# O método de Rayleigh-Ritz

EP2 - CompIII - **Data de entrega: 11/12/2023**

## 1 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.

## 2 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 $\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)\, dx$ é o produto interno.. 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 $c = (c_1, c_2, ..., c_n)^T$, 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 $d = (d_1, d_2, ..., d_n)^T$ onde

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

# 3 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 $i = 0...n+1$. O espaço $V$ será o espaço das funções contínuas em $[a, b]$, que se anulam nos extremos, e cujas restrições a cada sub-intervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $1 \leq i \leq i+1$, 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 $g_j$, $j = 1..n$ 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 $\mid i-j \mid \geq 2$, 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.

# 4 Calculando a aproximação II: Splines cúbicos

Considere a mesma partição do intervalo $[a, b]$ usada acima. Agora, o epaço $V$ 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:

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

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

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

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 chanadas 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 concluimos 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.

# 5 Tarefa

Escreva um programa em Python 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, use a implementação feita no EP2.

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 $J_i$ (veja o Apêndice). Pode-se mostrar que aproximando-se as integrais desta forma, a ordem de convergência é preservada. O erro entre $\bar{v}$ e $u$ nas aproximações I e II tende a zero proporcionalmente a $h^2$ e $h^4$, respectivamente (ver a referência citada no final).

Para estimar o erro, você precisará implementar também funções para calcular $\bar{v}(x)$ em pontos arbitrários $x$ do intervalo $[a,b]$. Teste o programa com os exemplos abaixo.

**Exemplo 1** O problema $-u'' = 1, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad u(0) = u(1) = 0$ tem solução exata $u(x) = 0.5\,x(1-x)$. 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

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

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

**Exemplo 2** Resolva o problema de contorno

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

usando $n+1 = 50$, 100, 200, 400 e 800. A solução exata é $u(x) = (x-1)(e^{-x}-1)$. Para estimar o erro, avalie a aproximação $\bar{v}$, para cada valor de $n$, nos pontos

$$t_k = k * 0.0005, \quad 0 \leq k \leq 2000,$$

e calcule

$$\|u - \bar{v}\| = \max_{0 \leq k \leq 2000} |u(t_k) - \bar{v}(t_k)|.$$

Imprima esses valores bem como $\|u-\bar{v}\|/h^2$ para a aproximação I e $\|u-\bar{v}\|/h^4$ para a aproximação II e verifique se as ordens de convergência estão satisfeitas.

# 6 Apêndice

As fórmulas de quadratura de Gauss usam como nós as raízes dos polinômios de Legendre e permitem resultados precisos com um número mínimo de pontos. A fórmula com $n$ pontos para aproximar a integral no intervalo $[-1, 1]$ é exata para polinômios de grau menor ou igual a $2n - 1$.

## 6.1 Fórmula de Gauss com 1 ponto (ponto médio)

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx 2 \cdot f(0).$$

## 6.2 Fórmula de Gauss com 3 pontos

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx \frac{5}{9} f\Big(-\sqrt{0.6}\Big) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\Big(\sqrt{0.6}\Big).$$

Você tem de fazer mudança de variável para usar estas fórmulas nos intervalos $J_i = [x_{i-1}, x_i]$.

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 (https://www.telecomarchive.com/docs/bsp-archive/Letters%20and%20Memos/CSTR/CSTR%2052.pdf)