Universidade Federal do Ceará
Departamento de Computação

Revisão e Introdução a EDO Rígidas

Métodos Numéricos II

Ricardo Bustamante de Queiroz

Universidade Federal do Ceará

13 de junho de 2017

Apresentação

- Ricardo Bustamante de Queiroz
- Doutorado CRAb - UFC
- ricardobqueiroz+mn2@gmail.com
- http://www.busta.com.br/mn2/

- Página do Face (informativos, noticias etc)
  - https://www.facebook.com/groups/computacaoufc/
- Chat do Telegram (conversas casuais)
  - https://t.me/joinchat/AAAAAEOSM3hT241gbi92RA

Agenda

Agenda

- Observações Aula Anterior

Recapitulando

Recapitulando

Slides anteriores atualizados.

- Aula 3
  - Adicionados *tableau* mnemônicos dos métodos
  - Corrigidos valores dos coeficientes
- Aula 4
  - Corrigida informação sobre métodos preditores-corretores
  - Colocados Métodos de Adams-Moulton

OBS: Slides das aulas anteriores foram atualizados

Aula 3: Métodos de Runge-Kutta

É possivel organizar esses coeficientes em uma tabela, onde a matriz $[q_{ij}]$ é conhecida como a *Matriz Runge-Kutta*.

$$
\begin{array}{c|cccccc}
0 & & & & & \\
p_1 & q_1^1 & & & & \\
p_2 & q_2^1 & q_2^2 & & & \\
\vdots & \vdots & & \ddots & & \\
p_{o-1} & q_{o-1}^1 & q_{o-1}^2 & \cdots & q_{o-1}^{o-1} & \\
\hline
 & a_1 & a_2 & \cdots & a_{o-1} & a_o
\end{array}
$$

Tabela: Uma forma de memorizar os métodos é através de um diagrama, conhecido como *Butcher tableau* (em homenagem a *John C. Butcher*)

Métodos de Runge-Kutta de Quarta Ordem (RK4)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)$$

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_n, y_n), \\
k_2 &= f(t_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{h}{2}k_1), \\
k_3 &= f(t_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{h}{2}k_2), \\
k_4 &= f(t_n + h, y_n + hk_3).
\end{aligned}$$

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
1/2 & 1/2 & & & \\
1/2 & 0 & 1/2 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6
\end{array}$$

Tabela: Método RK4 em forma de *tableau*

Método RK4

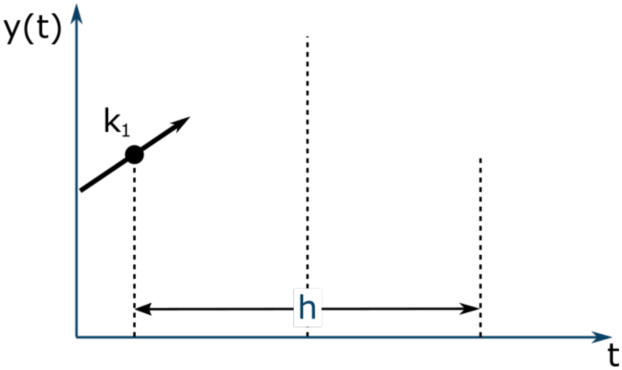


Figura: Gráfico ilustrando o método RK4. Informação inicial. Ponto k_1, que corresponde à curvatura de u em t

Método RK4

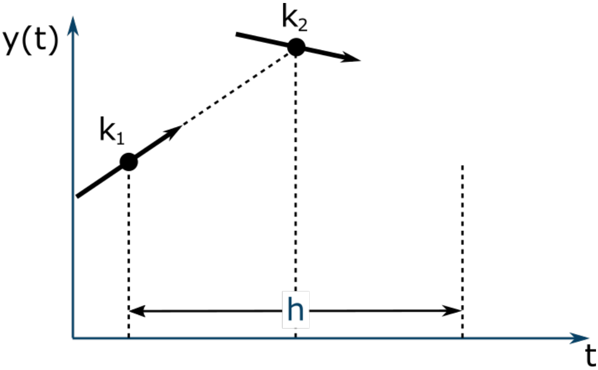


Figura: Gráfico ilustrando o método RK4. Segundo cálculo, encontrar k_2 usando a informação de k_1.

