
&
\begin{array}{l}
\\ \\ (\times)\ m \\ (+) \\ \\ \\ \\
\end{array}
\end{array}
$$

$$
\Downarrow \qquad\qquad m := -\frac{-1-\frac{h}{2}p(x_{i+1})}{(D_h^*)_{i,i}}
$$

$$
\begin{bmatrix}
\ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \\
\dots & (D_h^*)_{i-1,i-1} & -1+\frac{h}{2}p(x_{i-1}) & 0 & 0 & 0 & \dots \\
\dots & 0 & (D_h^*)_{i,i} & -1+\frac{h}{2}p(x_i) & 0 & 0 & \dots \\
\dots & 0 & 0 & (D_h^*)_{i+1,i+1} & -1+\frac{h}{2}p(x_{i+1}) & 0 & \dots \\
\dots & 0 & 0 & -1-\frac{h}{2}p(x_{i+2}) & 2+h^2q(x_{i+2}) & -1+\frac{h}{2}p(x_{i+2}) & \dots \\
\dots & 0 & 0 & 0 & -1-\frac{h}{2}p(x_{i+3}) & 2+h^2q(x_{i+3}) & \dots \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots &
\end{bmatrix}
$$

Figura 1: A i-esima etapa do processo de eliminação.

Se os elementos $(A_h^*)_{i,i}$ da diagonal do sistema (7) são muito pequenos, a aplicação do método pode sofrer de instabilidade numérica. No caso mais grave, o sistema (7) pode nem ter solução, caso algum $(A_h^*)_{i,i}$ seja gual a zero. Dessa forma, uma grande preocupação é garantir que os elementos $(A_h^*)_{i,i}$ não estejam próximos a zero.

Suponha que $p(x) \equiv p$ e $q(x) \equiv q$ sejam funções constantes. Dessa forma, podemos reescrever a regra (8) que rege a formação dos elementos $\mu_i := (A_h^*)_{i,i}, i = 1, 2, \ldots, n-1$ como $\mu_1 \ = \ 2 + h^2 q$ e

$$
\mu_{i+1} \ = \ \phi(\mu_i), \qquad \phi(x) \ = \ 2 + h^2 q - \frac{\left[1-\frac{h^2}{4}p^2\right]}{x}, \tag{9}
$$

$i = 2, 3, \ldots, n-2.$

Nos exercícios a seguir, use $p = 10, q = 0$ e $h = 1/10$.

1. (0.5) Mostre que, se $x \in [1, \infty[$, então $\phi(x) \in [1, \infty[$. Conclua que todos os elementos da diagonal de A_h^* satisfazem $(A_h^*)_{i,i} \geq 1, i =$

$1, 2, \ldots, n-1$.

Sugestão: Encontre o valor mínimo de ϕ no intervalo $[1, \infty[$.

2. (0.5) Usando os conceitos de Cálculo, verifique que a derivada ϕ' de ϕ satisfaz $\max_{x \in [1,\infty[} |\phi'(x)| \leq 3/4$.

3. (2.0) Usando os itens anteriores, pode-se conluir, pelo Teoram visto em sala de aula, que ϕ possui um único ponto fixo α ($\phi(\alpha) = \alpha$) no intervalo $I = [1, \infty[$ e que a sequência gerada por $\alpha_{k+1} = \phi(\alpha_k), k \geq 0$ converge para α para qualquer valor de chute inicial $\alpha_0 \in I$. Além disso, vale que
$$|\alpha_k - \alpha| \leq (3/4)^k |\alpha_0 - \alpha|. \tag{10}$$

   (a) (0.5) Calcule a função $f(x) = \phi(x) - x$ nos pontos $x = 1$ e $x = 2$ e conclua que $\alpha \in I = [1, 2]$.

   (b) (0.5) Pelo item anterior, se escolhermos $\alpha_0 \in I$, teremos $|\alpha_0 - \alpha| \leq 1$ e, usando (10), obtemos
   $$|\alpha_k - \alpha| \leq (3/4)^k.$$
   Dessa forma, dado $\epsilon > 0$, podemos calcular uma aproximação α_k para α satisfazendo $|\alpha_k - \alpha| < \epsilon$ se escolhermos k de modo que
   $$(3/4)^k < \epsilon, \quad \text{ou seja,} \quad k \geq \log(\epsilon)/\log(3/4).$$
   Calcule o menor valor de k que satisfaz a inequação acima para $\epsilon = 10^{-8}$.

