Controle do passo de tempo associados a métodos adaptativos no contexto wavelet

Flávia C. G. de Mendonça¹, Margarete O. Domingues¹, Elbert E. N. Macau¹

¹Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada, LAC – INPE 12227-010, São José dos Campos, SP – Brasil

{flavia.mendonca, margarete, elbert}@lac.inpe.br

Abstract. Spatial adaptive methods have been developed to solve partial differencial equations in the wavelet context. These methods are particularly of interest in models where only a small part of the domain presents fine structures. With the improvement of these spatial techniques, adaptatives methods in time are also of interest. The challenge of that combination allows a numerical evolution of the solution in an economic discrete mesh with the better step of time adjusted, keeping the dynamics of the model, with an improvement of the computational efficiency. This work computes the numerical solution in the Sparse Point Representation (SPR) using procedures of finite difference discretization combined with embedded Runge-Kutta schemes for time-step control of order two and four.

Resumo. Métodos adaptativos espacialmente vêm sendo desenvolvidos para resolução de equações diferenciais parciais (EDPs) no contexto wavelet. Esses métodos são particularmente de interesse em modelos onde apenas uma pequena parte do domínio possui estruturas finas. Com o aperfeiçoamento dessas técnicas espaciais, métodos adaptativos no tempo também são de interesse. O desafio dessa combinação, é permitir uma evolução numérica da solução em uma malha discreta econômica com o melhor passo de tempo ajustado a essa malha, mantendo a dinâmica do modelo, com uma melhora da eficiência computacional. Este trabalho calcula a solução numérica na representação esparsa de pontos (SPR) usando procedimentos de diferenças finitas para a discretização combinados com métodos de Runge-Kutta Embedded para o controle do passo de tempo de ordem 2 e 4.

1. Contexto wavelet para solução de EDPs

Em análise wavelet, funções são representadas por dois tipos de informação: informações da função no nível de escala mais refinado e as informações em multinível. Essas representações consistem das informações correspondentes ao nível menos refinado e das diferenças de informação entre um nível de escala e o seu consecutivo. As principais ferramentas são transformações relacionando esses dois tipos de informação. Nas aplicações deste trabalho considera-se a SPR [Holmstrom 1999, Domingues 2001, Pinho et al. 2007]. Essa representação possui um algoritmo de refinamento interpolador que, a partir das informações correspondentes a um certo nível, fornecem aproximações no nível seguinte mais refinado por interpolação. Os coeficientes wavelet são as diferenças de informação entre os valores exatos e os valores aproximados fornecidos por esse algoritmo, ou seja, erros de interpolação. Supondo que, em um determinado tempo, seja dada uma representação da solução em uma malha adaptativa, com a variação temporal da posição dessas estruturas, faz-se necessário que seja possível redefinir as malhas, dinâmica e automaticamente, durante as simulações numéricas e ajustar o passo de tempo da forma mais eficiente possível as novas malhas. Nesse contexto, é de interesse EDPs evolutivas cujas soluções possuem diferentes tipos de comportamento em diferentes regiões. Por exemplo, as soluções podem ser bem suaves na maior parte do domínio e podem apresentar singularidades e variações bruscas em pequenas áreas. A evolução temporal envolve três etapas. A malha é estendida, para prever possíveis aparecimentos de novas estruturas que requeiram um maior refinamento. As diferenças finitas são aplicadas em cada ponto da malha estendida e faz-se a evolução temporal. Efetua-se a análise wavelet seguida do truncamento, eliminando as regiões em que os coeficientes wavelet sejam insignificantes, para se obter uma representação da solução mais ajustada.

2. Adaptabilidade Temporal

Existem diversos procedimentos para introduzir um controle automático do passo de tempo. Por volta de 1960, Fehlberg propôs os métodos de Runge–Kutta Embedded (RKE). A idéia destes métodos é utilizar dois esquemas de Runge–Kutta de ordens diferentes, que utilizem as mesmas funções bases para os cálculos, de forma que as funções sejam avaliadas nos mesmos pontos. Assim, a diferença entre as aproximações produz uma estimativa do erro local, que é então utilizada como função de ajuste do passo [Hairer et al. 2000]. Quando um tamanho de passo inicial é escolhido ($h_{inicial}$), o erro de truncamento resulta da diferença entre as aproximações de ordem p e p-1, que será aqui denotada como $\Delta_{inicial}$. Desta forma, um novo passo h_{novo} produzirá um erro $\Delta_{desejado}$, $\frac{h_{novo}}{h_{inicial}} = \left|\frac{\Delta_{desejado}}{\Delta_{inicial}}\right|^{1/p}$, em que $\Delta_{desejado}$ denota a precisão desejada. E assim, o tamanho do passo pode ser aumentado ou diminuido. Neste trabalho os métodos utilizados para a adaptabilidade temporal são: Runge-Kutta Fehlberg (F23) e (F45), Bogacki-Shampine (BS23), Cash & Karp (CK45) e Dormand-Prince (DP45), dados em [Bogacki and Shampine 1989, Hairer et al. 2000] . A complexidade computacional \mathcal{C} é dada pela multiplicação do número de evolução das funções pelo número total de passos.

