Métodos de Runge-Kutta

Motivação: Nos dedicamos à solução de equações diferenciais ordinárias da forma:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

Valor novo = valor antigo + inclinação x tamanho do passo.

Ou em termos matemáticos:

$$y_{i+1} = y_i + \phi h \tag{1}$$

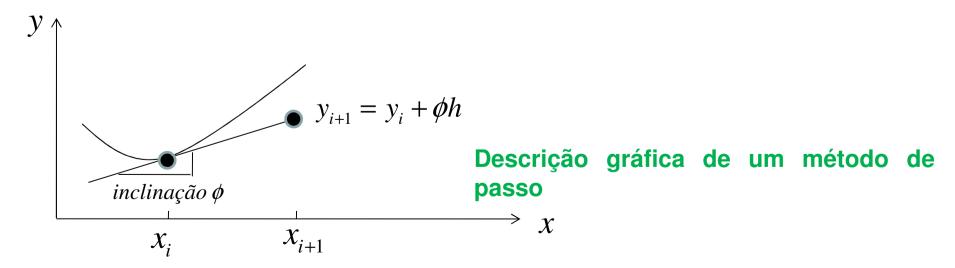
De acordo com essa equação, a estimativa da inclinação ϕ é usada para extrapolar de um valor antigo y para um valor novo y em uma distância h.

Essa fórmula pode ser aplicada passo a passo para cálculos no futuro e, portanto, para percorrer a trajetória da solução.

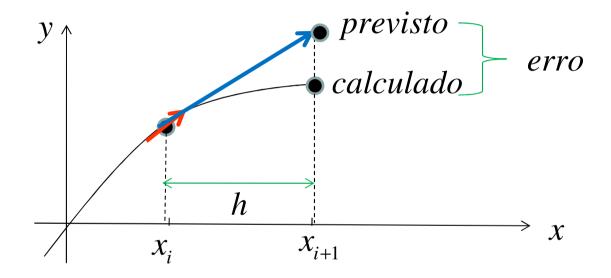
Métodos de Runge-Kutta

Todos os métodos de passo único podem ser expressos nessa forma geral, sendo que a única diferença á maneira como é feita a estimativa da inclinação.

- Uma inclinação no início do intervalo é tomado como uma aproximação da inclinação média em todo o intervalo. Essa abordagem é chamada de método de Euler.
- Outros métodos de passo único que usam estimativas alternativas da inclinação resultam em previsões mais acuradas.
- Todas essas técnicas são chamadas de Ruge-Kutta.



Métodos de Runge-Kutta



Método de Euler

Método de Euler

A primeira derivada fornece uma estimativa direta da inclinação em x_i.

$$\phi = f(x_i, y_i)$$

Em que $f(x_i, y_i)$ é equação diferencial calculada em x_i e y_i . Essa estimativa pode ser substituída na equação (1).

$$y_{i+1} = y_i + f(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)h \tag{2}$$

Essa fórmula é conhecida como *método de Euler* (ou Euler-Cauchy ou ponto inclinação).

Um novo valor de y é previsto usando a inclinação (igual à primeira derivada no valor original de x) para extrapolar linearmente sobre um tamanho de passo h.

Método de Euler

Use o método de Euler para integrar numericamente a equação:

$$\frac{dy}{dx} = -2x^3 + 12x^2 - 20x + 8,5$$

De x=0 a x=4 com um tamanho de passo de 0,5. A condição inicial em x=0 é y=1. Lembre-se de que a solução exata é dada pela equação:

Aplicando a regra da integração:

$$\int u^n du = \frac{u^{n+1}}{n+1} + C \qquad n \neq 1$$
$$y = \int (-2x^3 + 12x^2 - 20x + 8, 5) dx$$

$$y = -0.5x^4 + 4x^3 - 10x^2 + 8.5x + 1$$
 para a condição inicial

Método de Euler

Solução: A equação (2) é usada para implementar o método de Euler.

