EXERCICI PRÀCTIC 1

Introducció al problema

Les equacions diferencials, terme proposat per primer cop per G.Leibniz, són equacions que descriuen les relacions entre una funció desconeguda, que volem averiguar, i les seves derivades.

En particular, les equacions diferencials ordinàries són equacions diferencials on aquesta funció desconeguda només depén d'una única variable independent. Aquest tipus d'equacions són vitals en l'estudi de les ciències experimentals on, afortunadament, una gran quantitat de fenòmens poden ser modelats amb aquest tipus d'equacions.

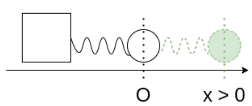

Figura 1: Sistema unidimensional format per un moll i una masa.

Un exemple d'aquestes equacions diferencials podria ser el sistema d'oscil·lació unidimensional generat per una masa m unida a una molla elàstica amb constant k. Prenent O com a la posició d'equilibri de la molla i la masa i $x(t)$ com a la separació de la masa del punt d'equilibri ($x < 0$ quan la molla està comprimida) llavors, a partir de la segona llei de Newton, podem expressar aquest sistema com:

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \frac{k}{m}x = 0.$$

Tanmateix, només una petita part de les equacions diferencials existents poden ser solucionades per mètodes exactes, creant la necessitat de desenvolupar mètodes numèrics que ens permeten donar aproximacions suficientment bones per al nostre problema.

Durant aquesta pràctica, ens centrarem només en un petit subconjunt de les equacions diferencials ordinàries, les equacions diferencials lineals d'ordre dos definides a un interval $[a, b]$

$$Ly \equiv -y'' + p(x)y' + q(x)y = r(x), \qquad a < x < b \tag{1}$$

subjecta a condicions de frontera de Dirichlet $y(a) = \alpha, y(b) = \beta$. A més a més, exigirem $p(x)$, $q(x)$ i $r(x)$ contínues en $[a, b]$ amb $q(x) > 0$ per a tot $x \in [a, b]$. D'aquesta manera, es pot demostrar [3] que la solució, si existeix, és única. Per simplicitat, suposarem $y \in \mathcal{C}^4((a, b))$. Si la solució real no cumpleix aquesta propietat llavors els càlculs que es fan a continuació no tindrien validesa.

Per resoldre aquesta equació numèricament, el primer que hem de fer és fixar un conjunt de punts ordenats $\{x_i\}_{i=0,\dots,n+1}$ distribuïts a l'interval $[a, b]$ on $x_0 = a$ i $x_{n+1} = b$. Generalment, utilitzem un conjunts de punts distribuïts uniformement a l'interval, com farem a la pràctica, on $x_i = a + ih$ per a tot $i = 0, ..., n + 1$ amb $h = \frac{b-a}{n+1}$.

Com $y \in \mathcal{C}^4((a, b))$, podem desenvolupar Taylor per a aquesta funció per a tot x_i on $i = 1, ..., n$ de manera que:

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \frac{h^3}{3!}y'''(x) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(\zeta), \quad x_i \leq \zeta \leq x_i + h \tag{2}$$

$$y(x - h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) - \frac{h^3}{3!}y'''(x) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(\hat{\zeta}), \quad x_i - h \leq \hat{\zeta} \leq x_i \tag{3}$$

Afegint (2) a (3) aproximades ambdues en x_i i evaluades als números $x_i+h = x_{i+1}$ i $x_i-h = x_{i-1}$ respectivament, obtenim:

$$y(x_i + h) + y(x_i - h) = y(x_{i-1}) + y(x_{i+1}) = 2y(x_i) + h^2 y''(x_i) + \frac{h^4}{4!}[y^{(4)}(\zeta) + y^{(4)}(\hat{\zeta})]$$

.

Si per simplicitat escrivim $y_i = y(x_i)$ llavors obtenim de l'anterior fòrmula que

$$y''(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + O(h^2). \tag{4}$$

Ara, si restem (3) a (2) evaluades com abans, obtenim:

$$2hy'(x_i) = y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) - \frac{h^3}{3!}y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}[y^{(4)}(\hat{\zeta}) - y^{(4)}(\zeta)],$$

i per tant

$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2). \tag{5}$$

Utilitzant, finalment, aquestes aproximacions de les derivades de segon i primer ordre obtindrem un error en l'aproximació d'ordre h^2.

