Aula 13
Métodos de Runge-Kutta.

MS211 - Cálculo Numérico

Marcos Eduardo Valle

Departamento de Matemática Aplicada
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Universidade Estadual de Campinas

Introdução

Na aula anterior, apresentamos os métodos de série de Taylor para um problema de valor inicial (PVI)

$$\begin{cases} y' = f(x, y), \\ y(x_0) = y_0. \end{cases}$$

Em particular, o método de Euler, que é um método de série de Taylor de ordem 1, define:

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k).$$

Similarmente, um método de série de Taylor de ordem 2 define:

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k) + \frac{h^2}{2}\big(f_x(x_k, y_k) + f_y(x_k, y_k)f(x_k, y_k)\big).$$

Aqui, y_k é uma aproximação para $y(x_k)$, com $x_k = x_0 + kh$.

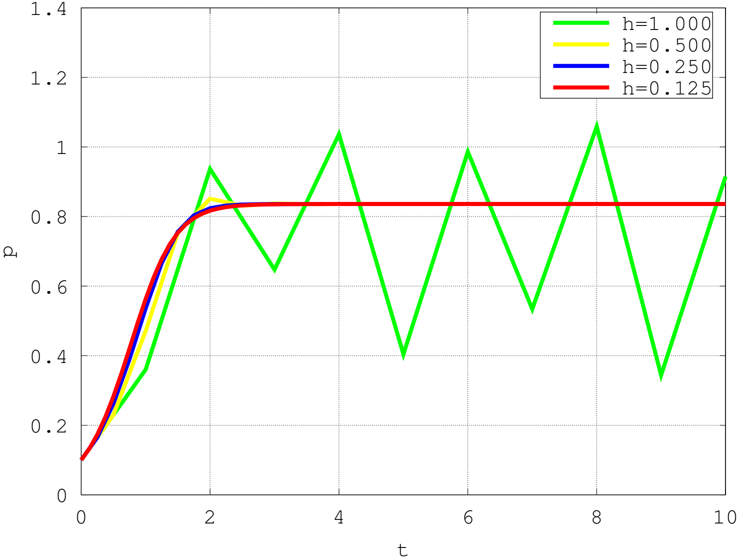
Exemplo 1

Suponha que a densidade populacional p de lagartas seja descrita pelo PVI

$$\begin{cases} \dfrac{dp}{dt} = 2p\,(1-p) - \dfrac{p^2}{1+p^2}, \\ p(0) = 0.1, \end{cases}$$

Vamos usar um método numérico para estimar p para $0 \leq t \leq 10$.

Usando o método de Euler com diferentes valores de *h*, encontramos:



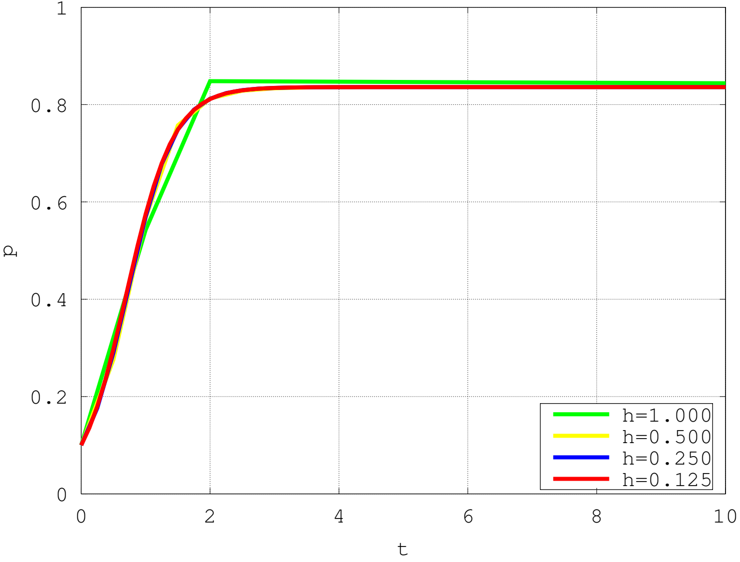
Aproximações para $p(10)$:

h	1.000	0.500	0.250	0.125
$y(10)$	0.34391	0.83597	0.83597	0.83597

Comentários:

- Encontramos um erro significativo (instabilidade) para $h = 1.0$.
- Comparando o gráfico, resultados semelhantes foram obtidos considerando $h = 0.250$ e $h = 0.125$. Portanto, podemos acreditar que encontramos um bom resultado com $h = 0.25$! Contudo, precisamos fazer 40 iterações do método!