$$y(0,5) = y(0) + f(0,1) \times 0,5$$

Em que y(0)=1 e a estimativa da inclinação em x=0 é:

$$f(0,1) = -2(0)^3 + 12(0)^2 - 20(0) + 8,5 = 8,5$$

Portanto,

$$y(0,5) = 1,0+8,5\times0,5=5,25$$

A solução verdadeira em x=0,5 é:

$$y = -0.5(0.5)^4 + 4(0.5)^3 - 10(0.5)^2 + 8.5(0.5) + 1 = 3.21875$$

Método de Euler

Logo o erro é:

$$E_t = verdadeiro - aproximado = 3,21875 - 5,25 = -2,03125$$

Ou como um erro relativo percentual:

$$\varepsilon_{t} = -63,1\%$$

Para o segundo passo:

$$y(1) = y(0,5) + f(0,5, 5,25) \times 0,5$$

$$y(1) = 5,25 + [-2(0,5)^3 + 12(0,5)^2 - 20(0,5) + 8,5] \times 0,5 = 5,875$$

A solução verdadeira em x=1,0 é 3, e portanto o erro relativo percentual é 95,8%. Embora os cálculos capturem a tendência geral da solução verdadeira, o erro é considerável.

Método de Euler

x	Yverdadeiro	Y _{Euler}	erro
0,0	1	1	
0,5	3,21875	5,25000	-63,1%
1,0	3,00000	5,25000	-95,8%
1,5	2,21875	5,125	131%
2,0	2,00000	4,5000	125%
2,5	2,71875	4,75000	-74,7%
3,0	4,00000	5,87500	46,9%
3,5	4,71875	7,12500	-51,0%
4,0	3,00000	7,00000	-53,0%

Mehoria no método de Euler

Uma fonte fundamental de erro no método de Euler é que supomos que a derivada no início do intervalo pode ser usada no intervalo todo.

Método de Heun

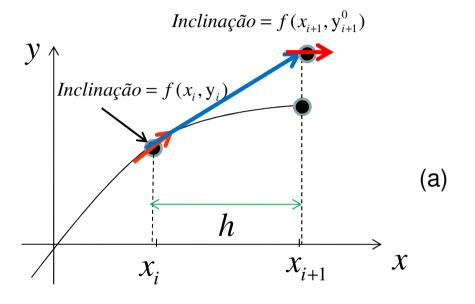
Um método para melhorar a estimativa da inclinação envolve a determinação de duas derivadas para o intervalo – uma para o ponto inicial e outra no ponto final.

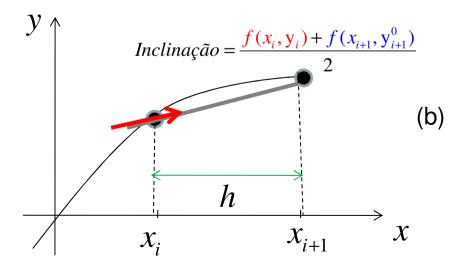
Então, é feita a média das duas derivadas para obter uma estimativa melhorada da inclinação no intervalo todo.

Essa abordagem, chamada de método de Heun, é descrita graficamente a seguir.

Lembre-se que, no método de Euler, a inclinação no início de um intervalo

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$





Descrição Gráfica do método de Heun.

- (a) Preditor
- (b) Corretor

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{3}$$

é usada para extrapolar linearmente para y_{i+1}:

$$y_{i+1}^0 = y_i + f(x, y) h (4)$$

No método de Euler padrão, pararíamos nesse ponto. No entanto, no método de Heun, o y_{i+1}^0 calculado na equação (4) não é a resposta final, mas uma previsão intermediária.

É por isso que o distinguimos com o sobrescrito 0.

A equação (4) é chamada de equação preditora.

Ela fornece uma estimativa de y_{+1} que permite o cálculo de uma estimativa da inclinação na extremidade final do intervalo:

$$y'_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)$$
 (5)

Assim as duas inclinações [equações (3) e (5)] podem ser combinadas para obter uma inclinação média no intervalo:

$$\dot{y}_{i+1} = \frac{\dot{y}_i + \dot{y}_{i+1}}{2} = \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)}{2}$$

Essa inclinação média é então usada para extrapolar linearmente de y_i a y_{i+1} usando o método de Euler:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)}{2}h$$

Que é chamada equação corretora.

A abordagem de Heun é uma abordagem do tipo preditor-corretor.

$$\left| \mathcal{E}_{a} \right| = \left| \frac{y_{i+1}^{j} - y_{i+1}^{i-1}}{y_{i+1}^{j}} \right| 100\%$$
 critério de parada de métodos iterativos

resultados da iteração anterior e presente

Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta (RK) alcançam a precisão de uma abordagem por série de Taylor sem exigir cálculos de derivadas de ordem superior.

Há muitas variações, mas todas podem ser postas na forma geral equação (1).

$$y_{i+1} = y_i + \phi(x_i, y_i, h)h$$
 (6)

Em que $\phi(x_i, y_i, h)$ é chamada de função incremento, a qual pode ser interpretada como representativa da inclinação em um intervalo.