A continuació, per a tots els punts x_i excepte x_0 i x_{n+1} (on ja coneixem el valor de la funció y) substituïm les formes de les aproximacions trobades en l'equació diferencial (1), obtenint:

$$L_h u_i = -\left[\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}\right] + p(x_i)\left[\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h}\right] + q(x_i)u_i = r(x_i), \qquad i = 1, ..., n, \tag{6}$$

on u_i seran les aproximacions de y_i que trobarem, amb $u_0 = \alpha$ i $u_{n+1} = \beta$, resolent el sistema lineal que acabem de generar amb n equacions i n incògnites.

Multiplicant (6) per $\frac{h^2}{2}$ i reagrupant els termes u_i obtenim el sistema d'equacions lineals definit per les equacions

$$a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = \frac{h^2}{2} r(x_i), \qquad i = 1, ..., n \tag{7}$$

amb

$$a_i = -\frac{1}{2}\left[1 + \frac{h}{2}p(x_i)\right],\ b_i = \left[1 + \frac{h^2}{2}q(x_i)\right],\ c_i = -\frac{1}{2}\left[1 - \frac{h}{2}p(x_i)\right],\ u_0 = \alpha \text{ i } u_{n+1} = \beta.$$

Aquest sistema, en forma matricial, el podem escriure com $Au = r$ on

$$u = (u_1, ..., u_n)^T \tag{8}$$

$$r = \frac{h^2}{2}\left(r(x_1) - \frac{2a_1\alpha}{h^2}, r(x_2), ..., r(x_{n-1}), r(x_n) - \frac{2c_n\beta}{h^2}\right)^T \tag{9}$$

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & & & a_n & b_n \end{pmatrix}. \tag{10}$$

És fàcil veure que un dels mètodes més efectius per resoldre aquest sistema lineal és l'ús de l'eliminació Gaussiana. Tanmateix, aquest mètode és presentat a l'assignatura de *Mètodes Numèrics I* i no l'usarem.

Enunciat de l'exercici - part I

Aquesta pràctica reforçarà la implementació dels mètodes de resolució de sistemes lineals vists a teoria. Durant tota la pràctica utilitzarem el criteri de parada per aproximació de l'error absolut que es troba als apunts de Joan Carles Tatjer. Cada programa estarà dissenyat en un arxiu `C` diferent anomenat igual que la lletra de cada apartat. Per exemple, el programa de l'apartat (b) s'anomenarà `b.c`. Per a cada programa, o de forma global, s'ha de incloure un document que especifiqui de forma clara com compilar i executar cada programa. Per a cada programa és **obligatori** definir mètodes `double p(double x)`, `double q(double x)` i `double r(double x)` que seran utilitzats de forma **obligatòria** per a representar les funcions p, q i r de les equacions diferencials. La iteració inicial per a tots els mètodes de resolució estarà definida com a $u_0 = 0_{\mathbb{R}^n} = (0, ..., 0)$. No es permet fer ús de la memòria per guardar les matrius d'iteració, s'espera dels alumnes que es trobi una representació a memòria adequada que només guardi informació rellevant.

a) Desenvolupa un programa a `C` amb paràmetres d'entrada per consola `double a, double b` (inici i final de l'interval $[a, b]$ respectivament), `int n` (nombre de punts interiors a l'interval tal que treballem amb $\{x_i\}_{i\in\{0,...,n+1\}}$), `double alpha`, `double beta` ($\alpha$ i β de les condicions de frontera, respectivament), `double epsilon` (tolerància d'error absolut ϵ de la solució) i `int max_iter` (màxim d'iteracions per al mètode de resolució lineal iteratiu) que resolgui el sistema lineal anterior mitjançant el mètode iteratiu de Jacobi. L'output d'aquest programa serà un fitxer `a.out` que contingui:

```
a b n alpha beta max_iter epsilon num_iteracions error_estimat
u_1
u_2
...
u_n
```

on `num_iteracions` és el nombre de iteracions realitzades per el programa, `error_estimat` és l'error estimat de les aproximacions a les solucions exactes del problema. i `u_i` és el valor aproximat de u_i.