Usando o método de série de Taylor de ordem 2 com diferentes valores de h, encontramos:



Aproximações para $p(10)$:

h	1.000	0.500	0.250	0.125
$y(10)$	0.84436	0.83597	0.83597	0.83597

Comentários:

- Diferente do método de Euler, o método de ordem 2 não apresentou instabilidades para $h = 1.0$.
- Resultados semelhantes foram obtidos considerando $h = 0.5$ e $h = 0.25$.
  Portanto, podemos acreditar que encontramos um resultado satisfatório com $h = 0.5$! Nesse caso, efetuamos 20 iterações do método!

Conclusão do Exemplo:
Comparando os métodos de ordem 1 (Euler) e ordem 2, iremos preferir o método de ordem 2.

Porém, para aplicar um método de série de Taylor de ordem 2, precisamos conhecer as derivadas parciais de f.

Os métodos de Runge-Kutta são superior, mas não requerem as derivadas parciais de f!

Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são métodos de passo simples, ou seja, y_{k+1} é determinado usando apenas de x_k e y_k.

Um método de Runge-Kutta de ordem p não requer o cálculo de qualquer derivada de f, mas avalia uma outra função ϕ.

Especificamente, os métodos de Runge-Kutta são definidos da seguinte forma:

$$y_{k+1} = y_k + \phi(x_k, y_k), \forall k = 0, 1, \ldots,$$

em que ϕ é uma função de x e y que depende indiretamente de f e do tamanho do passo h.

O método de Euler, obtido considerando $\phi = f$, é um método de Runge-Kutta de ordem $p = 1$.

Método de Heun

O **método de Heun**, também conhecido por **método de Euler modificado**, é um método de Runge-Kutta de ordem 2.

No método de Heun, definimos

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(k_1 + k_2), \quad \forall k = 0, 1, \dots,$$

em que

$$k_1 = f(x_k, y_k) \quad \text{e} \quad k_2 = f(x_k + h, y_k + hk_1).$$

ou, equivalentemente,

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\Big[f(x_k, y_k) + f(x_k + h, y_k + hf(x_k, y_k)\Big], \quad \forall k = 0, 1, \dots,$$

Observe que esse é um método de Runge-Kutta com

$$\phi(x, y) = \frac{1}{2}\left(f(x, y) + f\big(x + h, y + hf(x, y)\big)\right).$$

Método de Runge-Kutta de Ordem 4

De modo semelhante, o método de Runge-Kutta de ordens 4 é dado por:

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

em que

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_k, y_k), \\
k_2 &= f(x_k + h/2, y_k + hk_1/2), \\
k_3 &= f(x_k + h/2, y_k + hk_2/2), \\
k_4 &= f(x_k + h, y_k + hk_3).
\end{aligned}$$

Exemplo 2

Considere o PVI

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

Use o método da Heun e o método de Runge-Kutta de ordem 4 para estimar $y(0.04)$ com $h = 0.04$. Compare com a solução analítica $y(0.04) = e^{0.04}$.

Exemplo 2

Considere o PVI

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

Use o método da Heun e o método de Runge-Kutta de ordem 4 para estimar $y(0.04)$ com $h = 0.04$. Compare com a solução analítica $y(0.04) = e^{0.04}$.

Resposta: Pelo método de Heun, teremos

$$y_1 = y_0 \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right) = 1.0408.$$

Observe que essa é exa mesma solução encontrada pelo método de série de Taylor de ordem 2 na aula anterior.
O erro obtido é

$$|e^{0.04} - y_1| = 1.0774 \times 10^{-5}.$$

No método de Runge-Kutta de ordem 4 temos

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(x_0, y_0) = y_0, \\
k_2 &= f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + k_1 \frac{h}{2}\right) = y_0 \left(1 + \frac{h}{2}\right), \\
k_3 &= f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_k + k_2 \frac{h}{2}\right) = y_0 \left(1 + \frac{h}{2} + \frac{h^2}{4}\right), \\
k_4 &= f(x_0 + h, y_0 + k_3 h) = y_0 \left(1 + h + \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{4}\right).
\end{aligned}
$$

Logo,

$$
\begin{aligned}
y_1 &= y_0 + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
&= y_0 \left(1 + h + \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{6} + \frac{h^4}{24}\right) = 1.04081077333333.
\end{aligned}
$$

