MAP5729 - Introdução á Análise Numérica
Exercíco Programa - 2013

Problemas de Contorno Não Lineares

Introdução

Discretizações de problemas de contorno não lineares em equações diferenciais requerem a resolução de sistemas de equações não lineares para se calcular aproximações da solução. Serão estudados aqui um problema de contorno simples e a sua discretização por diferenças finitas. Os sistemas de equações obtidos das discretizações podem ser resolvidos pelo método de Newton, mas, como ele não é globalmente convergente, um outro método será apresentado adiante.

O problema e a sua discretização

Considere o problema de contorno

$$
\begin{aligned}
&-y'' + f(x,y) = 0, \\
&y(a) = \alpha, y(b) = \beta.
\end{aligned} \tag{1}
$$

Pode-se mostrar que, se f satisfaz as hipóteses

$$
\begin{aligned}
&f(x,y) \in C^\infty\left([a,b] \times (-\infty,+\infty)\right), \\
&f_y(x,y) > -\pi^2/(b-a)^2,
\end{aligned} \tag{2}
$$

então o problema (1) admite uma única solução $\bar{y} \in C^\infty([a,b])$. As hipóteses (2) serão assumidas daqui em diante.

Seja $h = \frac{b-a}{n}$ para um número natural $n > 1$, e defina uma malha uniforme em $[a,b]$ com os pontos $x_i = a + ih$, $0 \le i \le n$. O problema discreto é obtido substituindo-se y'' em (1) por uma fórmula de diferença simétrica nos pontos interiores da malha:

$$
\begin{aligned}
&h^{-2}(-Y_{i-1} + 2Y_i - Y_{i+1}) + f(x_i, Y_i) = 0, \quad 1 \le i \le n-1, \\
&Y_0 = \alpha, \quad Y_n = \beta.
\end{aligned} \tag{3}
$$

As equações (3) formam um sistema não linear com incógnitas $Y_1, \ldots, Y_{n-1}$, para o qual usaremos a notação

$$
\mathbf{F}_h(\mathbf{Y}) = \mathbf{0}. \tag{4}
$$

Espera-se que a solução $\mathbf{Y}(h)$ do problema discreto convirja para a solução $\bar{y}$ do problema contínuo em algum sentido. A noção de convergência é formalizada da seguinte maneira. Para uma função z definida em $[a,b]$ satisfazendo as condições de contorno dadas em (1), definimos o operador de restrição φ_h

por $\varphi_h(z) = [z(x_1), \ldots, z(x_{n-1})]^T$. Dizemos que as soluções discretas $\mathbf{Y}(h)$ convergem para a solução exata $\bar{y}$ se

$$\lim_{h \downarrow 0} ||\mathbf{Y}(h) - \varphi_h(\bar{y})||_h = 0,$$

onde $|| \ ||_h$ é a norma do máximo em $R^{\frac{b-a}{h}-1}$.

A análise de convergência envolve os conceitos importantes de *consistência* e *estabilidade* do operador $\mathbf{F}_h$. O erro de discretização local é definido por $\mathbf{F}_h(\varphi_h(\bar{y}))$, que é uma medida de quão bem a solução exata satisfaz a equação discreta. Dizemos que o operador $\mathbf{F}_h$ é consistente de ordem $p > 0$ se

$$||\mathbf{F}_h(\varphi_h(\bar{y}))||_h = O(h^P).$$

A definição de estabilidade segue abaixo. Dizemos que o operador $\mathbf{F}_h$ é estável se, para quaisquer $\mathbf{U}$ e $\mathbf{V}$, existem $h_0 > 0$ e uma constante $c > 0$ independente de h tais que

$$||\mathbf{U} - \mathbf{V}||_h \leq c||\mathbf{F}_h(\mathbf{U}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{V})||_h, \quad \forall h \leq h_0.$$

Pode-se mostrar que (ver [1]), se $\mathbf{F}_h$ é consistente de ordem p e estável, então, para h suficientemente pequeno, (4) admite uma única solução $\mathbf{Y}(h)$ e as soluções discretas satisfazem $||\mathbf{Y}(h) - \varphi_h(\bar{y})||_h = O(h^P)$. Na referência ([1]) há uma demonstração da estabilidade de $\mathbf{F}_h$. Verifique como exercício que este operador é consistente de ordem 2, e portanto o erro global tende a zero proporcionalmente a h^2.

Uma discretização de ordem 4

Usando-se expansão em Taylor, podemos obter a seguinte discretização para o problema (1):

$$h^{-2}[-Y_{i-1} + 2Y_i - Y_{i+1}] + \frac{1}{12}[f_{i-1} + 10f_i + f_{i+1}] = 0,\ 1 \leq i \leq n-1, \qquad (5)$$

onde $f_i = f(x_i, Y_i)$. Denotaremos o sistema não linear associado a (5) por $\mathbf{G}_h(\mathbf{Y}) = 0$. Verifique como exercício que $\mathbf{G}_h$ é consistente de ordem 4. A estabilidade segue dos argumentos apresentados em ([1]). Logo, o erro global tende a zero proporcionalmente a h^4.

A referência ([1]) apresenta um estudo mais detalhado do problema. Lá encontram-se técnicas de extrapolação e métodos para se obter discretizações de ordem maior. Para os nossos propósitos, ficaremos apenas com as discretizações (3) e (5).

