

## Aula 3

- PVI : Métodos de Runge-Kutta

Método de Runge-Kutta de 2ª ordem (RK2)

Método de Runge-Kutta de 4ª ordem (RK4)

Método de Runge-Kutta de passo adaptativo

Representação de Butcher

- Consistência e convergência

- Estabilidade



## Métodos de Runge-Kutta

Vimos que o erro local em cada iteração do método de Euler é proporcional a  $h^2$  e que o erro global é proporcional a  $h^1$ . Então, diz-se que,

A ordem (de convergência) do método de Euler é 1 !

O método de Euler pode ser adequado para problemas simples, no entanto para problemas mais complexos é conveniente usar métodos numéricos de ordem superior. Tem que ser encontrado um equilíbrio entre a complexidade e a ordem do método a usar para cada problema.

O método tem também que ser *estável* para esse problema, mas vamos deixar essa discussão para mais tarde!

Os métodos de **Runge-Kutta (RK)** têm a precisão da aproximação em série de Taylor sem ser necessário o cálculo de derivadas de ordem elevada.



## Métodos de Runge-Kutta

Por exemplo, pretende-se obter um método de ordem 2, para tal considera-se na aproximação em série de Taylor mais um termo na expansão,

$$y_{k+1} = y_k + h * f_1(t_k, y_k) + \frac{h^2}{2!} * f_2(t_k, y_k)$$

Sendo,

$$f_1(t, y) = \frac{dy}{dt} \quad e \quad f_2(t, y) = \frac{d^2y}{dt^2}$$

O cálculo das derivadas de ordem superior é normalmente complexo.

Como contornar este problema?

Para tal, recordemos o método de Crank-Nicolson:

$$y_{k+1} = y_k + [f(t_k, y_k) + f(t_{k+1}, y_{k+1})] * \frac{h}{2}$$



## Métodos de Runge-Kutta

Este método é de ordem 2, e não é necessário o cálculo de derivadas de ordem superior a 1, para se atingir esta precisão! A 1ª derivada é calculada em dois instantes diferentes,  $t_k$  e  $t_{k+1}$ . (Recorde que o problema deste método se deve ao facto de ser implícito).

**EXEMPLO:** Vamos tentar encontrar um método que use a primeira derivada calculada explicitamente em  $t_k$  e em  $t_{k+1}$ . Vamos chamar  $r_1$  e  $r_2$  a esses dois valores:

$$r_1 = f(t_k, y_k) \quad e \quad r_2 = f(t_{k+1}, y_{k+1}) = f(t_{k+1}, y_k + r_1 * h)$$

O que se fez foi calcular a função incremento  $f$ , ('o declive'), no ponto  $t_k, y_k$ , i.e.,  $r_1$ . Esta função  $r_1$ , permite obter uma 1ª estimativa de  $y_{k+1} = y_k + r_1 * h$ . Esta 1ª estimativa permite calcular a função incremento  $r_2$ , no ponto  $t_{k+1}, y_{k+1}$ .

À semelhança do método de Crank-Nicolson, pode considerar-se uma nova estimativa para o valor de  $y_{k+1}$ , a seguinte expressão:

$$y_{k+1} = y_k + \left[ \frac{1}{2} r_1 + \frac{1}{2} r_2 \right] * h$$

*Questão: Será este método de ordem 2? E é convergente?*



## Métodos de Runge-Kutta

Vamos introduzir os métodos de Runge-Kutta explícitos de uma forma mais genérica.

Assim,

Em cada iteração, a função  $f(t, y)$  é calculada  $s$  vezes, obtendo-se sucessivamente

$$r_1, r_2, r_3, \dots, r_s.$$

No nosso exemplo  $s = 2$ .

Os valores de  $r_1, r_2, r_3, \dots, r_s$  são calculados para valores da variável independente  $t$ , entre  $t_k$  e  $t_{k+1}$ , dados respetivamente por  $t_k + c_1 h, t_k + c_2 h, \dots, t_k + c_s h$ .

No nosso exemplo  $c_1 = 0$  e  $c_2 = 1$ .

**OBS:**  $c_1 = 0$  é inevitável para um método explícito, mas em relação aos outros valores de  $c$ , para já sabemos que não serão superiores a 1.



## Métodos de Runge-Kutta

O valor de  $\mathbf{r}_i$ , para cada  $0 < i \leq s$ , é calculado a partir dos  $i-1$  valores de  $\mathbf{r}$  calculados previamente:

$$r_i = f(t_k + c_i * h, y_k + [a_{11} r_1 + \dots + a_{i(i-1)} r_{i-1}] * h)$$

A notação pode confundir um pouco.