O erro obtido é

$$
|e^{0.04} - y_1| = 8.5906 \times 10^{-10}.
$$

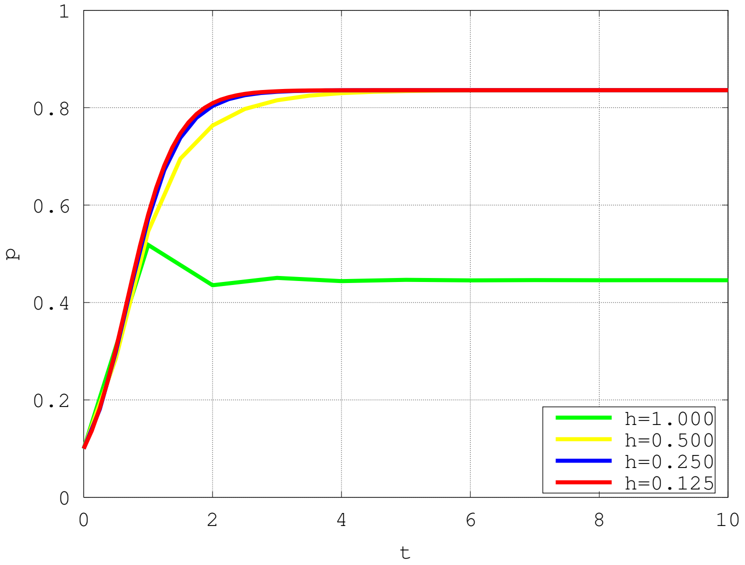
Exemplo 3

Suponha que a densidade populacional p de lagartas seja descrita pelo PVI

$$\begin{cases} \dfrac{dp}{dt} = 2p\,(1-p) - \dfrac{p^2}{1+p^2}, \\ p(0) = 0.1, \end{cases}$$

Use o método de Heun e o método de Runge-Kutta de ordem 4 para estimar p para $0 \leq t \leq 10$.

Usando o método de Heun com diferentes valores de h, encontramos:



Aproximações para $p(10)$:

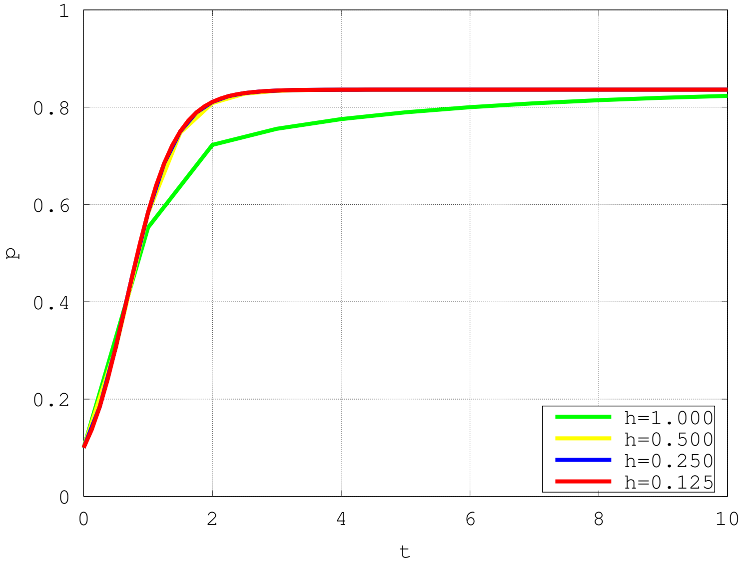
h	1.000	0.500	0.250	0.125
$y(10)$	0.44582	0.83597	0.83597	0.83597

Comentários:

- Encontramos um erro significativo para $h = 1.0$.
- Comparando o gráfico, resultados semelhantes foram obtidos considerando $h = 0.250$ e $h = 0.125$. Portanto, podemos acreditar que encontramos um bom resultado com $h = 0.25$! Contudo, precisamos fazer 40 iterações do método!

Apesar dessas observações, podemos mostrar que o método de Euler modificado é também um método de ordem 2!

O método de Runge-Kutta fornece



Aproximações para $p(10)$:

h	1.000	0.500	0.250	0.125
$y(10)$	0.81923	0.83597	0.83597	0.83597

Comentários:

- Encontramos um erro para $h = 1.0$.
- Comparando o gráfico, resultados semelhantes foram obtidos considerando $h = 0.50$ e $h = 0.25$.
  Portanto, podemos acreditar que encontramos um bom resultado com $h = 0.50$! Nesse caso, efetuamos 20 iterações do método!

