Exercícios Computacional usando o Octave
Algoritmos Numéricos I - 2021/1 (EARTE)

Andrea Valli

Objetivos:

Observar o comportamento dos métodos diretos quanto as características da matriz dos coeficientes e o mal condicionamento. Resolver uma aplicação usando o Octave.

Equipe e Entrega:

Resolva exercícios 1 e 2, e escolha mais um da sua preferência (exercícios 3 ou 4). Cada exercício computacional vale 10 pontos e podem ser feitos por grupos de no máximo 3 alunos. Entreguem apenas um relatório final (no formato pdf) para o grupo e não é permitido trocar informações entre os grupos. Se for necessário, uma entrevista será feita para fechar a nota do trabalho.

Conceitos/comandos importantes:

- A coleção de matrizes esparsas *SuiteSparse Matrix Collection* (https://sparse.tamu.edu/) disponibiliza uma variedade de matrizes esparsas oriundas das mais deversas áreas do conhecimento. Um dos formatos disponíveis para as matrizes é <nome>.mat, contendo um arquivo binário para gerar uma matriz esparsa no formato *Compressed Column Sparse* (CCR) para o Octave. Comandos:
  - `load <nome>.mat` (carrega dados da matriz em uma estrutura auxiliar `A`)
  - `AA = Problem.A` (armazena os dados da estrutura `A` na matriz esparsa `AA` no formato CCR)
- Os métodos diretos são bem eficientes para matrizes de pequeno porte. Entretanto, o processo de solução prevê preenchimento de posições originalmente nulas (fill-in), aumentando assim o número de operações de ponto flutuante. Comandos:
  - `[L,U,P,Q]=lu(A)` (obtém os fatores da matriz esparsa `A`)
  - `spy(A)` (obtém a esparsidade da matriz `A`)
  - `nnz(A)` (retorna o número de elementos não nulos da matriz `A`)
- Uma matriz é dita mal-condicionada se $\|A\|\|A^{-1}\|$ for um valor expressivamente elevado. Comandos:
  - `cond(A)`
  - `norm(x,*)` (a norma euclidiana `*=2` ou a norma do máximo `*=inf`)
  - `n=rows(A);b=A*ones(n,1)` (vetor `b` de tamanho `n` contendo a soma das linhas de `A`)

- Os métodos iterativos dependem de critérios de convergência:

$$x^{(k+1)} = M\,x^{(k)} + c \text{ converge } \Leftrightarrow \rho(M) < 1$$

  onde $\rho(M)$ é o maior módulo dos autovalores de M. Comandos do Octave:

  - `[V lambda]=eig(A)`, obtém os autovetores `V` e os autovalores `lambda` de `A`.
  - `max(abs(diag(lambda)))`, obtém o maior valor em módulo dos elementos da diagonal de `lambda`.

- Funções que construi para os cálculos das soluções aproximadas e análise da convergência:

  - `[MJ,MS,MSOR,diag_nula] = fatora(A,w)`, obtém as matrizes de iteração dos métodos: Gauss-Jacobi (`MJ`), Gauss-Seidel (`MS`), successive over-relaxation (`SOR`).
  - `[x,iter,res,diag_nula] = sor(A,b,tol,nmaxiter,w)`, obtém a solução e o resíduo pelo método `SOR` (`w=1` Gauss-Seidel).

  onde `A,b` = matriz, vetor independente, `tol` = tolerância, nmaxiter = número máximo de iterações, `w` = parâmetro SOR (`w=1` Gauss-Seidel), `x` = vetor solução, `iter` = número de iterações, `res` = norma do máximo do resíduo, `diag_nula = 1` (diagonal principal com elemento nulo).

- Função que resolve sistemas de equações diferenciais ordinárias:

  - `[x, istate, msg] = lsode (fcn, x_0, t)`

  onde `fcn` é a função que define as derivadas do sistema, `x_0` e `t` são os estados inicial e final do sistema, respectivamente. A função retorna a solução `x`, o valor de `istate` será 2 após um cálculo bem-sucedido e uma adicional mensagem (`msg`) caso não foi possível obter a solução.