A função incremento pode ser escrita na forma geral como:

$$\phi = a_1 k_1 + a_2 k_2 + \dots + a_n k_n \tag{7}$$

Em que os a's são constantes e os k's são:

Métodos de Runge-Kutta

$$k_{1} = f(x_{i}, y_{i})$$

$$k_{2} = f(x_{i} + p_{1}h, y_{i} + q_{11}k_{1}h)$$

$$k_{3} = f(x_{i} + p_{2}h, y_{i} + q_{21}k_{1}h + q_{22}k_{2}h)$$

$$\vdots$$
(6a)
(6b)
(6b)

$$\mathbf{k}_{n} = f(x_{i} + \mathbf{p}_{n-1}\mathbf{h}, y_{i} + q_{n-1}k_{1}\mathbf{h} + q_{n-1,2}k_{2}\mathbf{h} + \dots + q_{n-1,n-1}k_{n-1}\mathbf{h})$$
(6d)

Em que os p's e os q's são constantes. Observe que os k's são relações de recorrência. Isto é, \mathbf{k}_1 aparece na equação para \mathbf{k}_2 , o qual aparece na equação para \mathbf{k}_3 , e assim por diante.

Como cada k é um cálculo da função, essa recorrência torna os métodos RK eficientes para cálculos computacionais.

Métodos de Runge-Kutta

Vários métdos de RK podem ser deduzidos usando-se um número diferente de termos na função incremento, conforme especificado por n.

O método RK de primeira ordem n=1, é, na realidade, o método de Euler.

Uma vez que n seja escolhido, os valores para os a's, os p's e os q's são calculados igualando-se a equação (6) a termos da expansão em série de Taylor.

Por exemplo, os métodos RK de segunda ordem usam uma função incremento com dois termos (n=2).

Tais métodos serão exatos se a solução da equação diferencial ordinária for quadrática.

Métodos de Runge-Kutta de Segunda Ordem

A versão de segunda ordem da equação (6) é

$$y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2)h \tag{7}$$

Em que

$$k_1 = f(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) \tag{7a}$$

$$k_2 = f(\mathbf{x}_i + p_1 \, \mathbf{h}, \mathbf{y}_i + q_{11} \, \mathbf{k}_1 \mathbf{h})$$
 (7b)

Os valores de a₁, a₂, p₁, e q₁₁ são calculados igualando-se a Equação (7) à expansão da série de Taylor até os termos de segundo grau. Fazendo isso, são deduzidas três equações para calcular as quatro constantes conhecidas:

$$a_1 + a_2 = 1 \tag{8a}$$

$$a_2 p_1 = \frac{1}{2} \tag{8b}$$

$$a_2 q_{11} = \frac{1}{2} \tag{8c}$$

Como temos três equações com quatro incógnitas devemos escolher um valor para uma das incógnitas para determinar as outras três. Suponha que especifiquemos um valor para a_2 . As equações de (8a) a (8c) podem ser resolvidas por:

$$a_1 = 1 - a_2 \tag{8d}$$

$$p_1 = q_{11} = \frac{1}{2a_2} \tag{8e}$$

Como podemos escolher um número infinito de valores para ${\bf a_2}$, existe um número infinito de métodos RK de segunda ordem.

Cada versão forneceria exatamente o mesmo resultado se a solução EDO fosse quadrática, linear ou constante.

Entretanto, elas apresentam resultados diferentes quando a solução é mais complicada.

Método Heun com um único corretor ($a_2 = 1/2$). Se for suposto que a_2 é 1/2, as equações (8d) e (8e) podem ser resolvidas por $a_1 = 1/2$ e $p_1 = q_{11} = 1$. Esses parâmetros substituídos na equação (7), fornecem:

$$y_{i+1} = y_i + (\frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2)h \tag{9}$$

Em que

$$\mathbf{k}_{1} = f(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{y}_{i}) \tag{9a}$$

$$\mathbf{k}_2 = f(\mathbf{x}_i + \mathbf{h}, \mathbf{y}_i + \mathbf{k}_1 \mathbf{h}) \tag{9b}$$

Observe que k_1 é a inclinação no inínico do intervalo e k_2 é a inclinação no final do intervalo. Consequentemente, esse método de segunda ordem de RK é, na realidade, a técnica de Heun sem iteração.