Para simplificar, vejamos o exemplo para  $i=3$ :

$$r_3 = f(t_k + c_3 * h, y_k + [a_{31} r_1 + a_{32} r_2] * h)$$

No nosso exemplo só existe o elemento

$$a_{21} = 1$$



## Métodos de Runge-Kutta

### MÉTODOS de RUNGE-KUTTA

Finalmente, quando todos os  $s$  valores de  $r$  já foram calculados, a estimativa para  $y_{k+1}$  obtém-se a partir de uma média ponderada dos valores de  $r$ ,

$$y_{k+1} = y_k + (b_1 r_1 + b_2 r_2 + \cdots + b_s r_s) * h$$

No nosso exemplo,

$$b_1 = \frac{1}{2} \quad e \quad b_2 = \frac{1}{2}$$

É fácil de perceber que a soma dos pesos tem que dar 1:

$$b_1 + b_2 + \cdots + b_s = 1$$



## Métodos de Runge-Kutta

Cada método de Runge-Kutta pode ser representado sinteticamente por um **quadro de Butcher**:

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array}$$

Um método explícito com  $s=3$ , por exemplo, terá um quadro genérico,

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ c_2 & a_{21} & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & \\ \hline & b_1 & b_2 & b_3 \end{array}$$





## Métodos de Runge-Kutta

**OBS1:** para ordens  $p$  iguais ou inferiores a 4 é possível construir métodos de Runge-Kutta em que o número  $m$  de valores de  $r$  a determinar é igual à ordem do método, mas isso exige que os valores, quer dos vetores  $c$  e  $b$  quer dos elementos da matriz  $A$ , obedeam a certas relações cujo estudo não se enquadra nesta unidade curricular. Por exemplo, para se contruir um método de ordem 5, já é necessário calcular e usar pelo menos 6 valores diferentes de  $r$ .

**OBS2:** quando estiver a programar métodos de Runge-Kutta tem que ser muito cuidadoso! Pequenos enganos podem significar que está a escrever um método de ordem inferior à desejada e isso pode não ser observável nos gráficos dos resultados. Como exemplo, pode acontecer escrever  $r_2$  num sítio onde deveria estar  $r_3$  e o método passa a estar completamente errado, no sentido em que passa a ter uma ordem inferior à pretendida.



## Métodos de Runge-Kutta

Voltando ao exemplo apresentado, e à questão colocada: *Será este método de ordem 2? E é convergente?* É de facto um método de ordem 2 e é convergente(?).

O seu quadro de Butcher, como se viu, é,

0		
1	1	
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

O quadro de Butcher do método de Euler é simplesmente,

0	
	1



## Um método de Runge-Kutta de segunda ordem (RK2)

No Trabalho 3 vamos usar o método de Runge-Kutta de segunda ordem com o seguinte quadro de Butcher:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 0 \quad 1 \end{array}$$

Descrito de outra forma,

$$r_1 = f(t_k, y_k)$$

$$r_2 = f\left(t_k + \frac{h}{2}, y_k + r_1 * \frac{h}{2}\right)$$

$$y_{k+1} = y_k + r_2 * h$$

Este método de Runge-Kutta de segunda ordem também é conhecido por método de **Euler-Richardson**.



**EXEMPLO 1 – Aplicação de um método RK2 a uma equação de 2ª ordem**

Já vimos que uma equação de 2ª ordem, é equivalente a um sistema de duas equações de 1ª ordem,

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = f\left(t, y, \frac{dy}{dt}\right) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \frac{dy}{dt} = v \\ \frac{dv}{dt} = f(t, y, v) \end{cases}$$

Aplicando-se o método RK2 ao sistema,

$$\begin{cases} r_{1v} = f(t_k, y_k, v_k) \\ r_{1y} = v_k \\ r_{2v} = f\left(t_k + \frac{h}{2}, y_k + r_{1y} * \frac{h}{2}, v_k + r_{1v} * \frac{h}{2}\right) \\ r_{2y} = v_k + r_{1v} * \frac{h}{2} \end{cases}$$



## EXEMPLO 1 – Aplicação de um método RK2 a uma equação de 2ª ordem

Obtém-se:

$$\begin{cases} v_{k+1} = v_k + r_{2v} * h \\ y_{k+1} = y_k + r_{2y} * h \end{cases}$$

OBS: note que tem que calcular primeiro  $r_{1v}$  e  $r_{1y}$  antes de calcular  $r_{2v}$  e  $r_{2y}$  (e assim sucessivamente, se o método for de ordem  $p$  superior a 2).



