Métodos Computacionais para Equações Diferenciais

Aula 6

Prof.ª Dr.ª Analice Costacurta Brandi

Optativa - Tópicos de Matemática Aplicada
Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"

Sumário

Método de Runge-Kutta

- Pode ser entendido como um aperfeiçoamento do método de Euler, com uma melhor estimativa da derivada da função.
- No método de Euler a estimativa do valor de y_{n+1} é realizado com o valor de y_n e com a derivada no ponto x_n.
- No método de Runge-Kutta busca-se uma melhor estimativa da derivada com a avaliação da função em mais pontos no intervalo $[x_n, x_{n+1}]$.
- Um método de Runge-Kutta de ordem n apresenta um erro da ordem de $0(h^{n+1})$.
- O método de Runge-Kutta de 4^a ordem é o mais usado na solução numérica de problemas com EDO.

Método de Runge-Kutta de Ordem 1 e Ordem 2

Método de Runge-Kutta de Ordem 1

O método de Runge-Kutta mais simples é 1-estágio, ou seja, $R = 1$. Neste caso, não há parâmetros a determinar e o método é dado por

$$y_{n+1} = y_n + hk_1, \quad \text{com} \quad k_1 = f(x_n, y_n),$$

o que coincide com o **método de Euler**, isto é, o **método de Taylor de ordem 1**.

Método de Runge-Kutta de Ordem 2

O método de Runge-Kutta 2-estágios é dado por

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h(c_1 k_1 + c_2 k_2), \quad \text{com} \quad c_1 + c_2 = 1, \\ k_1 &= f(x_n, y_n), \\ k_2 &= f(x_n + ha_2, y_n + h(b_{21} k_1)), \quad a_2 = b_{21}. \end{aligned}$$

Para determinar os parâmetros c_1, c_2 e a_2 vamos comparar a expansão da função $\phi_R(x_n, y_n, h)$ em potências de h, com o método de Taylor de ordem 2. Ou seja,

$$y_n + h\underbrace{(c_1 k_1 + c_2 k_2)}_{(1)} = y_n + h\underbrace{(y'(x_n)) + \frac{h}{2} y''(x_n)}_{(2)}.$$

Para realizar esta comparação, vamos desenvolver k_2 por Taylor em torno do ponto (x_n, y_n) até ordem 2, então

$$k_2 = f(x_n, y_n) + (a_2 h)\frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n) + (b_{21} h)\frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n) f(x_n, y_n) + 0(h^2).$$

Substituindo k_1 e k_2 em (1), temos

$$c_1 k_1 + c_2 k_2 = c_1 f(x_n, y_n) + c_2 f(x_n, y_n) + c_2 a_2 h \frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n) +$$
$$+ c_2 b_{21} h \frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n) f(x_n, y_n).$$

E, ainda, temos que

$$c_1k_1 + c_2k_2 = (c_1 + c_2)f(x_n, y_n) + c_2a_2h\frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n) + \\ + c_2b_{21}h\frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n)f(x_n, y_n).$$

Reescrevendo (2), temos

$$y'(x_n) + \frac{h}{2}y''(x_n) = f(x_n, y_n) + \frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n) + \frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n)f(x_n, y_n).$$

Comparando (1) e (2) e igualando, temos

$$c_1 + c_2 = 1; \quad c_2a_2 = \frac{1}{2}; \quad c_2b_{21} = \frac{1}{2}; \quad a_2 = b_{21}$$

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2a_2 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

O sistema não-linear obtido possui infinitas soluções, as quais fornecem métodos de Runge-Kutta de ordem 2. Um método bastante conhecido decorre da solução particular do sistema:

$$c_1 = \frac{1}{2}; \quad c_2 = \frac{1}{2}; \quad a_2 = 1,$$

o que fornece o seguinte método:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2), \\ k_1 &= f(x_n, y_n), \\ k_2 &= f(x_n + h, y_n + hk_1), \end{aligned}$$

o qual é conhecido como **método de Euler aperfeiçoado**.

Outra solução do sistema não-linear bastante conhecida é dada por

$$c_1 = 0; \quad c_2 = 1; \quad a_2 = \frac{1}{2},$$

que fornece o seguinte método:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right), \\ k_1 &= f(x_n, y_n), \end{aligned}$$

o qual é conhecido como **método de Euler modificado**.

Método de Runge-Kutta de Ordem 3

O método de Runge-Kutta 3-estágios é dado por

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + h(c_1 k_1 + c_2 k_2 + c_3 k_3), \quad \text{com} \quad c_1 + c_2 + c_3 = 1, \\
k_1 &= f(x_n, y_n), \\
k_2 &= f(x_n + ha_2, y_n + h(b_{21} k_1)), \quad a_2 = b_{21}, \\
k_3 &= f(x_n + ha_3, y_n + h(b_{31} k_1 + b_{32} k_2)), \quad a_3 = b_{31} + b_{32}.
\end{aligned}
$$

Para determinar os parâmetros c_1, c_2, c_3, a_2, a_3, b_{31} e b_{32}, de maneira análoga ao desenvolvimento do método de Runge-Kutta de ordem 2, precisamos comparar a expansão da função $\phi_R(x_n, y_n, h)$ em potências de h, com o método de Taylor de ordem 3.