3. Resultados Numéricos

Para a análise do desempenho é utilizada a Equação de Burgers $\mathcal{U}_t + \mathcal{U}\mathcal{U}_x = \mu\mathcal{U}_{xx}$, em que U = U(x,t) para $t \geq 0$, $x \in [0,1]$ e $\mu = 10^{-4}$. As condições de fronteira e inicial adotadas são $\mathcal{U}(0,t) = \mathcal{U}(1,t) = 0$, e $\mathcal{U}(x,0) = sen(2\pi)$. As Figuras 1 e 2 apresentam no tempo t = 0.15 (de cima para baixo): a solução numérica e a posição dos coeficientes wavelet significativos na malha adaptativa. Nas Figuras 3 e 4 as variações do passo de tempo são plotadas durante a evolução temporal. O método RK2 realiza 308 passos até o tempo t = 0.15, com $\mathcal{C} = 924$. Enquanto, o método RK4 realiza 119 passos, com $\mathcal{C} = 833$. Nos métodos de ordem 2(3), o número de passos ruins é reduzido diminuindo os valores de S e α para 0.85 e -0.1, neste caso, o número de passos bons realizados por F23 aumentam significativamente. O custo computacional dos métodos RKE, é menor que o apresentado por RK2 apenas no método BS23, devido ao grande número de passos realizados por F23. Para os métodos de ordem 4(5), a inexistência de passos ruins acontece em todos os métodos quando S assume os valores 0.85 ou 0.95, e α é -0.1. Estes apresentam um menor custo em relação a RK4, com exceção do DP45.

4. Comentários Finais

Com a SPR é possível representar soluções de EDPs evolutivas de maneira mais econômica e automática. Neste trabalho de dissertação de mestrado, pretende—se introduzir uma nova técnica de controle, a partir da análise do comportamento do passo temporal, para uma tomada de decisão de quando os métodos RKE ou RK deverão ser utilizados durante a evolução temporal, de forma a otimizar os custos computacionais.

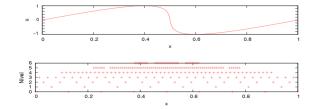


Figura 1. (a) Método F23

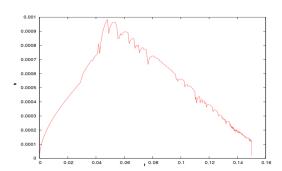


Figura 3. (c) Evolução do passo de tempo - F23

Método	Passos		\overline{S}	α	\mathcal{C}
	Bons	Ruins			
BS23	37	09	0.9	-0.2	230
F23	396	02	0.9	-0.2	1990
BS23	66	0	0.85	-0.1	330
F23	678	01	0.85	-0.1	3395
BS23	39	10	0.95	-0.1	245
F23	398	02	0.95	-0.1	2000

Tabela 1. (a) Desempenho dos métodos RK 2(3)

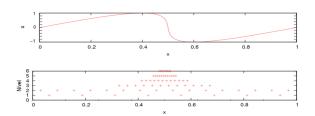


Figura 2. (b) Método F45

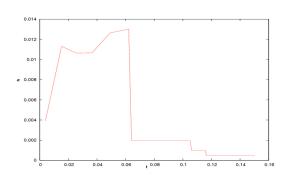


Figura 4. (d) Evolução do passo de tempo - F45

Método	Passos		S	α	\mathcal{C}
	Bons	Ruins			
CK45	102	1	0.9	-0.2	721
DP45	105	0	0.9	-0.2	840
F45	108	1	0.9	-0.2	654
CK45	109	0	0.85	-0.1	763
DP45	107	0	0.85	-0.1	856
F45	110	0	0.85	-0.1	660
CK45	108	0	0.95	-0.1	756
DP45	112	0	0.95	-0.1	896
F45	108	0	0.95	-0.1	648

Tabela 2. (b) Desempenho dos métodos RK 4(5)

AGRADECIMENTOS: A FAPESP proc.: 2005/03615-0 pela bolsa de mestrado.

Referências

Bogacki, P. and Shampine, L. F. (1989). A 3(2) pair of runge-kutta formulas. Appl. Math. Lett., 2:321–325.

Domingues, M. O. (2001). Análise Wavelet na Simulação Numérica de Equações Diferenciais Parciais com Adaptabilidade Espacial. PhD thesis, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP).

Hairer, E., Norsett, S. P., and Wanner, G. (2000). Solving ordinary differential equations I. Nonstiff problems, volume 8 of Computational Mathematics. Springer, Berlin, 2nd edition.

Holmstrom, M. (1999). Solving hyperbolic pdes using interpolating wavelets. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 21(2):405–420.

Pinho, P., Domingues, M. O., Ferreira, P. J. S. G., Gomes, S. M., Gomide, A., and Pereira, J. R. (2007). Interpolating wavelets and adaptive finite difference schemes for solving maxwell's equations: Gridding effects. *IEEE Transactions on Magnetics*, 43:1–10.