## Um método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4)

No trabalho 3 vamos usar o seguinte método de Runge-Kutta de quarta ordem:

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$

$$r_1 = f(t_k, y_k)$$

$$r_2 = f\left(t_k + \frac{h}{2}, y_k + r_1 * \frac{h}{2}\right)$$

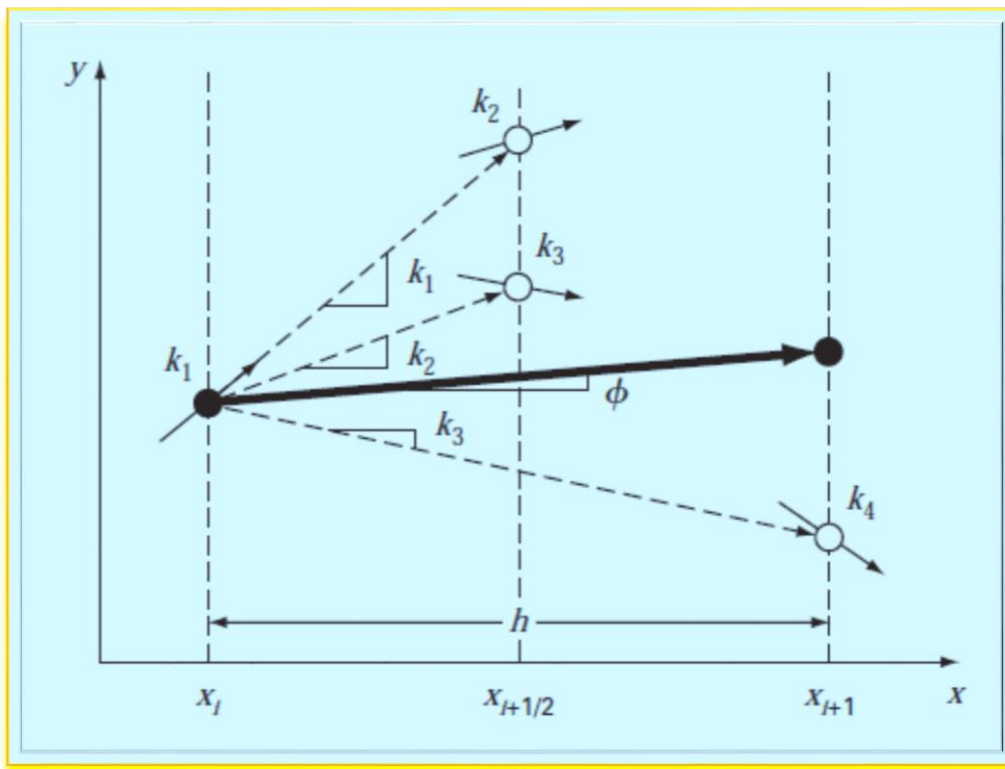
$$r_3 = f\left(t_k + \frac{h}{2}, y_k + r_2 * \frac{h}{2}\right)$$

$$r_4 = f(t_k + h, y_k + r_3 * h)$$

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{6} (r_1 + 2 * r_2 + 2 * r_3 + r_4) * h$$



## Um método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4)



Representação dos declives para o método RK4



## **LEITURA 1: RK4–Exemplo de Aplicação**

Considere a seguinte equação diferencial ordinária:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) = 4 * e^{0.8x} - 0.5 y$$

Usando o método de RK de 4ª ordem, integre-a numericamente de  $t=0$  a  $t=0.5$ , com passo temporal de 0.5. A condição inicial em  $x=0$  é  $y=2$ . Pode mostrar-se que esta equação tem solução analítica dada por:

$$y = \frac{4}{1.3} (e^{0.8x} - e^{-0.5x}) + 2 e^{-0.5x}$$

Compare a solução numérica com a solução analítica.

### **SOLUÇÃO:**

**1º passo:** Cálculo do declive no início do intervalo  $\rightarrow r_1$

$$r_1 = f(0, 2) = 4 * e^{0.8*(0)} - 0.5 * (2) = 3$$





**2º passo:** Cálculo do declive no ponto médio do intervalo (0.25) usando  $r_1 \rightarrow r_2$

$$r_2 = f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + r_1 * \frac{h}{2}\right)$$

$$x_k + \frac{h}{2} = 0 + 0.25 = 0.25, \quad y_k + r_1 * \frac{h}{2} = 2 + 3 * (0.25) = 2.75$$

$$r_2 = f(0.25, 2.75) = 4e^{0.8*(0.25)} - 0.5 * (2.75) = 3.510611$$

**3º passo:** Cálculo do declive no ponto médio do intervalo (0.25) usando  $r_2 \rightarrow r_3$

$$r_3 = f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + r_2 * \frac{h}{2}\right)$$