Método RK4

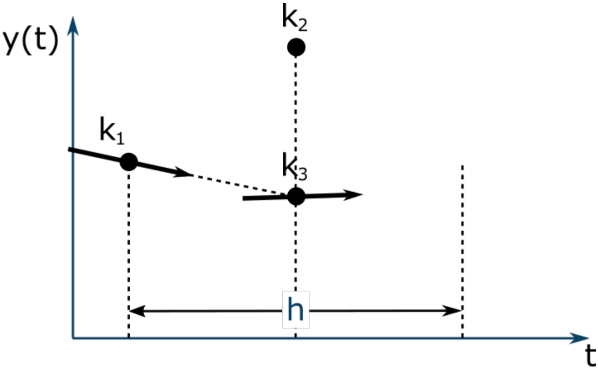


Figura: Gráfico ilustrando o método RK4. Segundo cálculo, encontrar k_3 usando a informação de k_2.

Método RK4

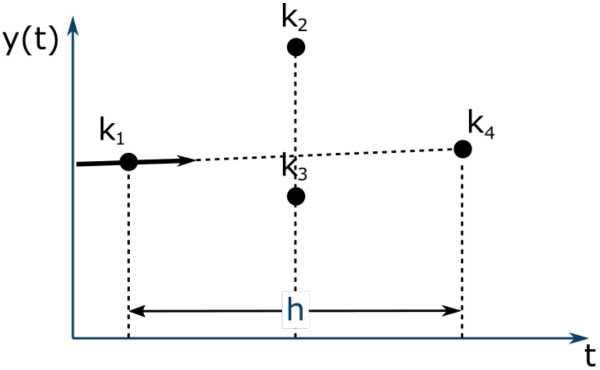


Figura: Gráfico ilustrando o método RK4. Segundo cálculo, encontrar k_4 usando a informação de k_3.

Aula 3: Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem 3/8

Alternativa - Método de Quarta Ordem 3/8 (Apostila)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{8}\left(\bar{k}_1 + 3\bar{k}_2 + 3\bar{k}_3 + \bar{k}_4\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{8}[f(t_n, y_n) + 3f(t_{n+\frac{1}{3}}, \bar{y}_{n+\frac{1}{3}}) + \\ +3f(t_{n+\frac{2}{3}}, \bar{y}_{n+\frac{2}{3}}) + f(t_{n+1}, \bar{y}_{n+1})]$$

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ 1/3 & 1/3 & & & \\ 2/3 & 1/3 & 1/3 & & \\ 1 & 1 & -1 & 1 & \\ \hline & 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8 \end{array}$$

Tabela: Método RK 3/8 em forma de *tableau*

Métodos Preditores-Corretores (Multistep)

Métodos Preditores-Corretores

Introdução

- Classificação de métodos quanto ao número de passos
  - **Métodos de passo simples**: dado t_n, calcula t_{n+1} em um único passo. *Ex: Euler.*
  - **Métodos de meio passo (Half-step)**: calcula valores intermediários *(e.g.* $t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{2}{3}}$*)* para determinar t_{n+1} e depois joga os valores fora. *Ex: Runge-Kutta.*
  - **Métodos de multiplos passos (Multistep)**: utilizam valores anteriores de t_i com $i \leq n$ para determinar t_{n+1}. *Ex: Métodos de Adams.*

Métodos Preditores-Corretores

Métodos preditores-corretores levam em conta que ao longo da computação dos valores, informação importante é determinada em passos anteriores, que podem ajudar na aproximação do próximo valor.

Preditor é a parte da equação que calcula um valor $\bar{y}$ em um tempo t_n. O valor de $\bar{y}$ é uma estimativa grosseira de um valor y.