Esse procedimento nos fornece o seguinte sistema não-linear:

$$\begin{cases} c_1 + c_2 + c_3 = 1 \\ c_2 a_2 + c_3 a_3 = \frac{1}{2} \\ c_3 a_2 b_{32} = \frac{1}{6} \\ c_2 {a_2}^2 + c_3 {a_3}^2 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

que possui infinitas soluções, as quais definem o método de Runge-Kutta de ordem 3. Uma solução para o sistema não-linear que define o método é dada por: $c_1 = \frac{2}{9}$; $c_2 = \frac{3}{9}$; $c_3 = \frac{4}{9}$; $a_2 = \frac{1}{2}$; $a_3 = \frac{3}{4}$; $b_{21} = \frac{1}{2}$; $b_{31} = 0$; $b_{32} = \frac{3}{4}$, e que nos fornece o seguinte método:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{9}(2k_1 + 3k_2 + 4k_3), \\ k_1 &= f(x_n, y_n), \\ k_2 &= f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1), \\ k_3 &= f(x_n + \frac{3}{4}h, y_n + \frac{3}{4}hk_2), \end{aligned}$$

o qual é conhecido como **método de Runge-Kutta de ordem 3**.

Método de Runge-Kutta de Ordem 4

O método de Runge-Kutta de ordem 4 é obtido seguindo o mesmo raciocínio desenvolvido para os métodos anteriores.

Neste caso, a comparação da função $\phi_R(x_n, y_n, h)$ com o método de Taylor de ordem 4 nos fornece um sistema não-linear de 11 equações e 13 incógnitas.

Uma solução particular para o sistema não-linear é dada por

$$\begin{cases} c_1 = \frac{1}{6}; \quad c_2 = \frac{2}{6}; \quad c_3 = \frac{2}{6}; \quad c_4 = \frac{1}{6}; \\ a_2 = \frac{1}{2}; \quad b_{21} = \frac{1}{2}; \\ a_3 = \frac{1}{2}; \quad b_{31} = 0; \quad b_{32} = \frac{1}{2}; \\ a_4 = 1; \quad b_{41} = 0; \quad b_{42} = 0; \quad b_{43} = 1. \end{cases}$$

E que nos fornece o seguinte método:

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\
k_1 &= f(x_n, y_n), \\
k_2 &= f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1), \\
k_3 &= f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2), \\
k_4 &= f(x_n + h, y_n + hk_3).
\end{aligned}
$$

o qual é conhecido como **método de Runge-Kutta de ordem 4**.

Exemplo 1

$$\begin{cases} y' = y, & x \in [0,1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Solução exata: $y(x) = e^x$.

Malhas: $h \in \{0{,}4,\ 0{,}2,\ 0{,}1,\ 0{,}05,\ 0{,}025\}$.

Erro global em $x = 1$: $E(h) = \left| y_N - e \right|$, com $N = \frac{1}{h}$.

Métodos: RK2 (Ponto Médio), RK3 (Kutta), RK4 (clássico).

Ordem observada entre h e $h/2$:

$$p_{\text{obs}}(h) = \frac{\log\big(E(h)/E(h/2)\big)}{\log 2}.$$

Expectativa: inclinações no log–log $\approx 2, 3, 4$ (RK2/3/4).

Resultados — Exemplo 1

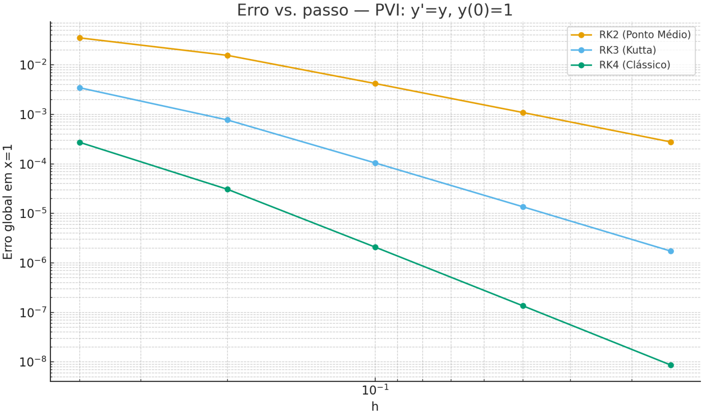


Tabela de Resultados — Exemplo 1

h	RK2 (PM)	RK3 (Kutta)	RK4 (Clássico)
0.400	3.514093e-02	3.453817e-03	2.725907e-04
0.200	1.557367e-02	7.724512e-04	3.069185e-05
0.100	4.200982e-03	1.045660e-04	2.084324e-06
0.050	1.090774e-03	1.360301e-05	1.358027e-07
0.025	2.778841e-04	1.734686e-06	8.666192e-09

Exemplo 1: $y' = y$, $y(0) = 1$.