b) Desenvolupa seguint les directrius de l'apartat anterior un programa a `C` que resolgui el sistema lineal anterior mitjançant el mètode iteratiu de Gauss-Seidel.

c) Desenvolupa seguint les directrius de l'apartat anterior un programa a `C` que resolgui el sistema lineal anterior mitjançant el mètode de sobrerelaxació (SOR) per a Gauss-Seidel. Aquest programa d'entrada té, a més a més, el paràmetre d'entrada `double omega` que representa el paràmetre ω del mètode. El format del output d'aquest programa serà:

```
a b n omega alpha beta max_iter epsilon num_iteracions error_estimat
u_1
u_2
...
u_n
```

Definim ara $p(x) = x$, $q(x) = e^x$ i $r(x) = xsin(x)(2 + e^x) + cos(x)(x^2 - 2)$.

d) Siguin $[a, b] = [0, 2\pi]$, $n = 100$, $\alpha = 0$, $\beta = 0$, `max_iters=3000` i $\epsilon = 10^{-10}$ executa els programes de Jacobi i de Gauss-Seidel amb aquests paràmetres i guarda els resultats en fitxers `jacobi100.out` i `gauss100.out` respectivament. Quàntes iteracions necessita cada mètode per a convergir?

e) Fes el mateix que a l'apartat anterior però ara amb $n = 1000$ i `max_iters=250000`. Els fitxers de sortida seran ara `jacobi1000.out` i `gauss1000.out`.

f) Amb els paràmetres de l'apartat (d) excepte `max_iters`, que ara posem a `30000`, executa el mètode SOR amb les següents omegues: $\omega \in [-5, 0.1, 0.2, 0.3, 1, 1.8, 1.9, 5]$. Per a quins ω el mètode convergeix? Amb quàntes iteracions?

g) Amb els paràmetres de l'apartat (e) excepte `max_iters`, que ara posem a `300000`, executa el mètode SOR amb les següents omegues: $\omega \in [-5, 0.1, 0.2, 0.3, 1, 1.8, 1.9, 5]$. Per a quins ω el mètode convergeix? Amb quàntes iteracions?

h) *(Opcional)* Demostra que si $p(x) = 0$ llavors els mètodes iteratius de Jacobi i de Gauss-Seidel convergeixen.

Criteris de correcció i entrega

Per a l'entrega és indispensable seguir les instruccions de l'enunciat i entregar una memòria on s'expliqui com compilar i executar els programes realitzats, que també s'han de incloure. A més a més, també cal afegir a aquesta memòria les respostes a les preguntes de l'enunciat. Finalment, és necessari incloure els arxius de resultats `.out` demanats.

La pràctica no tindrà una nota numèrica, només tindrà una qualificació d'**APTE** o de **NO APTE**. Obtenir un **APTE** serà condició indispensable per aprovar l'assignatura.

Hi hauran dues dates d'entrega. Només es necessita obtenir un **APTE** en una d'elles. L'objectiu és donar la oportunitat de corregir les errades d'un **NO APTE** en la segona entrega per obtenir un **APTE**.

Referències

[1] Mark E. Davis. "Boundary-Value Problems for Ordinary Differential Equations: Discrete Variable Methods". A: *Numerical methods and modeling for chemical engineers*. Ed. de John Wiley & Sons.

[2] Encyclopedia of Mathematics. *Differential equation, ordinary*. `http://encyclopediaofmath.org/index.php?title=Differential_equation,_ordinary&oldid=50981`. Accessed: 2021-02-26.

[3] Mohd Mughti Hasni Zanariah Abdul Majid i Norazak Senu. "Solving Second Order Linear Dirichlet and Neumann Boundary Value Problems by Block Method". A: *IAENG International Journal of Applied Mathematics* ().