

**MAP5729 - Introdução á Análise Numérica
Exercício Programa - 2014**

O método de Rayleigh–Ritz

Problema de contorno em equações diferenciais ordinárias

Queremos neste exercício programa implementar um método para aproximarmos a solução do seguinte problema de equações diferenciais:

Encontrar a função $u(x)$ com derivadas contínuas até segunda ordem tal que

$$Lu(x) = -(p(x)u'(x))' + q(x)u(x) = f(x), \text{ para } a \leq x \leq b,$$

que satisfaz as condições de contorno

$$u(a) = 0, \quad u(b) = 0,$$

onde a função $p(x)$ é contínua, positiva e tem derivada contínua, e as funções $f(x), q(x)$ são contínuas e $q(x) \geq 0$. A solução $u(x)$ pertence ao espaço vetorial (verifique!) das funções com derivada segunda contínuas e que satisfazem $u(a) = u(b) = 0$, que chamaremos de $C_0^2[a, b]$.

O problema acima modela diversas situações tais como deformações longitudinais de uma barra elástica, distribuição estacionária da temperatura em uma barra e deflexões transversais de cabos suspensos.

Aproximação da solução por mínimos quadrados

Vamos aproximar a solução da equação por uma função \bar{v} pertencente a um espaço vetorial de dimensão finita V . Para tal, basta projetarmos ortogonalmente a solução u no espaço V . Isto é equivalente a determinarmos \bar{v} tal que $\langle u - \bar{v}, v \rangle = 0, \forall v \in V$, onde o produto interno é definido por $\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)dx$. A dificuldade em fazer esta projeção é que desconhecemos u . A famosa dupla Rayleigh-Ritz conseguiu superar esta dificuldade através de engenhosa idéia. Definiram o produto interno (em um espaço de funções que se anulam nos extremos do intervalo a e b):

$$\begin{aligned} \langle g, h \rangle_L &= \langle Lg, h \rangle = \int_a^b -(p(x)g'(x))'h(x) + q(x)g(x)h(x)dx = \\ &= \int_a^b p(x)g'(x)h'(x) + q(x)g(x)h(x)dx, \end{aligned}$$

onde a última igualdade é obtida através de integração por partes, usando que as funções se anulam nos extremos. Com este produto interno (verifique que é um produto interno!), se torna possível calcular a projeção ortogonal da solução u em V , mesmo sem conhecê-la:

$$\langle u - \bar{v}, v \rangle_L = \langle Lu - L\bar{v}, v \rangle = \langle f - L\bar{v}, v \rangle = 0, \forall v \in V$$

Note que só precisamos saber que a solução é tal que $Lu = f$. A condição de ortogonalidade acima pode ser escrita na forma

$$\langle \bar{v}, v \rangle_L = \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in V$$

Escolhendo-se uma base $\{g_j(x)\}_{j=1}^n$ para V , podemos representar a aproximação na forma $\bar{v} = \sum_{j=1}^n c_j g_j$. Os coeficientes são soluções do sistema normal $Ac = d$, onde $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$, a matriz A é dada por

$$a_{ij} = \langle g_i, g_j \rangle_L = \int_a^b [p(x)g'_i(x)g'_j(x) + q(x)g_i(x)g_j(x)]dx$$

e $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)^T$ onde

$$d_i = \langle f, g_i \rangle = \int_a^b f(x)g_i(x)dx.$$

Calculando a aproximação I: Splines lineares

Vamos agora definir o espaço V em que calcularemos a aproximação \bar{v} da solução. Primeiramente nós dividiremos o intervalo $[a, b]$ em $n+1$ sub-intervalos de mesmo comprimento, tomando os pontos igualmente espaçados $x_i = a + ih = a + i\frac{b-a}{n+1}$, para $i = 0 \dots n+1$. O espaço V será o espaço das funções contínuas em $[a, b]$, que se anulam nos extremos, e cujas restrições a cada sub-intervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $1 \leq i \leq n$, são retas. Ou seja, V é o espaço das funções lineares por partes (também chamadas de splines lineares) relativamente à partição do intervalo $[a, b]$.

Uma base para V é dada pelas funções g_j , $j = 1 \dots n$ definidas por

$$g_j(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } a \leq x \leq x_{j-1} \\ \frac{x-x_{j-1}}{h}, & \text{se } x_{j-1} \leq x \leq x_j \\ \frac{x_{j+1}-x}{h}, & \text{se } x_j \leq x \leq x_{j+1} \\ 0, & \text{se } x_{j+1} \leq x \leq b \end{cases}$$

Note que, para cada j , a função $g_j(x)$ é nula exceto no intervalo $[x_{j-1}, x_{j+1}]$. Este fato facilitará o cálculo dos coeficientes a_{ij} bem como do vetor d . Note também que se $\bar{v}(x) = \sum_{j=1}^n c_j g_j(x)$, então $\bar{v}(x_i) = c_i$.

Como $a_{ij} = \int_a^b [p(x)g'_i(x)g'_j(x) + q(x)g_i(x)g_j(x)]dx$, vemos que, se $|i-j| \geq 2$, então $a_{ij} = 0$. Portanto, os únicos elementos não nulos da matriz A são aqueles que estão nas 3 diagonais principais. Além disso, é fácil ver que $a_{i(i+1)} = a_{(i+1)i}$. Então, para encontrar os coeficientes da matriz A , só temos que calcular

$$\begin{aligned} a_{ii} &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} [p(x)(g'_i(x))^2 + q(x)(g_i(x))^2]dx + \\ &\quad + \int_{x_i}^{x_{i+1}} [p(x)(g'_i(x))^2 + q(x)(g_i(x))^2]dx, \\ a_{i(i+1)} &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} [p(x)g'_i(x)g'_{i+1}(x) + q(x)g_i(x)g_{i+1}(x)]dx, \end{aligned}$$

e para calcularmos o vetor d temos

$$d_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)g_i(x)dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)g_i(x)dx.$$

Uma observação importante é que a matriz do sistema normal é simétrica positiva definida e tridiagonal. A resolução do sistema linear pode ser feita de forma muito eficiente usando a fatoração de Cholesky com estrutura de banda.

