MAP-2121 - Primeiro Exercício programa - 2013

Instruções gerais -

Os exercícios computacionais pedidos na disciplina Cálculo Numérico têm por objetivo fundamental familiarizar o aluno com problemas práticos que requeiram técnicas numéricas em sua solução. Neste programa sua tarefa será resolver equações diferenciais escalares de segunda ordem com diferenças finitas e o uso de métodos iterativos na solução dos sistemas lineares resultantes. O contéudo da aplicação está ligado às soluções de equações diferenciais lineares de segunda ordem (você deve ver algo a respeito em seu curso de física e em álgebra linear).

Seu programa deve ser feito antes da P2. Não deixe para fazê-lo no final do prazo. O programa deve ser escrito em Linguagem C, Fortran ou outra de sua escolha.

Introdução-

Sua tarefa será resolver uma equação diferencial de segunda ordem

$$-x''(t) + p(t)x'(t) + q(t)x(t) = f(t) \tag{1}$$

onde p, q e f são funções contínuas (q é positiva) no intervalo $t \in [0, 1]$. A solução $x(t)$ será unicamente determinada ao impormos seus valores nos extremos do intervalo: $x(0) = \alpha, x(1) = \beta$. Equações deste tipo aparecem naturalmente em vários problemas físicos.

Para a resolução numérica desta equação iremos discretizá-la por diferenças finitas. Estas são baseadas em expansões em polinômios de Taylor da solução. Supondo então que $x(t)$ seja 4 vezes continuamente diferenciável podemos escrever:

$$x(t + h) = x(t) + x'(t)h + \frac{x''(t)}{2}h^2 + \frac{x'''(t)}{6}h^3 + O(h^4) \tag{2}$$

e

$$x(t - h) = x(t) - x'(t)h + \frac{x''(t)}{2}h^2 - \frac{x'''(t)}{6}h^3 + O(h^4) \tag{3}$$

Somando e subtraindo estas expressões obtemos as aproximações para a primeira e segunda derivada da função x em um ponto t:

$$x'(t) = \frac{x(t + h) - x(t - h)}{2h} + O(h^2) \tag{4}$$

e

$$x''(t) = \frac{x(t - h) - 2x(t) + x(t + h)}{h^2} + O(h^2) \tag{5}$$

Para a discretização da equação diferencial iremos empregar uma malha de pontos, particionando o intervalo $[0, 1]$ em n subintervalos. Definimos a partição do intervalo dada pelos pontos $t_i = ih, i = 0, 1, ..., n$, com $h = 1/n$. Para uma função g qualquer definida no ponto t_i usaremos a notação $g_i = g(t_i)$. Empregando esta notação e substituindo as aproximações (4) e (5) para as derivadas da solução, na equação diferencial (1) obtemos a aproximação (com erro $O(h^2)$) em cada ponto $t_i, i = 1, ..., n-1$:

$$-(\frac{x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}}{h^2}) + p_i(\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2h}) + q_i x_i = f_i \tag{6}$$

que multiplicada por h^2 e rearranjada leva a

$$(-1 - \frac{hp_i}{2})x_{i-1} + (2 + h^2 q_i)x_i + (-1 + \frac{hp_i}{2})x_{i+1} = h^2 f_i \tag{7}$$

Das condições de fronteira $x(0) = \alpha$ e $x(1) = \beta$ tiramos diretamente que $x_0 = \alpha$ e $x_n = \beta$. Uma vez que x_0 e x_n são assim determinados devemos apenas determinar as aproximações x_i para a solução de (1) nos pontos $t_i, i = 1, ..., n-1$. Para isto devemos resolver o sistema linear dado pelas equações (7) que são da forma:

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = F_i \tag{8}$$

onde $a_i = -1 - hp_i/2$, $b_i = 2 + h^2 q_i$, $c_i = -1 + hp_i/2$ e $F_i = h^2 f_i$.

O programa

Seu programa deve conter um procedimento que dado o valor de n e as funções $p(t)$, $q(t)$ e $f(t)$, determina (para $i = 1, ..., n-1$) os coeficientes a_i, b_i, c_i e F_i,

Para a solução do sistema linear (8) você deverá empregar o método iterativo SOR (Successive Over Relaxation), que consiste em uma generalização do método de Gauss-Seidel visto no curso. Para a solução de (8) pelo método SOR parte-se de uma aproximação inicial $x^{(0)}$ e a cada iteração determina-se a próxima aproximação:

$$x_i^{(k+1)} = \omega(F_i - c_i x_{i+1}^{(k)} - a_i x_{i-1}^{(k+1)})/b_i + (1-\omega)x_i^{(k)} \tag{9}$$

para $i = 1, ..., n-1$, usando os valores conhecidos de x_0 e x_n. Escolhendo o valor $\omega = 1$ o método SOR reduz-se ao método de Gauss-Seidel. O método SOR só pode convergir se $0 < \omega < 2$. Veremos que o uso de um parâmetro ω maior que 1 irá acelerar muito a convergência do método de Gauss-Seidel para esta equação.

Primeiro teste: Equação homogênea com solução conhecida

Considere o caso em que $f(t) = p(t) = 0$, $q(t) = 1$ e $\alpha = \beta = 1$. Neste caso você conhece a solução geral da equação de segunda ordem e as condições de fronteira determinam uma única solução. Em todos os seus testes você deverá partir da aproximação inicial $x_i^{(0)} = 1, i = 1, ..., n-1$ para resolver (8) pelo método SOR. Para os valores de $n = 32$, 64 e 128 seu programa deverá:

- Calcular e imprimir o valor do β_{max} do critério de Sassenfeld, verificando se este critério garante a convergência do método de Gauss-Seidel (ou seja, SOR para $\omega = 1$).
- Para valores de ω variando de 1.0 a 1.9, com passo 0.1, determinar qual o número de iterações necessárias até obter a norma do resíduo menor que 10^{-5} (para tal seu programa deve calcular o resíduo e sua norma a cada iteração do SOR). Você deve imprimir apenas, para cada ω, o número de iterações necessárias para convergência. Observe que a aproximação inicial deve ser a mesma para cada ω, para que esta comparação faça sentido.
- Com o melhor ω determinado no item anterior calcule a solução do sistema linear até obter o resíduo menor que 10^{-5} e determine a norma do erro (máximo das diferenças -em módulo- em cada ponto da malha) entre a solução calculada e a solução exata da equação diferencial

Ao final, determine a razão entre a norma dos erros para cada dois valores de n consecutivos. Estes estão de acordo com a ordem de convergência esperada para a discretização?

Segundo teste-

Defina agora $p(t) = t$, $q(t) = 0.01$ e $f(t) = sin(\pi t)$. Tome $\alpha = 1$ e $\beta = 3$. Para os mesmos valores de n repita os testes do caso anterior. No último item voce deve apenas imprimir os valores da solução final (apenas para o melhor ω), sem a necessidade de comparações com a solução exata da equação diferencial.