Corretor é a parte da equação que usa um ou mais valores de $\bar{y}$ para t_i com $i \leq n$ para determinar o valor de y em t_n.

Métodos preditores-corretores

Métodos multi-passos lineares são métodos *multistep* que utilizam interpolações lineares dos pontos aproximados $\bar{y}$ para determinar o ponto y em t_n.

Uma fórmula geral para esses métodos seria da forma:

$$\begin{gathered} y_{n+s} + a_{s-1} \cdot y_{n+s-1} + a_{s-2} \cdot y_{n+s-2} + \cdots + a_0 \cdot y_n \\ = h \cdot [b_s \cdot f(t_{n+s}, y_{n+s}) + b_{s-1} \cdot f(t_{n+s-1}, y_{n+s-1}) \\ + \cdots + b_0 \cdot f(t_n, y_n)]. \end{gathered}$$

Onde a's e b's são coeficientes que determinam o método. Se $b_s = 0$, o método é dito *explícito*, caso contrário ele é chamado *implícito.*

Exemplos de métodos multistep lineares: Adams-Bashford e Adams-Moulton.

Métodos de Adams

Métodos de Adams

Os **Métodos de Adams**, também chamados de *Adams-Moulton*, pois foram desenvolvidos por *John Couch Adams*, mas *Forest Ray Moulton* percebeu que, combinado com os métodos de *Adams-Bashford*, formam um par *preditor-corretor*.

Considerando a função f como um polinômio p:

$$p(t_{n+i}) = f(t_{n+i}, y_{n+i}), \qquad \text{para } i = 0, \ldots, s-1.$$

Temos a fórmula de *Interpolação de Lagrange* que considera os últimos s elementos.

$$p(t) = \sum_{j=0}^{s-1} \frac{(-1)^{s-j-1} f(t_{n+j}, y_{n+j})}{j!(s-j-1)!h^{s-1}} \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{s-1} (t - t_{n+i}).$$

Métodos de Adams

Sabendo que podemos calcular um y_{n+s} sabendo o valor de s corresponde ao número de pontos anteriormente conhecidos, temos a aproximação, dada por:

$$y_{n+s} = y_{n+s-1} + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} p(t)\, dt.$$

Ou seja, a curvatura entre t_{n+s-1} e t_{n+s} é determinada pela interpolação dos pontos anteriores.

Métodos de Adams

Substituindo p pelo polinômio interpolado com $0 \leq j < s$, obtemos a seguinte fórmula:

$$b_{s-j-1} = \frac{(-1)^j}{j!(s-j-1)!} \int_0^1 \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{s-1} (u+i)\, du, \qquad \text{para } j = 0, \ldots, s-1.$$

Onde b são os coeficientes da fórmula geral do método de **Adams-Bashford**. O método é dito de ordem s dependendo do valor utilizado para o cálculo da fórmula.
Os valores de a_i são $a_{s-1} = -1$ e $a_{s-2}, \ldots, a_0 = 0$.

Métodos de Adams

Método de Adams-Bashford

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n), \qquad \text{(É o próprio Método de Euler)}$$

$$y_{n+2} = y_{n+1} + h\left(\tfrac{3}{2} f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \tfrac{1}{2} f(t_n, y_n)\right),$$

$$y_{n+3} = y_{n+2} + h\left(\tfrac{23}{12} f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \tfrac{4}{3} f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \tfrac{5}{12} f(t_n, y_n)\right),$$

$$y_{n+4} = y_{n+3} + h\left(\tfrac{55}{24} f(t_{n+3}, y_{n+3}) - \tfrac{59}{24} f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \tfrac{37}{24} f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \tfrac{3}{8} f(t_n, y_n)\right),$$

$$y_{n+5} = y_{n+4} + h\left(\tfrac{1901}{720} f(t_{n+4}, y_{n+4}) - \tfrac{1387}{360} f(t_{n+3}, y_{n+3}) + \tfrac{109}{30} f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \tfrac{637}{360} f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \tfrac{251}{720} f(t_n, y_n)\right).$$

Métodos de Adams

Método de Adams-Moulton

Semelhante ao Adams-Bashford, mas considera o elemento no tempo t_n, além dos elementos em $t_{-1}, \ldots, t_{n-s}$:

$$b_{s-j} = \frac{(-1)^j}{j!(s-j)!} \int_0^1 \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{s} (u + i - 1)\, du, \qquad \text{for } j = 0, \ldots, s.$$

Os valores de a_i também são $a_{s-1} = -1$ e $a_{s-2}, \ldots, a_0 = 0$.