1. Para as matrizes esparsas quadradas `n x n`, resolva os exercícios a seguir:

   - **bcsstk01.mat**: `n = 48`
   - **plat362.mat**: `n = 362`
   - **bcsstk15.mat**: `n = 3948`

   (a) Para cada matriz, obtenha o tamanho, a norma euclidiana e o número de condição.

   (b) Obtenha os fatores da decomposição LU, usando a função `[L,U,P,Q] = lu(A)`, e observe a configuração de esparsidade das matrizes `A`, `L` e `U`, usando o comando `spy(A)`. Coloque também as configurações das matrizes no seu relatório.

   (c) Calcule as taxas de preenchimento: $100 - \frac{nnz(A)}{nnz(L)+nnz(U)} * 100$.

   (d) Calcule a norma do erro, $||erro||_\infty = norm(ones(n,1) - x, inf)$, e a norma do resíduo, $||res||_\infty = norm(b - A * x, inf)$, para a solução obtida pelo método de Eliminação de Gauss.

   (e) Mostre, em uma tabela, as informações calculadas para cada matriz e escreva de forma suscinta suas conclusões com relação ao preenchimento no processo de decomposicão LU, condicionamento das matrizes, acuricidade das soluções e tamanho dos resíduos obtidos.

2. Para a matriz mal condicionada **fs_183_3.mat**, compare as soluções obtidas pelo método direto de Eliminação de Gauss ($x = A\backslash b$) e pelo método iterativo de Gauss-Seidel (função SOR com $w = 1$), em termos da acuidade das soluções aproximadas, onde $b = A * ones(1,n)$.

   (a) Obtenha o tamanho, a norma euclidiana, o número de condição da matriz.

   (b) Obtenha os fatores da decomposição LU, usando a função `[L,U,P,Q] = lu(A)`, e observe a configuração de esparsidade das matrizes `A`, `L` e `U`, usando o comando `spy(A)`. Calcule a taxa de preenchimento: $100 - \frac{nnz(A)}{nnz(L)+nnz(U)} * 100$. Coloque também a configuração da matriz no seu relatório.

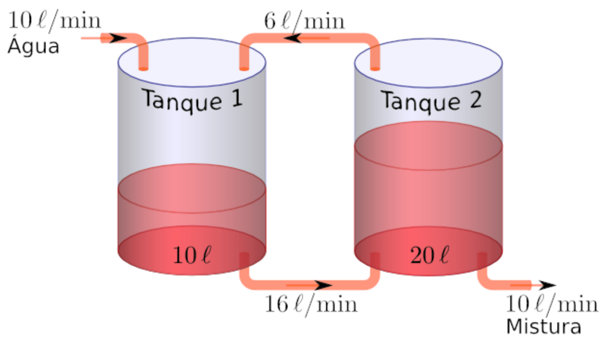
   (c) Calcule a norma do erro, $||erro||_\infty = norm(ones(n,1) - x, inf)$, e a norma do resíduo, $||res||_\infty = norm(b - A * x, inf)$, para a solução obtida pelo método de Eliminação de Gauss.

   (d) Verifique a convergência do método de Gauss-Seidel calculando o raio espectral da matriz de iteração do método, usando as funções dadas. Observe também se o método de Gauss-Jacobi converge e diga qual dos dois métodos iterativos converge mais rápido.

   (e) Escolha uma tolerância (`tol`) e um número máximo de iterações (`iter`) adequados para obter uma solução mais acurada ($||erro||_\infty$ menor) do que a obtida pelo método direto. Aqui o critério de parada é definido pelo decaimento do resíduo: `norm((b-A*x),inf) < tol`, como pode ser observado na função `sor` (Gauss-Seidel para `w=1`) fornecida. Faça o gráfico do decaimento do logarítmo do resíduo com o número de iterações: `plot(iter,log(res))` e coloque no seu relatório.

