Métodos de Runge-Kutta

Métodos de Runge-Kutta de 2ª ordem (introdução)

Consideremos de novo a equação diferencial

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

No método de Euler (de ordem 1)

$$y_{k+1} = y_k + f(y_k, t_k)h$$

Num método de Runge-Kutta (RK), o incremento aplicado a y_k para obter y_{k+1} usa $f(t, y)$ calculada em vários t's no intervalo $[t_k, t_{k+1}]$.
Por exemplo, nos métodos de RK de de 2ª ordem temos

$$y_{k+1} = y_k + (b_1 r_1 + b_2 r_2)h \tag{1}$$

onde

$$r_1 = f(t_k + c_1 h, y(t_k + c_1 h))$$
$$r_2 = f(t_k + c_2 h, y(t_k + c_2 h))$$

- $t_k + c_1 h$ e $t_k + c_2 h$ são tempos entre t_k e t_{k+1}.
- A que se refere $y(t_k + c_1 h)$ e $y(t_k + c_2 h)$? Estes ainda não são conhecidos.
- Quais os valores de b_1, b_2, c_1 e c_2?

Usualmente, começa-se com $c_1 = 0$, ou seja, o primeito termo é calculado em $t_k + c_1 h \equiv t_k$, ou seja no tempo do passo anterior. Assim,

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

Estimamos $y(t_k + c_2 h) = y_k + a_{21} f(t_k, y_k) h$, sendo a_{21} mais um parâmetro a determinar. Assim,

$$r_2 = f(t_k + c_2 h, y_k + a_{21} r_1 h)$$

Parâmetros que não conhecemos

Vetores: $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2)$ e $\boldsymbol{c} = (0, c_2)$

Matriz: $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}$

Queremos escolher parâmetros para os quais o método seja de 2ª ordem, i.e., idêntico a uma expansão em série de Taylor até 2ª ordem.

Cálculos

Usando

$$r2 = f(t_k + c_2 h, y_k + a_{21} r_1 h) = r_1 + [f_t'(t_k, y_k)c_2 + f_y'(t_k, f_k)a_{21} r_1]h + O(h^2)$$

obtemos

$$y_{k+1} = y_k + h(b_1 + b_2)r_1 + h^2 b_2[c_2 f_t'(t_k, y_k) + a_{21} f_y'(t_k, y_k)r_1] + O(h^3).$$

Note que

$$y''(t) = f_t'(t, y) + f_y'(t, y)y'(t).$$

Assim, a expansão em série de Taylor até segunda ordem de $y(t_{k+1})$ em torno de t_k e supondo que $y(t_k) = y_k$

$$y(t_{k+1}) = y(t_k) + hr_1 + \frac{h^2}{2}[f_t'(t, y) + f_y'(t, y)r_1] + O(h^3)$$

Comparando as duas expressões

$$y_{k+1} = y_k + h(b_1 + b_2)r_1 + h^2 b_2[c_2 f'_t(t_k, y_k) + a_{21} f'_y(t_k, y_k) r_1] + O(h^3)$$

$$y(t_{k+1}) = y(t_k) + hr_1 + \frac{h^2}{2}[f'_t(t, y) + f'_y(t, y) r_1] + O(h^3)$$

obtemos

$$b_1 + b_2 = 1, \quad b_2 c_2 = \frac{1}{2}, \quad b_2 a_{21} = \frac{1}{2}$$

Estas 3 equações não definem de forma única os 4 parâmetros. Algumas das escolhas mais usuais são

$$c_2 = \frac{1}{2}, \quad a_{21} = \frac{1}{2}, \quad b_1 = 0 \quad \text{e} \quad b_2 = 1$$

$$c_2 = \frac{2}{3}, \quad a_{21} = \frac{2}{3}, \quad b_1 = \frac{1}{4} \quad \text{e} \quad b_2 = \frac{3}{4}$$

$$c_2 = 1, \quad a_{21} = 1, \quad b_1 = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad b_2 = \frac{1}{2}$$

RK de 2ª ordem - a nossa escolha

Para a equação de 1ª ordem considerada acima

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

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

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

RK de 2ª ordem aplicado a eq. 2ª ordem

Para uma equação de 2ª ordem

$$\frac{d^2y}{dt^2} = f(t, y, y')$$

obtemos 2 equações de 1ª ordem

$$\frac{dy}{dt} = v, \qquad \frac{dv}{dt} = f(t, y, v)$$

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

RK de 2ª ordem aplicado a eq. 2ª ordem

Por fim,

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

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

Estabilidade do Runge–Kutta de 2ª ordem

Para estudar a estabilidade, voltemos a considerar a equação diferencial linearizada:

$$\frac{dy}{dt} = \lambda y.$$

Aplicando um método de RK de 2ª ordem $r_1 = \lambda y_{k-1}$, $r_2 = \lambda\left(y_{k-1} + \frac{h}{2} r_1\right)$

$$y_k = y_{k-1} + r_2 h = y_{k-1}\left(1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2}\right)$$

$$y_k = y_0\left(1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2}\right)^k$$

A solução numérica y_k não cresce se

$$(1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2}) \leq 1$$

Estabilidade do Runge–Kutta de 2ª ordem

Voltemos também a considerar o caso mais geral em que há vários λ's, podendo alguns deles ser complexos, neste caso, o método é estável se

$$\left|1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2}\right|^2 \leq 1$$

Analisemos de novo os 2 casos particulares:

- Se λ é puramente real, $\lambda \equiv \lambda_r \leq 0$, para

$$h \leq \frac{2}{|\lambda_r|}$$

  o método é estável. Neste caso o método RK de 2ª ordem é condicionalmente estável.
- Se λ é puramente imaginário, $\lambda \equiv \lambda_i$, o método RK de 2ª ordem é instável.