O b só muda pois $b_s = 0$ não é mais uma restrição.

Métodos de Adams

Método de Adams-Moulton

$$
\begin{aligned}
y_n = y_{n-1} \quad & + hf(t_n, y_n), \text{(Método Backward-Euler)} \\
y_{n+1} = y_n \quad & + \tfrac{1}{2}h\left(f(t_{n+1}, y_{n+1}) + f(t_n, y_n)\right), \text{(Regra do trapézio)} \\
y_{n+2} = y_{n+1} \quad & + h\left(\tfrac{5}{12}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \tfrac{2}{3}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \tfrac{1}{12}f(t_n, y_n)\right), \\
y_{n+3} = y_{n+2} \quad & + h\left(\tfrac{3}{8}f(t_{n+3}, y_{n+3}) + \tfrac{19}{24}f(t_{n+2}, y_{n+2}) \right. \\
& \left. - \tfrac{5}{24}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \tfrac{1}{24}f(t_n, y_n)\right), \\
y_{n+4} = y_{n+3} \quad & + h\left(\tfrac{251}{720}f(t_{n+4}, y_{n+4}) + \tfrac{646}{720}f(t_{n+3}, y_{n+3}) \right. \\
& \left. - \tfrac{264}{720}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \tfrac{106}{720}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \tfrac{19}{720}f(t_n, y_n)\right).
\end{aligned}
$$

Métodos de Adams

Exemplo de passo a passo na aplicação do método, usando método preditor-corretor de 3^a ordem:

1. Obtém $y(t_0)$ pelo valor inicial
2. Utiliza-se forward euler para encontrar $\bar{y}(t_1)$,
3. Utiliza-se backward euler para encontrar $y(t_1)$,
4. Utiliza-se Adams-Bashford de 2a ordem $\Rightarrow \bar{y}(t_2)$,
5. Utiliza-se Adams-Moulton de 2a ordem $\Rightarrow y(t_2)$,
6. Utiliza-se Adams-Bashford de 3a ordem $\Rightarrow \bar{y}(t_3)$,
7. Utiliza-se Adams-Moulton de 3a ordem $\Rightarrow y(t_3)$,
8. Utiliza-se Adams-Bashford de 3a ordem $\Rightarrow \bar{y}(t_4)$,
9. Utiliza-se Adams-Moulton de 3a ordem $\Rightarrow y(t_4)$,
10. etc

Exercício de Revisão

Exemplo 6.20

Resolva o problema

$$\begin{cases} \dfrac{d^2x}{dt^2} + t^2\,\dfrac{dx}{dt} + 3\,x = t \\ x\,(0) = 1 \\ \dfrac{dx}{dt}\,(0) = 2 \end{cases}$$