Métodos globalmente convergentes para sistemas não lineares

Estes métodos são motivados por problemas de minimização sem vínculos. Considere uma função

$$F : \Omega \subset \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$$

onde Ω é um subconjunto aberto do $\mathbf{R}^n$ e F tem derivadas até primeira ordem contínuas. Suponha que o Jacobiano de F, $F'(z)$, é inversível para todo $z \in \Omega$, e que F tem pelo menos uma raiz em Ω. O método de Newton para aproximar uma raiz de F consiste em calcular as iterações

$$z^{(k+1)} = z^{(k)} - F'(z^{(k)})^{-1} F(z^{(k)})$$

partindo-se de uma aproximação inicial $z^{(0)}$ (não é necessário inverter o Jacobiano). Se $z^{(0)}$ estiver suficientemente próximo da raiz, a sequência $z^{(k)}$ converge para a raiz e, se F tiver derivadas até segunda ordem contínuas, a convergência é quadrática. Porém, o método não é globalmente convergente, como mostra o exemplo abaixo:

Exercício Seja $F : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ definida por $F(z) = \arctan(z)$. Então, $\bar{z} = 0$ é uma raiz de F. Mostre que, se a aproximação inicial $z^{(0)}$ satisfizer

$$\arctan(|z^{(0)}|) > \frac{2|z^{(0)}|}{1 + (z^{(0)})^2},$$

então a sequência $z^{(k)}$ gerada pelo método de Newton diverge.

Para se ganhar uma intuição sobre o problema, considere a função

$$H(z) = ||F(z)||^2,$$

onde a norma usada é a norma Euclideana. É claro que toda raiz de F é um mínimo global de H. Se denotarmos por $d(z)$ o vetor

$$d(z) = F'(z)^{-1} F(z),$$

então

$$-\nabla H(z) \cdot d(z) = -2||F(z)||^2$$

e portanto o incremento do método de Newton aponta para uma direção de decréscimo da função H. O problema é que o tamanho deste incremento pode ser inicialmente grande. A idéia consiste em modificar o método de Newton, considerando-se iterações da forma

$$z^{(k+1)} = z^{(k)} - \lambda_k \, F'(z^{(k)})^{-1} F(z^{(k)}),$$

onde $\lambda_k \in (0, 1]$ é escolhido convenientemente de forma a se garantir um decréscimo de H com um incremento que não seja muito grande.

Uma possibilidade desta escolha é descrita a seguir. Ela explora a idéia de se exigir que a taxa média de decrescimento de H seja uma fração do incremento do método de Newton. Para tanto, considere um ponto $z \in \Omega$ tal que $H(z) > 0$. Usando a definição de derivada temos

$$H\left(z - \mu \, d(z)\right) = H(z) - \mu \left[\nabla H(z) \cdot d(z) + \frac{o(\mu)}{\mu} \right].$$

Como $\nabla H(z) \cdot d(z) > 0$ e $\frac{o(\mu)}{\mu} \to 0$ quando $\mu \to 0$, existe $0 < \bar{\mu} \leq 1$ tal que $\nabla H(z) \cdot d(z) + \frac{o(\mu)}{\mu} \geq \frac{1}{4} \nabla H(z) \cdot d(z)$ para $0 < \mu \leq \bar{\mu}$. Portanto,

$$H\left(z - \mu\, d(z)\right) \leq H(z) - \frac{\mu}{4} \nabla H(z) \cdot d(z), \quad 0 < \mu \leq \bar{\mu}.$$

Como $\nabla H(z) \cdot d(z) = 2||F(z)||^2 = 2H(z)$, temos

$$H\left(z - \mu\, d(z)\right) \leq \left(1 - \frac{\mu}{2}\right) H(z), \quad 0 < \mu \leq \bar{\mu}.$$

A relação acima suger o seguinte algoritmo:

- Calcule d_k resolvendo o sistema linear $F'(z^{(k)}) d_k = F(z^{(k)})$;
- determine o menor inteiro $j \geq 0$ tal que

$$H(z^{(k)} - 2^{-j} d_k) \leq \left(1 - 2^{-(j+1)}\right) H(z^{(k)});$$

- Defina $z^{(k+1)} = z^{(k)} - \lambda_k\, d_k$, onde λ_k é escolhido de modo que

$$H(z^{(k+1)}) = \min_{0 \leq i \leq j} H(z^{(k)} - 2^{-i} d_k).$$

Consulte ([2]) para resultados sobre convergência do algoritmo. É importante observar que, numa vizinhança suficientemente pequena de uma raiz de F, o algoritmo acima escolhe automaticamnete $\lambda_k = 1$, e portanto se reduz ao método de Newton, com convergência quadrática.

Tarefa

Implemente um programa em C ou Fortran para resolver o problema (1) usando os métodos (3) e (5) e o método globalmente convergente descrito acima. Teste o programa com os Problemas 1 a 4 de ([1], p. 33). Use vários valores de h para se verificar a ordem de convergência. Pense em informações relevantes para serem apresentadas na saída do programa. Use precisão dupla.

Algumas considerações práticas:

- Os Jacobianos de $\mathbf{F}_h$ e $\mathbf{G}_h$ são tridiagonais, e portanto d_k pode ser calculado de forma eficiente com o método de eliminação de Gauss para matrizes tridiagonais.
- Deve-se tomar o cuidado para que os incrementos não sejam muito grandes ou muito pequenos (pense em alguma maneira para implementar estas restrições).
- Como aproximação inicial para a resoluçao do sistema não linear, use o polinômio de grau menor ou igual a 1 que satisfaz as condições de contorno.

- A solução do sistema não linear não será em geral a solução do problema contínuo. Logo, não faz sentido resolvê-lo exatamente ou até a precisão da máquina. Devido à consistência e à estabilidade, é razoável impor como critério de parada o cálculo das iterações até que a norma do resíduo seja menor do que $c\,h^p$, onde c é uma constante pequena.

Referências

[1] V. Pereyra, *High Order Finite Difference Solution of Differential Equations*, preprint STAN-CS-73-348, Stanford University, 1973

[2] J. Stoer, R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, 2nd. Ed., Springer, New York, 1993