Estabilidade do Runge–Kutta de 2ª ordem

Estes resultados particulares são idênticos aos obtidos para o método de Euler. No entanto:

- A região de estabilidade no plano $(h\lambda_r, h\lambda_i)$ é maior no caso RK 2ª ordem.
- No caso dos movimentos oscilatórios (λ puramente imaginários), o aumento da amplitude é muito menor que num método de Euler.

Métodos RK de ordem superior a 2

Os métodos de Runge-Kutta de ordem 3 e 4 podem ser deduzidos usando expansões em série de Taylor.

Assim como no método RK de 2ª ordem se calcula a função em dois pontos intermédios, assim nos métodos de 3ª e 4ª ordem calcula-se a função em 3 e 4 pontos intermédios, respetivamente.

Métodos RK de ordem superior a 4 requerem métodos mais sofisticados, do que as expansões em série de Taylor, para determinar os parâmetros.

Nestes últimos, o número de cálculos da função em pontos intermédios é maior que a ordem do método.

Método RK de 4ª ordem

Em geral, um método de RK de 4ª ordem para uma equação de 1ª ordem escreve-se

$$y_{k+1} = y_k + (b_1 r_1 + b_2 r_2 + b_3 r_3 + b_4 r_4)h$$

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

$$r_2 = f(t_k + c_2 h, y_k + a_{21} r_1 h)$$

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

$$r_4 = f(t_k + c_4 h, y_k + a_{41} r_1 h + a_{42} r_2 h + a_{43} r_3 h)$$

Método RK de 4ª ordem - nossa escolha

Usando uma abordagem baseada na série de Taylor conseguiríamos provar que uma das escolhas para os parâmetros é a seguinte. Para os pesos b_i:

$$b_1 = \frac{1}{6}, \quad b_2 = \frac{1}{3}, \quad b_3 = \frac{1}{3}, \quad b_4 = \frac{1}{6}$$

Para os coeficientes c_i dos pontos intermédios:

$$c_2 = \frac{1}{2}, \quad c_3 = \frac{1}{2}, \quad c_4 = 1$$

Para os coeficientes de peso dos r_i:

$$a_{21} = \frac{1}{2}$$

$$a_{31} = 0, \quad a_{32} = \frac{1}{2}$$

$$a_{41} = 0, \quad a_{42} = 0, \quad a_{43} = 1$$

Método RK de 4ª ordem - nossa escolha

Ficando

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

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

$$r_2 = f(t_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}r_1 h)$$

$$r_3 = f(t_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}r_2 h)$$

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

Estabilidade do Runge–Kutta de 4ª ordem

Voltemos a considerar a equação diferencial linear:

$$\frac{dy}{dt} = \lambda y.$$

Aplicando o método de RK de 4ª ordem descrito acima

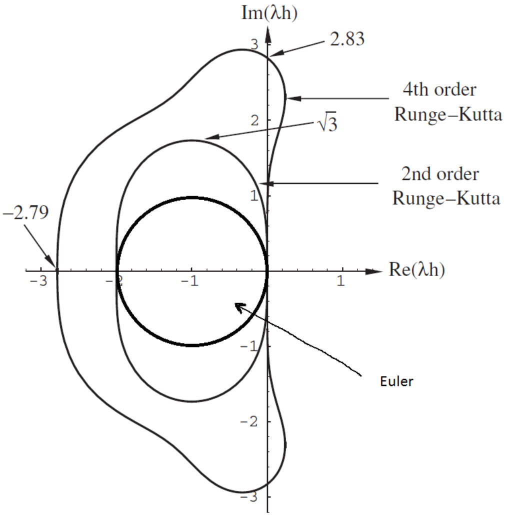
$$y_k = y_0 \left(1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2} + \frac{\lambda^3 h^3}{6} + \frac{\lambda^4 h^4}{24} \right)^k$$

A solução numérica y_k não cresce se

$$\left(1 + \lambda h + \frac{\lambda^2 h^2}{2} + \frac{\lambda^3 h^3}{6} + \frac{\lambda^4 h^4}{24} \right) \leq 1$$

A figura seguinte mostra as regiões de estabilidade no plano $(h\lambda_r, h\lambda_i)$ de ambos os métodos de Runge–Kutta agora estudados.

Regiões de estabilidade de Euler e Runge-Kutta



Métodos de Runge–Kutta de passo adaptativo

Os métodos de Runge–Kutta utilizados na prática são algo diferentes daqueles que apresentámos aqui, pois 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-se aumentar bastante o passo.

Estes métodos exigem alguns cálculos extra em cada passo para comparar a exatidão com a exatidão desejada, mas a possibilidade que nos dão de reduzir o número de passos permite tornar os algoritmos mais rápidos por fatores que podem ser até de uma ou duas ordens de grandeza.

A função ode45 do MATLAB

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

A função ode45 do MATLAB, que vai usar nos trabalhos práticos, usa um método chamado de Dormand–Prince, com uma abordagem diferente. Em cada passo, é calculada uma estimativa através de um método de Runge–Kutta de quarta ordem e outra estimativa através 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.