ANEDO - Trabalho Final - Leonardo

July 10, 2017

1 Explorando um Método Espectral

1.1 Motivação: soluções aproximadas de equações diferenciais

- Dado um espaço de funções escolhido a priori, qual função melhor aproxima a minha equação diferencial?
- Trabalharemos com o seguinte exemplo:

Que polinômio de grau ≤ 5 melhor aproxima a solução de $u''(x) = x^2 - u(x)$, com condições de contorno $u(-1) = A,\ u'(1) = B$, sendo A e B fixos?

```
In [1]: A = 2 ; B = 1/2 ; dim = basis_size = 6  # (grau máximo de cada polinômio = dim-1)
```

1.2 Solução numérica: aspectos computacionais

- Notação para a solução aproximada: $u = \sum_k c_k \phi_k \equiv \langle \mathbf{\Phi}, \mathbf{c} \rangle$, sendo $\{\phi_0, \ldots, \phi_n\}$ nossa base de funções.
- Escolha de base: polinômios de Chebyshev, $\phi_n(x) = \cos(n \cdot \arccos(x)),\ x \in [-1,\ 1]$.
- Várias propriedades interessantes, como por exemplo satisfazerem à recorrência $\begin{cases} \phi_0(x) = 1; \\ \phi_1(x) = x; \\ \phi_{n+1}(x) = 2x\,\phi_n(x) - \phi_{n-1}(x). \end{cases}$
- Trata-se de uma sequência de funções ortogonais com relação à função peso $\omega(x) := 1/\sqrt{1-x^2}$.
  - Wikipedia sobre polinômios ortogonais
  - Ou seja, para cada par ϕ_m, ϕ_n de funções distintas da base, o produto interno $\langle \phi_m, \phi_n \rangle_\omega$ se anula:

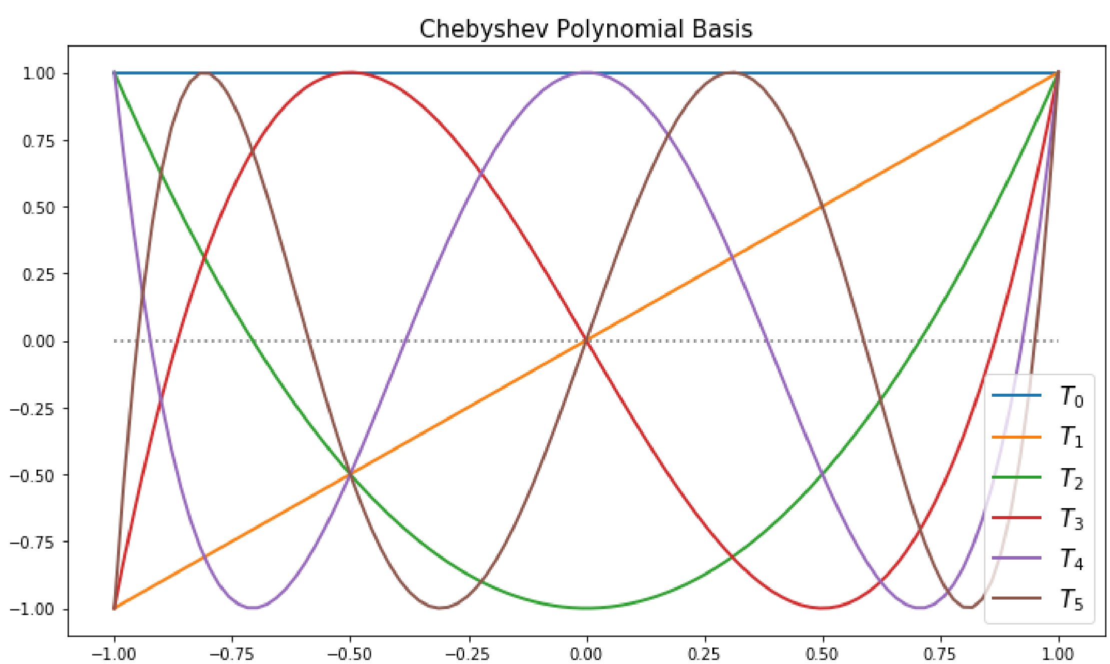
$$\langle \phi_m, \phi_n \rangle_\omega = \int_{-1}^{1} \phi_m(x)\,\phi_n(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} 0,\ m \neq n; \\ \pi,\ m = n = 0; \\ \pi/2,\ m = n \neq 0. \end{cases}$$