   (c) (0.5) Com o valor de k obtido acima, calcule os primeiros k termos da sequência $\alpha_0 = 2$ e $\alpha_{i+1} = \phi(\alpha_i), i = 0, 1, 2, \ldots, k$. Exiba $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, ..., \alpha_k$ com **TODAS** as cass decimais disponíveis.

   (d) (0.5) Resolva a equação $\phi(x) = x$ algebricamente e verifique se a aproximação α_k calculada no item anterior satisfaz $|\alpha_k - \alpha| < \epsilon$.

2 Exercício 2

Pode-se provar que, para uma função q fixada, existe um valor n_0 tal que o sistema (4) possui solução única para todo número $n > n_0$. Por outro lado, para n fixo, não é verdade que o sistema (4) possui sempre uma única solução (independente da função escolhida q). Para averiguar essa questão, vamos considerar o sistema de equações (4) para $a = 0, b = 1$ e $n = 20$, com $p(x) \equiv 0$ e $q(x) \equiv q$ constantes.

O sistema (4) será singular se algum dos elementos da diagonal principal da matriz A_h^* for igual à zero. Por sua vez, esses elementos dependem do valor da constante q da equação. Defina a função

$$minDiag(q) \;=\; \min{(A_h^*)_{1,1}, (A_h^*)_{2,2}, \ldots, (A_h^*)_{n-1,n-1}}, \quad q \;\in\; \mathbb{R}.$$

Observação: dado um valor de q, podemos calcular a função $minDiag$ ou

- aplicando o método da eliminação de Gauss na matriz A_h e escolhendo o menor valor da diagonal da matriz resultante A_h^*

ou

- calculando os elementos $(A_h^*)_{1,1}, (A_h^*)_{2,2}, \ldots, (A_h^*)_{n-1,n-1}$ por meio da relação (9). Observe que, nesse caso, $h = \frac{b-a}{n} \;=\; \frac{1}{20}$.

1. (1.0) Calcule a função $minDiag(q)$ para os valores $q = -10, -9, -8, ...,$ $-1, 0$.

2. (1.0) Utilize algum recurso computacional para esboçar o gráfico da função $minDiag$ no intervalo $[-10, 0]$. Por exemplo, calcule a função $minDiag$ para $q = -10 + i\frac{1}{10}, i = 0, 1, \ldots, 100$ e plote os dados obtidos.

3. (1.5) Observe que $minDiag(q)$ troca no sinal no intervalo $[-10, 0]$. Como a função $minDiag(q)$ é contínua, existe um número $q^* \;\in\; [-10, 0]$ tal que $minDiag(q^*) = 0$. Calcule q^* com precisão $prec = 10^{-8}$ pelo método das secantes, partindo-se das aproximações iniciais $q_0 = -10$ e $q_1 = -9.9$. Exiba **TODAS** as iterações geradas pelo método.

Exercício 3

1. (1.0) Para $n = 10$, calcule as 7 primeiras iterações o sistema (4) para a equação (2) pelo método de Gauss-Seidel, partindo-se do chute inicial $w^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$. Exiba os resultados em uma tabela ou similar.

   Para fins de conferência, as duas primeiras iterações são:

```
         x_new              x_new
[1,] 0.0290644802652380  0.0620052935694767
[2,] 0.0691327545681070  0.1367811518733645
[3,] 0.1090326105039824  0.2086431377251687
[4,] 0.1414038221156857  0.2657868416166712
[5,] 0.1614316237476618  0.2999720553488989
[6,] 0.1663712362360925  0.3064133596918088
[7,] 0.1553654188901598  0.2837096595771482
[8,] 0.1293134267456481  0.2336757536287431
[9,] 0.0906805618863349  0.1404077852167054
```

2. (2.5) Para a equação (2), calcule E_n definido em (6) para $n = 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000$ (observe que a solução da equação diferencial é conhecida). Para calcular y_h em cada caso, resolva o sistema (4) pelo método da eliminação de Gauss. Exiba os resultados em uma tabela ou similar.