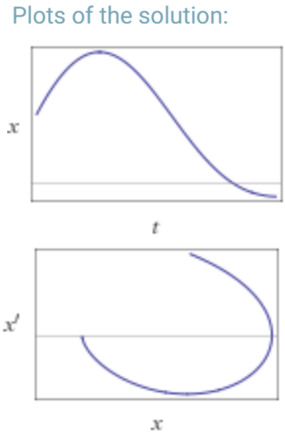
Use $h = 0.1\ s$

1. *Forward Euler:* $u_{n+1} = u_n + h\,f\,(u_n,\ t_n)$
2. *Backward Euler:* $u_{n+1} = u_n + h\,f\,(u_{n+1},\ t_{n+1})$
3. *Método de Euler modificado:*
$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}\,[f\,(u_{n+1},\ t_{n+1}) + f\,(u_n,\ t_n)]$$
4. *Runge-Kutta de terceira ordem:*
$$\begin{cases} k_1 = h\,f\,(u_n,\ t_n) \\ k_2 = h\,f\,(u_n + \frac{1}{2}\,k_1, t_n + \frac{h}{2}) \\ k_3 = h\,f\,(u_n - k_1 - 2\,k_2,\ t_n + h) \\ u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6}\,(k_1 + 4\,k_2 + k_3) \end{cases}$$
5. *Preditor-corretor de Adams de terceira ordem*
$$\begin{aligned} \bar{u}_{n+1} &= u_n + \frac{h}{12}\,(23\,u'_n - 16\,u'_{n-1} + 5\,u'_{n-2}) \\ \bar{u}'_{n+1} &= f\,(\bar{u}_{n+1},\ t_{n+1}) \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{h}{12}\,(5\,\bar{u}'_{n+1} + 8\,u'_n - u'_{n-1}) \end{aligned}$$

Resultado Exercício de Revisão

Calculado no Wolfram Alpha (link)

$$
\begin{aligned}
x(0.0) &= 1 \\
x(0.1) &= 1.18419 \\
x(0.2) &= 1.33376 \\
x(0.3) &= 1.44489 \\
x(0.4) &= 1.51499 \\
x(0.5) &= 1.54300 \\
x(1.0) &= 1.14742
\end{aligned}
$$



Equações Diferenciais Ordinárias Rígidas (Introdução)

EDO Rígidas

Entre a apostila, a wikipedia e o livro de matlab, encontrei definições que variam um pouco.

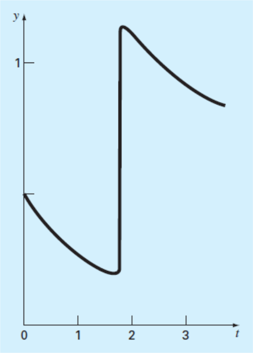
Apostila: Definição: Equações Diferenciais Ordinárias são ditas rígidas quando a solução é uma função suave, mas requer um Δt muito pequeno no método numérico para manter estabilidade.

Livro de Matlab: Uma EDO é dita *rígida* quando, apesar de suave, para um determinado Δt ela muda abruptamente de valor. Isso faz com que um Δt muito pequeno seja empregado para manter a estabilidade de métodos como *Euler* e *Runge-Kutta*.

Wikipedia: Uma equação diferencial é dita rígida *(stiff)* quando alguns métodos para solucionar as equações se tornam numericamente instáveis, a menos que o passo seja muito pequeno. É difícil definir com precisão o que é rigidez, mas a ideia principal é que a equação inclui termos que levam a uma rápida variação na solução.

Equações Diferenciais Ordinárias Rígidas

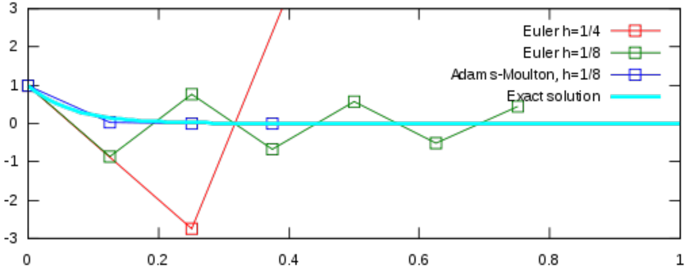
Aguardem melhorias nos slides em breve.



Equação rígida segundo o livro de matlab. A função é suave, mas muda de valor abruptamente.

Equações Diferenciais Ordinárias Rígidas

Aguardem melhorias nos slides em breve.



Equação rígida segundo a wikipédia. O método se torna muito instável para um Δt grande. (exercício da aula 2)

Equações Diferenciais Ordinárias Rígidas

Além da apostila, recomendo a leitura deste artigo:
https://en.wikipedia.org/wiki/Stiff_equation