- Derivação / Integração

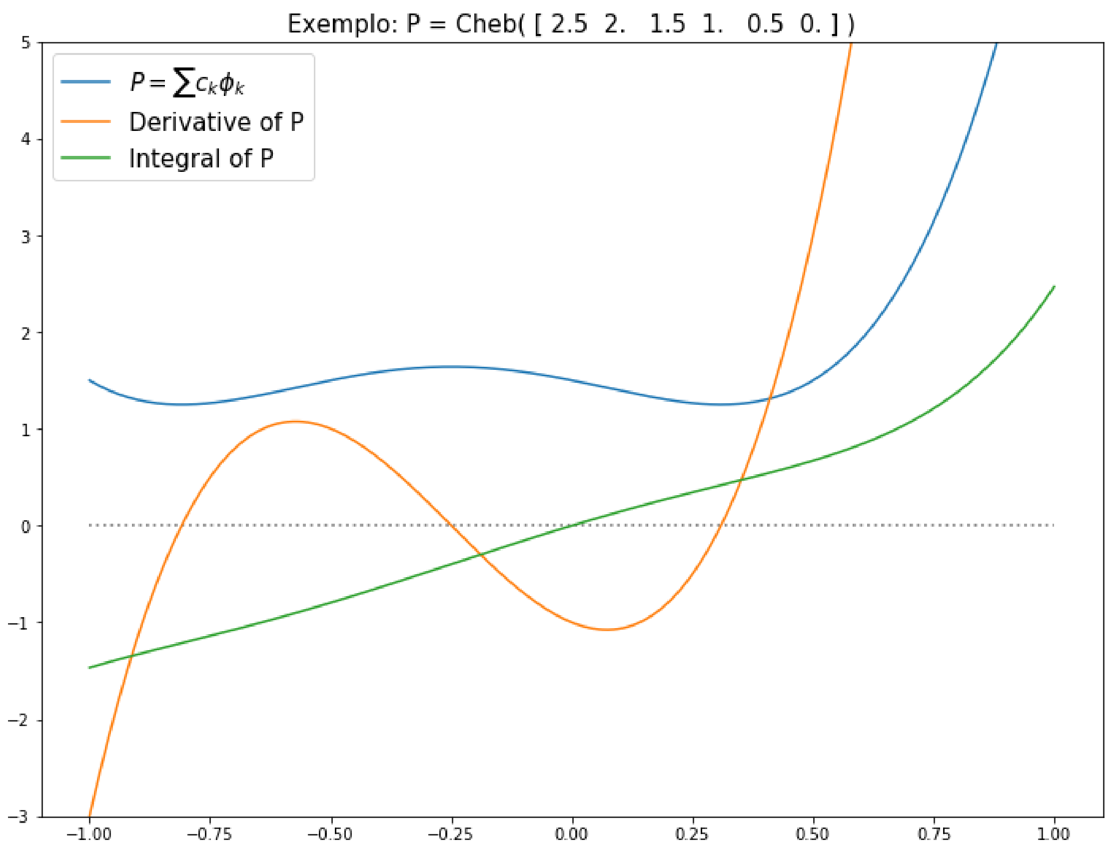
- Cada problema envolve derivação, integração e outras operações elementares entre funções da base;
- Tudo fica mais fácil se resolvermos cada uma dessas operações de maneira rápida e automática.