Calculando a aproximação II: Splines cúbicos

Considere a mesma partição do intervalo $[a, b]$ usada acima. Agora, o espaço V será o espaço dos splines cúbicos relativamente à partição, que se anulam nos extremos do intervalo. Uma base conveniente para V é construída da seguinte maneira. Considere a função $B(t)$ definida por:

$$B(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } t \leq -2, \\ \frac{1}{4}(2+t)^3, & \text{se } -2 < t \leq -1, \\ \frac{1}{4}[(2+t)^3 - 4(1+t)^3], & \text{se } -1 < t \leq 0, \\ \frac{1}{4}[(2-t)^3 - 4(1-t)^3], & \text{se } 0 < t \leq 1, \\ \frac{1}{4}(2-t)^3, & \text{se } 1 < t \leq 2, \\ 0, & \text{se } 2 < t. \end{cases}$$

A função $B(t)$ é um spline cúbico na reta relativamente à partição formada pelos números inteiros (verifique!). As funções $B_j(x)$ definidas por

$$B_j(x) = B\left(\frac{x-a-jh}{h}\right), \quad -1 \leq j \leq n+2, \quad x \in [a, b]$$

formam uma base para o espaço dos splines cúbicos relativamente à partição dada do intervalo $[a, b]$ (verifique!). Exceto por um fator multiplicativo, as funções B_j são chamadas de B-splines. O espaço V é formado pelos splines cúbicos que se anulam em a e b , e uma base para ele é dada por (verifique!)

$$g_j(x) = \begin{cases} B_0(x) - 4B_{-1}(x), & \text{se } j = 0, \\ B_1(x) - B_{-1}(x), & \text{se } j = 1, \\ B_i(x), & \text{se } 2 \leq j \leq n-1, \\ B_n(x) - B_{n+2}(x), & \text{se } j = n, \\ B_{n+1}(x) - 4B_{n+2}(x), & \text{se } j = n+1, \end{cases}$$

cuja dimensão é $n+2$.

Para cada j , a função $g_j(x)$ é nula exceto no intervalo $[x_{j-2}, x_{j+2}] \cap [a, b]$, onde ela é positiva, e concluímos que os elementos $a_{ij} = \langle g_i, g_j \rangle_L$ são nulos se

$|i-j| \geq 4$. Portanto, a matriz A é simétrica definida positiva e heptadiagonal. A resolução do sistema normal pode ser feita de forma eficiente usando a fatoração de Cholesky com estrutura de banda.

Tarefa

Escreva um programa (em Fortran, C ou C++) tal que, dadas as funções $p(x)$, $q(x)$ e $f(x)$, o número n de pontos no interior do intervalo e os extremos do intervalo, constrói o sistema normal $Ac = d$ e o resolve para obter os coeficientes da aproximação. A resolução do sistema normal deve obrigatoriamente usar a estrutura de banda. Para isto, pense em uma estrutura de armazenamento adequada e implemente uma rotina geral para a fatoração de Cholesky com estrutura de banda. Para montar o sistema normal, você precisa calcular integrais. Elas devem ser calculadas em cada intervalo $J_i = [x_{i-1}, x_i]$ para garantirmos a regularidade do integrando. Para o caso I, use a fórmula do ponto médio em J_i e para o caso II use quadratura de Gauss com 3 pontos em J_i . Pode-se mostrar que aproximando-se as integrais desta forma, a ordem de convergência é preservada (ver a referência citada no final).

Obs.: *Implemente o código usando precisão dupla.*

Teste o programa com os exemplos abaixo.

Exemplo 1 O problema $-u'' = 1$, $0 \leq x \leq 1$, $u(0) = u(1) = 0$ tem solução exata $u(x) = 0.5x(1-x)$. Para este problema, o método descrito acima calcula a solução exata nos pontos x_i . Resolva o problema usando $n+1 = 50, 100$ e 200 e para cada caso imprima o erro

$$\|u - \bar{v}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |u(x_i) - \bar{v}(x_i)|$$

Devido a erros de arredondamento, o erro não será nulo, mas será muito pequeno.

Exemplo 2 Resolva o problema de contorno

$$-(e^x u')' + e^x u = x + (2-x)e^x, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad u(0) = u(1) = 0$$

usando $n+1 = 50, 100, 200, 400$ e 800 . A solução exata é $u(x) = (x-1)(e^{-x}-1)$. Pode-se mostrar que o erro entre \bar{v} e u tende a zero proporcionalmente a h^2 no caso I e a h^4 no caso II. Verifique numericamente este fato imprimindo, para cada n , os valores de h , $\|u - \bar{v}\|_\infty$, $\|u - \bar{v}\|_\infty/h^2$ (caso I) e $\|u - \bar{v}\|_\infty/h^4$ (caso II).

A referência a seguir contém informações relevantes:

Schryer, N. L., *A tutorial on Galerkin's method, using B-splines, for solving differential equations*, Bell Laboratories Computing Science Tech. Rep. 52, 1976 (<http://cm.bell-labs.com/cm/cs/cstr/52.pdf>)