   (f) Escreva de uma forma suscinta suas conclusões em relação ao experimento realizado, comparando as soluções obtidas pelo método direto e iterativo. Comente se foi possível encontrar uma solução com uma exatidão melhor usando o método de Gauss-Seidel.

3. Em uma indústria, dois tanques se encontram conectados conforme a ilustração abaixo. Neste problema da mistura, no instante de tempo $t = 0$, o `Tanque 1` contém 10 litros de água pura e o `Tanque 2` contém 20 litros de uma mistura de água com 12 Kg de sal. Além disso, a água pura está sendo constantemente bombeada para dentro do `Tanque 1` a uma taxa de 10 litros por minuto e as misturas salinas são trocadas entre os dois tanques. Mais ainda, a mistura escoa do `Tanque 2` a uma taxa de 10 litros por minuto.



Encontre a quantidade de sal em cada tanque no instante de tempo t, dado o sistema de equações de primeira ordem do problema:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1}{dt} = -\dfrac{8}{5}x_1 + \dfrac{3}{10}x_2, & x_1(0) = 0 \\[2ex] \dfrac{dx_2}{dt} = \dfrac{8}{5}x_1 - \dfrac{4}{5}x_2, & x_2(0) = 12 \end{cases}$$

onde $x_1(t)$ e $x_2(t)$ representam a quantidade de sal no instante t no `Tanque 1` e `Tanque 2`, respectivamente. Resolva o problema usando o comando `lsode` disponível no octave, ou implemente um método de Runge-Kutta de sua escolha. Mostre em um mesmo gráfico, as soluções $x_1(t)$ e $x_2(t)$ em função do tempo no intervalo entre 0 e 14 minutos. Faça uma análise suscinta dos gráficos obtidos.

4. Assuma um modelo predador-presa de duas espécies, onde a espécie de presa (V) é reabastecida por imigração, e não por reprodução, e a espécie predadora (P) tem sua taxa de natalidade determinada exclusivamente por sua taxa de ingestão de presas. Sendo assim, as equações do modelo podem ser representadas pelo sistema de primeira ordem:

variação da presa (vítima V):

$$\frac{dV}{dt} = \theta - a\,PV$$

variação do predador (P):

$$\frac{dP}{dt} = \epsilon a\,VP - s\,P$$

onde θ é a taxa de imigração das presas, a mede a eficiência de captura, ou seja, o efeito de um predador sobre o crescimento populacional das presas, ϵ é a eficiência de conversão de presas consumidas em novos predadores e s é a taxa de mortalidade per capita dos predadores. Observe que o termo ϵaV é a taxa de crescimento per capita da população de predadores em função da abundância das presas. Modelos do tipo predador-presa são usados em várias áreas do conhecimento, tais como ciências biológicas, agrárias, ambientais e econômicas para avaliação qualitativa e quantitativa do impacto da competição em várias populações: por exemplo, bactérias, pragas, neurônios, átomos ou moléculas, indivíduos infectados ou mesmo em grupos econômicos. Em particular, células cancerígenas (presa) competem por recursos limitados, tais como oxigênio e glicose, e cooperam entre si para combater o sistema imunológico (predador).

Use este modelo para explorar como a dinâmica populacional de um predador afeta a dinâmica populacional de uma espécie de presa e vice-versa, considerando

$$\theta = 10, \quad \epsilon = 1, \quad a = 0.1$$

e dois valores para a taxa de mortalidade per capita dos predadores:

$$\begin{aligned} &(1) \quad s = 0.3 \\ &(2) \quad s = 2 \end{aligned}$$

Em cada caso, resolva o sistema para um período de 40 gerações, no intervalo de tempo $[0, 40]$, usando o comando `lsode` disponível no octave, e assumindo uma população inicial de 1 presa e 1 predador ($V(0) = 1$ e $P(0) = 1$). Para cada taxa de mortalidade dos predadores, mostre em um mesmo gráfico o tamanho das populações e faça uma análise suscinta dos resultados obtidos, observando o comportamento das populações em torno dos pontos de equilíbrio com relação ao tempo.