In [2]:
```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import cvxpy as cvx
P = np.polynomial

def completar(a, size=dim, k=0):
    """Aumenta o tamanho de vetores para completar `size` entradas."""
    return np.lib.pad(a, (0, size-len(a)), 'constant', constant_values=(k,))
```

In [3]:
```
phi = [P.Chebyshev.basis(k) for k in range(basis_size)]  # polynomial basis

# Polinômio que representa f(x) = x**2, na base de Chebyshev:
x2_pol = P.Polynomial([0, 0, 1.]).convert(kind=P.Chebyshev)
x2_array = completar(x2_pol.coef)  # x4_coef = completar((x2_pol**2).coef)

fig, ax = plt.subplots(figsize=(12,7))
ax.set_title("Chebyshev Polynomial Basis", fontsize=15)
ax.plot([-1, 1], [0, 0], ':', color=(0,0,0,.5), lw=1.7)
for k,p in enumerate(phi):
    ax.plot(*p.linspace(100), lw=2, label="$T_{:d}$".format(k))
ax.legend(loc="lower right", framealpha=.75, fontsize=15) ; plt.show()
```



```
In [4]: coefs = np.arange(0, .5 * basis_size, .5)[::-1]
        lin_comb_pol = np.dot(coefs, phi)

        fig, ax = plt.subplots(figsize=(12,9))
        ax.set_title("Exemplo: P = Cheb( {} )".format(coefs), fontsize=15)
        ax.plot([-1, 1], [0, 0], ':', color=(0,0,0,.5), lw=1.7)
        ax.plot(*lin_comb_pol.linspace(200), label="$P = \\sum c_k \\phi_k$")
        ax.plot(*lin_comb_pol.deriv().linspace(200), label="Derivative of P")
        ax.plot(*lin_comb_pol.integ(k=0).linspace(200), label="Integral of P")
        ax.legend(loc="upper left", fontsize=15)
        ax.set_ylim((-3, 5)) ; plt.show()
```



1.3 Voltando ao problema-exemplo:

$$\begin{cases} u''(x) = x^2 - u(x); \\ u(-1) = A, \; u'(1) = B \end{cases}$$

- Dada uma função candidata ψ, como saber se ela é uma boa solução para o problema?

1.4 Escolha de uma *"função de custo"*

- Como queríamos que $u''(x)$ se igualasse a $x^2 - u(x)$, podemos penalizar, por exemplo, alguma função que cresça com essa diferença:

$$Q_0(\psi, x) = [\, \ddot{\psi}(x) - (x^2 - \psi(x))\,]^2.$$

Mas para quais valores de x, exatamente?
Uma resposta possível é "todos", simplesmente integrando Q_0 em $x \in [0, 1]$:

$$Q_1(\psi) = \int_{-1}^{1} [\, \ddot{\psi}(x) - (x^2 - \psi(x))\,]^2\, dx.$$

Com um pouco de fé, porém, podemos aproveitar a ortogonalidade de $\mathbf{\Phi}$ tomando a medida $d\omega(x) = \dfrac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$:

$$Q(\psi) = \int_{-1}^{1} [\, \ddot{\psi}(x) - (x^2 - \psi(x))\,]^2\, \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Observe que, se $u_\star$ é solução do problema, então $Q(u_\star) = 0$, mas que de um modo geral não é necessário que $u_\star \in \text{span}\{\phi_k,\, k \leq n\}$.