$$x_k + \frac{h}{2} = 0 + 0.25 = 0.25, \quad y_k + r_2 * \frac{h}{2} = 2 + 3.510611 * (0.25) = 2.877653$$

$$r_3 = f(0.25, 2.877653) = 4e^{0.8*(0.25)} - 0.5 * (2.877653) = 3.446785$$



**4º passo:** Cálculo do declive no ponto final do intervalo (0.5) usando  $r_3 \rightarrow r_4$

$$r_4 = f(x_k + h, y_k + r_3 * h)$$

$$x_k + h = 0 + 0.5 = 0.5, \quad y_k + r_3 * h = 2 + 3.446785 * (0.5) = 3.723392$$

$$r_4 = f(0.5, 3.723392) = 4e^{0.8*(0.5)} - 0.5 * (3.723392) = 4.105603$$

**5º passo:** Cálculo de  $y_{k+1}$  no ponto final do intervalo (0.5) usando  $r_1, r_2, r_3$ , e  $r_4$

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{6} (r_1 + 2 * r_2 + 2 * r_3 + r_4) * h$$

$$y(0.5) = 2 + \frac{1}{6} (3 + 2 * 3.510611 + 2 * 3.446785 + 4.105603) * h$$

$$y(0.5) = 2 + 3.503399 * (0.5) = 3.751699$$

A solução analítica em  $x=0.5$  tem o valor de 3.751521. Verifique os resultados e comente!!!!



## Métodos de Runge-Kutta de passo adaptativo

Os métodos de Runge-Kutta utilizados na prática, os de passo adaptativo, são algo diferentes daqueles que apresentámos. Nestes o passo, i.e. a diferença  $h$  entre valores consecutivos da variável independente, não é mantida constante. Em zonas do domínio em que a função  $y$  tem um comportamento ‘errático’, justifica-se o uso de um  $h$  bastante pequeno, mas quando a função tem uma variação previsível, pode aumentar-se bastante o passo.

Estes métodos exigem alguns cálculos extra em cada iteração para comparar a exatidão com a exatidão desejada. No entanto, dão-nos a possibilidade de reduzir o número de iterações, o que permite tornar os algoritmos mais rápidos por fatores que podem ser até de uma ou duas ordens de grandeza.

Uma forma de verificar se o passo deve ser aumentado ou diminuído é estimar  $y(t+h)$  de duas maneiras distintas: usando um passo  $h/2$  e um passo  $h$ . A diferença entre estas duas estimativas, para um dado valor da variável independente, dá-nos uma indicação do erro cometido e permite-nos decidir se devemos aumentar, diminuir, ou manter o passo.



## A função ode45 do MATLAB

A função **ode45** do MATLAB, que vai usar nos trabalhos práticos, usa um método chamado de Dorman-Prince, com uma abordagem diferente. Em cada iteração são calculadas duas estimativas da solução, uma através de um método de Runge-Kutta de quarta ordem e outra através de uma estimativa de um método de quinta ordem. O erro do método de Runge-Kutta de quarta ordem é avaliado a partir da diferença entre as duas estimativas. Por outras palavras, o método é de facto de quarta ordem, mas corre-se em simultâneo um método de quinta ordem que nos permite ir alterando o passo de maneira a obter a exatidão desejada.

## ESTABILIDADE

Nas aulas anteriores foi dito que, desde que satisfeitas algumas condições, como o método de Euler tem um erro local da ordem de  $h^2$ , o seu erro global é da ordem de  $h$ .

O argumento que foi usado para o método de Euler pode ser estendido para outros métodos: se o erro local é de ordem  $h^{p+1}$ , o erro global é da ordem de  $h^p$ .

No entanto, isto só acontece se, para o problema em estudo e dado o passo  $h$  escolhido, o método for **estável**.



Seguidamente far-se-à uma discussão sucinta da estabilidade dos métodos até agora estudados para problemas de valor inicial.

## Consistência e Convergência

No que se segue é necessário introduzir algumas definições.

### Consistência

Um método numérico diz-se consistente com uma equação diferencial se o erro local tende para zero com  $h$ , i.e, quando  $h$  tende para zero o erro local também tende para zero.

Os métodos estudados até ao presente são consistentes.

### Convergência

Um método numérico diz-se convergente se aplicado a qualquer ODE com função  $f$  Lipschitz contínua, a diferença entre a solução numérica e a solução exata em cada ponto tende para zero quando  $h$  tende para zero.

Pode mostra-se que todos os métodos estudados até agora são convergentes, quer para problemas lineares quer para problemas não-lineares.