Ordem, Custo e Estabilidade

- **Ordem (erro global):**
  RK2 $\sim \mathcal{O}(h^2)$, RK3 $\sim \mathcal{O}(h^3)$, RK4 $\sim \mathcal{O}(h^4)$.
- **Custo por passo (avaliações de f):**
  2 (RK2), 3 (RK3), 4 (RK4).
- **Eficiência prática:**
  Problemas suaves e não-rígidos: RK4 costuma dar excelente acurácia por avaliação de f.
  Problemas rígidos: métodos explícitos exigem passos h muito pequenos (devido ao limite de estabilidade).

- **Estabilidade absoluta (teste $y' = \lambda y$, $\lambda < 0$):**
  Para métodos de Runge–Kutta explícitos, a atualização em $y' = \lambda y$ é $y_{n+1} = R(z)\, y_n$ com $z = h\lambda$ (função de estabilidade). Aqui $\lambda = 1 \Rightarrow z = h$. Exige-se $|R(z)| < 1$.

  Em $y' = y$, as funções $R(z)$ dos métodos coincidem com o polinômio de Taylor truncado de e^z até o grau da ordem:

$$
\begin{aligned}
\text{Euler explícito:}\quad & R(z) = 1 + z,\\
\text{RK2 (PM):}\quad & R(z) = 1 + z + \tfrac{z^2}{2},\\
\text{RK3 (Kutta):}\quad & R(z) = 1 + z + \tfrac{z^2}{2} + \tfrac{z^3}{6},\\
\text{RK4 (clássico):}\quad & R(z) = 1 + z + \tfrac{z^2}{2} + \tfrac{z^3}{6} + \tfrac{z^4}{24}.
\end{aligned}
$$

  Regra prática (RK4, eixo real negativo):
  $h\,|\lambda| \lesssim 2{,}8$.

Estabilidade — RK4 estável/instável para diferentes h

Teste de estabilidade: Considerando a equação $y' = -15y$ e $\lambda = -15$. Pela regra prática do RK4 (eixo real negativo), $h\,|\lambda| \lesssim 2{,}8$; logo

$$h \lesssim \frac{2{,}8}{15} \approx 0{,}186.$$

Teste: execute RK4 em $[0,1]$ com $h \in \{0{,}2,\ 0{,}1,\ 0{,}05\}$. Denotando $z = h\lambda$ e

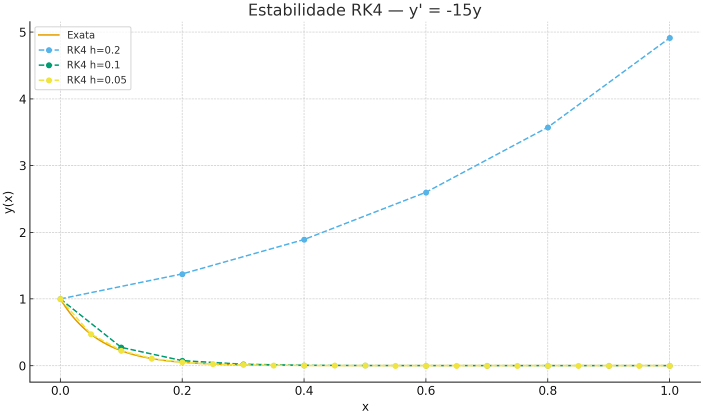
$$R_{\mathrm{RK4}}(z) = 1 + z + \tfrac{z^2}{2} + \tfrac{z^3}{6} + \tfrac{z^4}{24},$$

temos:

- $h = 0{,}2 \Rightarrow z = -3$ e $|R(-3)| \approx 1{,}375 > 1 \Rightarrow$ **instável** (explosão/oscilações).
- $h = 0{,}1 \Rightarrow z = -1{,}5$ e $|R(-1{,}5)| \approx 0{,}273 < 1 \Rightarrow$ **estável**.
- $h = 0{,}05 \Rightarrow z = -0{,}75$ e $|R(-0{,}75)| \approx 0{,}474 < 1 \Rightarrow$ **estável**.

Observação: "maior ordem" *não* implica estabilidade para qualquer h; há um *limite de passo* imposto pela região de estabilidade do método.

Resultados — Estabilidade



Exercícios

1. Usando os métodos de Euler modificado, Euler aperfeiçoado, Runge-Kutta de ordem 3 e ordem 4, calcule a solução dos PVI´s abaixo:

   a) $$\begin{cases} y' = f(x,y) = x - y + 2, & x \in [0,1]. \\ y(0) = 2. \end{cases}$$

   Solução exata: $y(x) = e^{-x} + x + 1.$

   b) $$\begin{cases} y' = -2xy^2, & x \in [0,1]. \\ y(0) = 0,5. \end{cases}$$

   Solução exata: $y(x) = \dfrac{1}{x^2+2}.$