1.5 Representação:

- O mapa $x \mapsto x^2$ é identificado, por exemplo, com o vetor $\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, 0, 0, \ldots, 0\right]$, uma vez que $x^2 = \frac{1}{2}\phi_0(x) + \frac{1}{2}\phi_2(x)$.
- Precisamos das derivadas segundas das funções da base, visto que $\psi = \sum c_k \phi_k$ e $\ddot{\psi} = \sum c_k \phi_k'' = D^2\psi$.
- É interessante investigarmos um pouco mais o produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_\omega$, visto que a função de custo é quadrática.

```
In [5]: # psi, identificada como operador sobre os coeficientes, corresponde à matriz identidade
        phi_matrix = np.eye(dim)

        # Aproveitamos a implementação da biblioteca numpy para o cálculo de derivadas de polinô
        d_phi  = [pol.deriv(m=1) for pol in phi]
        d2_phi = [pol.deriv(m=2) for pol in phi]

        # Pensando a diferenciação como operador, sua matriz tem como colunas as derivadas da ba
        d2_phi_matrix = np.zeros((dim, dim))
        for k,pol in enumerate(d2_phi):
            d2_phi_matrix[::, k] = completar(pol.coef) # (completando com zeros)
```

1.6 Análise da função de custo:

Vimos que

$$Q(\psi) = \int_{-1}^{1} \left[\, \psi(x) + \ddot{\psi}(x) - x^2 \,\right]^2 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}.$$

e nesse momento lembramos que, em $d\omega(x) = w(x)\,dx$, cada produto de funções é simplificado:

$$\left(\sum_{i=0}^{n} c_i\phi_i\right)^2 = \left(\sum_{i=0}^{n} c_i\phi_i\right)\left(\sum_{j=0}^{n} c_j\phi_j\right) = \sum_i\sum_j c_ic_j\phi_i\phi_j,$$

logo

$$\langle\Phi\mathbf{c},\Phi\mathbf{c}\rangle_\omega = \sum_i\sum_{j=i}^{i} c_ic_j\int_{-1}^{1}\phi_i(x)\phi_j(x)\cdot[i=j]\,d\omega(x) = \sum_i c_i^2\langle\phi_i,\phi_i\rangle_\omega.$$

Lembrando os valores de $\langle\phi_i,\phi_j\rangle_\omega$ e escrevendo $\mu \equiv \left[x \mapsto x^2\right]$, vemos que $Q(\psi) = \left\langle [I+D^2]\mathbf{c}-\mu, [I+D^2]\mathbf{c}-\mu\right\rangle_\omega =$

$$= \left\langle [I+D^2]\mathbf{c}-\mu\ ;\ \begin{bmatrix} \pi & 0 & 0 & \vdots \\ 0 & \pi/2 & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \pi/2 & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots \end{bmatrix}\ ;\ [I+D^2]\mathbf{c}-\mu \right\rangle,$$

e desejamos minimizar essa tão bonita forma quadrática... sob as restrições de contorno.

Vale observar que essa forma quadrática é positiva definida e $[I+D^2]\mathbf{c}-\mu$ é uma função afim, donde Q é convexa e minimizá-la (sob restrições convexas) é uma tarefa relativamente fácil.

In [6]:
```
# Operador [identidade + segunda derivada] na base de Chebyshev:
id_plus_d2 = phi_matrix + d2_phi_matrix

# Forma Quadrática: M = diag(pi, pi/2, pi/2, ..., pi/2).
M = (np.pi/2) * np.ones(dim) ; M[0] = np.pi
M = cvx.diag(M)
```

1.7 Condições de Contorno

Desejamos satisfazer às condições

$$\begin{cases} A = \psi(-1) = \sum_k c_k\,\phi_k(-1); \\ B = \dot\psi(+1) = \sum_k c_k\,\phi_k'(+1). \end{cases}$$

e o cálculo de $\phi_k(-1)$ e $\phi_k'(1)$ nos fornece duas restrições de igualdade lineares:

$$\begin{bmatrix} \phi_0(-1) & \dots & \phi_n(-1) \\ \phi_0'(1) & \dots & \phi_n'(1) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}$$

In [7]:
```
u = [p(-1) for p in phi]      # dot(u, c) = A
v = [dp(1) for dp in d_phi]   # dot(v, c) = B
```