3 Algoritmos

3.1 Algoritmo para montar a Matriz A_h do sistema (4)

A seguir apresentamos um algoritmo para construir a matriz (5).

Algoritmo:

- Defina uma matriz A de tamanho $(n-1) \times (n-1)$.

- Para i de 1 até $n-1$ faça
  - $A_{i,i} = 2 + h^2 q(x_i)$;
- Para i de 1 até $n-2$ faça
  - $A_{i+1,i} = -1 - \frac{h}{2} p(x_{i+1})$.
  - $A_{i,i+1} = -1 + \frac{h}{2} p(x_i)$.

3.2 Algoritmos para resolver sistemas de equações lineares

Considere um sistema linear de m equações com m incógnitas dado na forma matricial por

$$A \times x = y, \tag{11}$$

sendo A a matriz (quadrada $m \times m$) do sistema e $y \in \mathbb{R}^m$ o vetor de termos independentes. A seguir são listados os algoritmos para resolver o sistema de equações (11). Nesses algoritmos, os índices da matriz e do vetor são representados por números de 1 até m. Para implementação em linguagens que utilizam outro tipo de indexação (a maioria das linguagens começa com o índice zero) será preciso fazer os ajustes necessários.

3.3 Método da eliminação de Gauss

Entrada: A, y, m = ordem da matriz A.
Saída: O vetor x, solução do sistema (4).

Parte 1: Escalonar (triangularizar o sistema)

Para j de 1 até m-1, faça

- Se $A_{j,j} = 0$, encontre k tal que $A_{k,j} \neq 0$ e troque as linhas j e k da Matriz A. Se isso não for possível, então a matriz A é singular e convém exibir uma mensagem de erro.
- Para i de j+1 até m, faça // elimina todos os elementos de A da // coluna j que estão abaixo da diagonal
  - Defina $\mu = -\frac{A_{i,j}}{A_{j,j}}$ // define o multiplo da linha j a ser somado à linha i da matriz A.
  - Para k de j até m, faça
    - $A_{i,k} = A_{ik} + \mu\, A_{j,k}$ // faz a operação desejada entre as linhas // da matriz A.
  - $y_i = y_i + \mu\, y_j$ // atualiza o vetor de termos independentes.

Parte 2: Resolver o sistema triangular resultante

- Para i de m até 1, faça
  - $x_i = y_i$.
  - Para j de $i + 1$ até m faça
    - $x_i = x_i - A_{i,j}\, x_j$.
  - $x_i = x_i / A_{i,i}$.

3.4 Algoritmo de Gauss-Seidel (para a matriz A definida em (5), apenas)

Entrada: A, y, m = ordem do sistema, $x^{(0)}$, tol, n_{max} = número máximo permitido de iterações.
Saída: O vetor x, solução do sistema (4).

Para $eps = tol + 1$, $k = 0$, $x^{(old)} = x^{(0)}$ e $x^{(new)} = x^{(0)}$

- Enquanto $eps > tol$ e $k < n_{max}$, faça
  - $x_1^{(new)} = \dfrac{1}{2 + h^2 q(x_1)} \left(y_1 + x_2^{(old)} \left[1 - \dfrac{h}{2} p(x_1) \right] \right)$
  - Para i de 1 até $m - 1$, faça
    - $x_i^{(new)} = \dfrac{1}{2 + h^2 q(x_i)} \left(y_i + x_{i-1}^{(new)} \left[1 + \dfrac{h}{2} p(x_i) \right] + x_{i+1}^{(old)} \left[1 - \dfrac{h}{2} p(x_i) \right] \right)$
  - $x_m^{(new)} = \dfrac{1}{2} \left(y_m + x_{m-1}^{(new)} \left[1 + \dfrac{h}{2} p(x_m) \right] \right)$
  - $eps = ||x^{(new)} - x^{(old)}||_\infty$
  - $x^{(old)} = x^{(new)}$