Ordem do método de Heun

Vamos mostrar que o método de Heun é de ordem 2.

Com efeito, vamos considerar um caso mais geral em que ϕ é dada por

$$\phi(x, y) = af(x, y) + bf\big(x + ch, y + chf(x, y)\big). \qquad (1)$$

No método de Heun, temos

$$a = \frac{1}{2}, \quad b = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad c = 1.$$

Vamos encontrar a, b e c que maximizam a ordem do método de Runge-Kutta com ϕ dada por (1).

Em outras palavras, demos encontrar o maior valor p tal que

$$|y(x_k + h) - y_{k+1}| \leq C(h^{p+1}),$$

para algum $C > 0$, supondo que $y_k = y(x_k)$.

Primeiro, expandindo $y(x_k + h)$ em série de Taylor em torno de x_k, encontramos

$$y(x_k + h) = y(x_k) + y'(x_k)h + y''(x_k)\frac{h^2}{2} + y''(\xi)\frac{h^3}{6},$$

para algum ξ entre x_k e $x_k + h$.

Lembrando que $y(x_k) = y_k$ e $y' = f(x, y)$, temos

$$\begin{aligned} y'(x_k) &= f(x_k, y_k) = f, \\ y''(x_k) &= f_x(x_k, y_k) + f_y(x_k, y_k)f_x(x_k, y_k) = f_x + f_y f, \end{aligned}$$

Assim, temos

$$y(x_k + h) = y_k + fh + (f_x + f_y f)\frac{h^2}{2} + C_1 h^3,$$

em que $C_1 = y''(\xi)/6$.

Sabemos também que

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k) = y_k + h\big(af + bf(x_k + ch, y_k + chf)\big),$$

em que f, sem os argumentos, denota $f(x_k, y_k)$.

Supondo que f é diferenciável, podemos escrever

$$f(x_k+ch, y_k+chf) = f(x_k, y_k)+f_x(x_k, y_k)ch+f_y(x_k, y_k)(chf)+C_2h^2,$$

em que C_2 depende das derivadas parciais de ordem 2 de f.

Denotando $f_x = f_x(x_k, y_k)$ e $f_y = f_y(x_k, y_k)$, encontramos

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + h\big(af + bf(x_k + ch, y_k + chf)\big) \\ &= y_k + afh + b\big(f + f_x ch + f_y fch + C_2h^2\big) \\ &= y_k + (a+b)fh + bc(f_x + f_y f)h^2 + bC_2h^3 \end{aligned}$$

Combinando os resultados, concluímos que o erro local é

$$
\begin{aligned}
&|y(x_k + h) - y_{k+1}| \\
&= |(y_k + fh + (f_x + f_y f)\frac{h^2}{2} + C_1 h^3) \\
&\qquad - (y_k + (a+b)fh + bc(f_x + f_y f)h^2 + bC_2 h^3)| \\
&= |(1 - a - b)fh + \left(\frac{1}{2} - bc\right)(f_x + f_y f)h^2 + (C_1 - bC_2)h^3|
\end{aligned}
$$

Portanto, se

$$a + b = 1 \quad \text{e} \quad 2bc = 1,$$

então teremos

$$|y(x_k + h) - y_{k+1}| \leq Ch^3,$$

para algum $C \geq |C_1 - bC_2|$.

Lembre-se que no método de Heun, temos

$$a = \frac{1}{2}, \quad b = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad c = 1,$$

que satisfazem as condições

$$a + b = 1 \quad \text{e} \quad 2bc = 1.$$

Logo, esse é um método de Runge e Kutta de ordem 2.

Argumentos semelhantes podem ser usados para mostrar que o método de Runge-Kutta de ordem 4 satisfaz

$$|y(x_k + h) - y_{k+1}| \leq Ch^5,$$

para algum $C > 0$ (supondo que $y_k = y(x_k)$).

Considerações Finais

Na aula de hoje apresentamos os métodos de Runge-Kutta.

Especificamente, apresentamos o método de Heun e um método de Runge-Kutta de ordem 4.

Diferente dos métodos de série de Taylor, os métodos de Runge-Kutta não requerem nenhuma derivada de f.

Porém, utilizam uma função auxiliar ϕ que é obtida avaliando f em diferentes pontos.