In [8]:
```
c = cvx.Variable(dim, name="c")

cost = cvx.quad_form(id_plus_d2 * c - x2_array, M)
```

```
        problem = cvx.Problem(cvx.Minimize(cost), constraints=[c.T @ u == A, c.T @ v == B])
        problem.solve()

        print("Problem value (optimal cost): {:.5e}".format(problem.value))
        result_array = c.value.A.flatten()
```

```
Problem value (optimal cost): 3.30188e-05
```

```
In [9]: print("http://web.stanford.edu/~boyd/papers/ecos.html")
        problem.solver_stats.__dict__
```

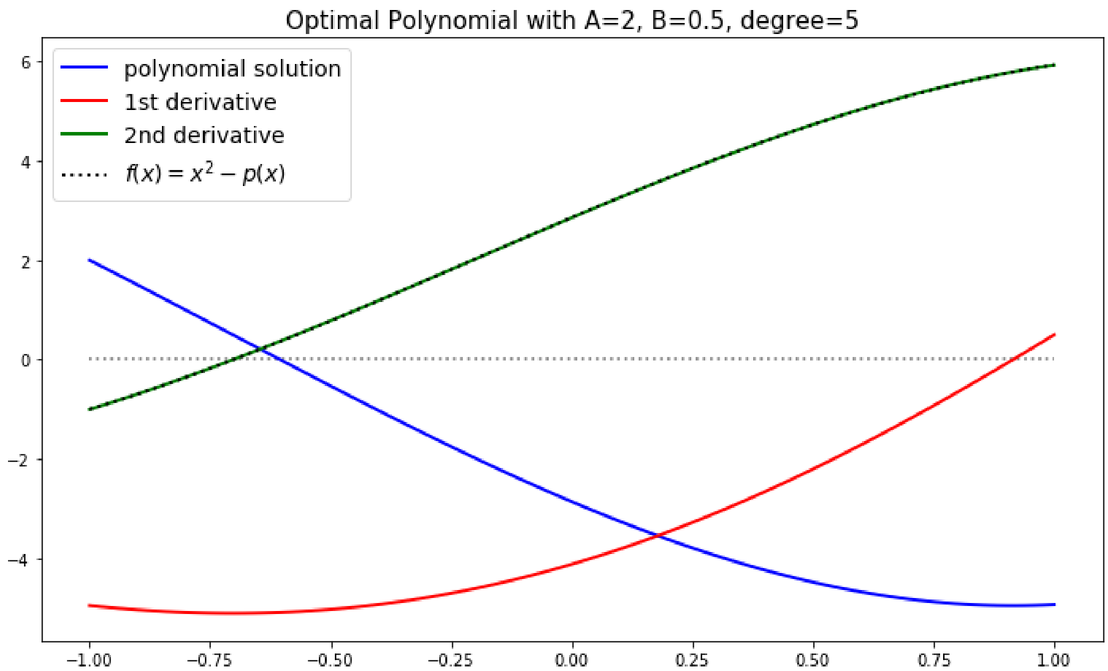
```
http://web.stanford.edu/~boyd/papers/ecos.html
```

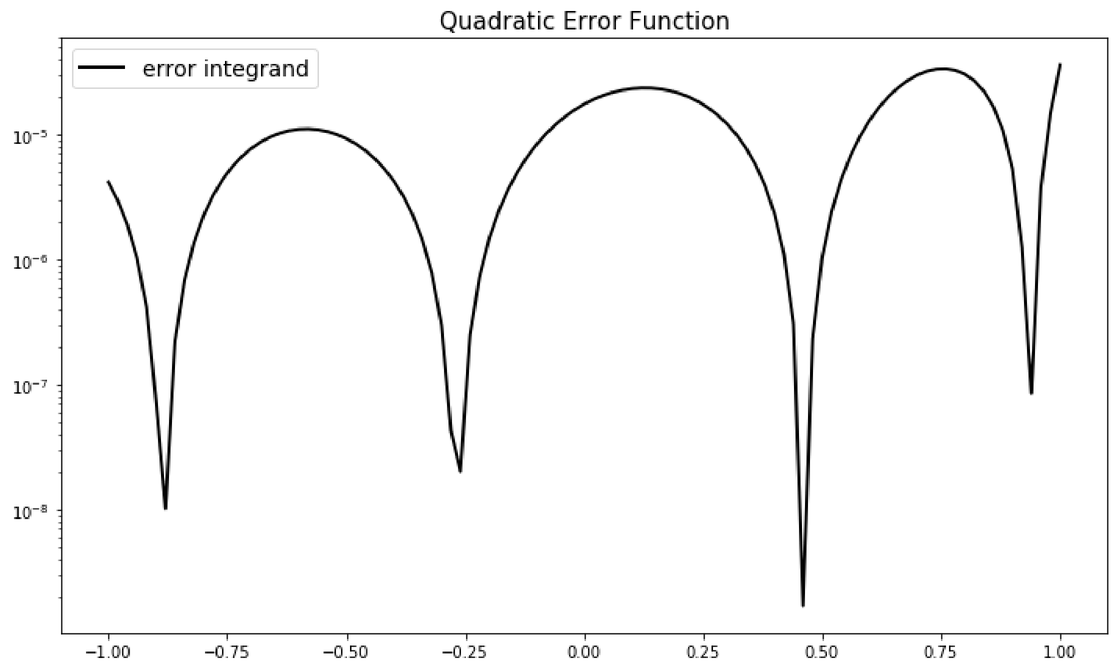
```
Out[9]: {'num_iters': 6,
         'setup_time': 3.635e-05,
         'solve_time': 7.4668e-05,
         'solver_name': 'ECOS'}
```

```
In [10]: def plot_polynomials(list_of_plot_params, title, show_x_axis=True, semilogy=False):
             #print(result_pol.convert(kind="???"))
             fig, ax = plt.subplots(figsize=(12,7))
             ax.set_title(title, fontsize=15)

             if show_x_axis:
                 ax.plot([-1, 1], [0, 0], ':', color=(0,0,0,.5), lw=1.7)

             for label,ss,pol in list_of_plot_params:
                 ax.plot(*pol.linspace(101), ss, lw=2, label=label)

             ax.legend(loc=0, framealpha=.75, fontsize=14)
             if semilogy:
                 ax.set_yscale("log")
             plt.show()

         res = np.dot(result_array, phi)
         d_res = res.deriv()
         d2_res = res.deriv(m=2)

         zz = [
           ("polynomial solution", 'b-', res),
           ("1st derivative",      'r-', d_res),
           ("2nd derivative",      'g-', d2_res),
           ("$f(x) = x^2 - p(x)$", 'k:', x2_pol - res),
         ]

         print("Erros nas condições de contorno:")
         print("  |p(-1) - A| = {:.3e}".format(abs(A - res(-1))))
```

```python
    print("  |p'(1) - B| = {:.3e}".format(abs(B - d_res(1))))

    plot_polynomials(zz, "Optimal Polynomial with A={}, B={}, degree={}".format(A,B,dim-1))
    plot_polynomials([("error integrand", 'k', (d2_res - (x2_pol - res))**2)], "Quadratic E
```

```
Erros nas condições de contorno:
  |p(-1) - A| = 1.679e-13
  |p'(1) - B| = 2.836e-12
```





2 Perguntas $\star$

- Qual a solução analítica do problema proposto?
- Por que escolher o intervalo $[-1, 1]$, e como tratar casos mais gerais, $[a, b]$?
- Como fazer com que a forma quadrática fique com a matriz identidade, transformando-a no quadrado da norma de $[I + D^2]\mathbf{c} - \mu$? Imagina uma interpretação geométrica?
- O que acontece se tentarmos usar um outro produto interno, como o mais usual:

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^{1} f(x)\, g(x)\, dx\,?$$

- Como generalizar a solução acima para modelos mais gerais? Daria pra fazer um método equivalente para dimensões maiores? E como você trataria um $\cos(x)$ no lugar de x^2?
- O que você achou mais interessante desse tipo de método? E mais complicado?