Aula 06 - Métodos de Runge-Kutta

Éliton Fontana

A utilização do método de Euler para a resolução de problemas típicos da engenharia usualmente implica no uso de passos de tempo muito pequenos para garantir a convergência. Normalmente, melhores resultados são obtidos com o uso de métodos de maior ordem ou que ao menos possuam características de convergência mais atrativas.

Como visto na aula passada, o método de Euler possui diversas limitações que restringem o seu uso a problemas muito específicos. Dentre as principais causas destas limitações pode-se citar os termos desprezados na expansão em série de Taylor, a necessidade de utilizar passos de tempo muito pequenos e o fato de que o método considera que o valor da derivada $y'(t_i)$ é constante em todo o intervalo (t_i, t_{i+1}). O método de Euler serviu como base para o desenvolvimento de métodos gradativamente mais complexos e com melhor desempenho.

O método de Euler e outros métodos explícitos de maior ordem fazem parte de uma família de métodos numéricos mais abrangentes chamados de métodos de Runge-Kutta (RK). O método de Euler corresponde ao método RK de primeira ordem. Além dos métodos RK, outras abordagens podem ser empregadas, como por exemplo a utilização de métodos implícitos e os métodos de passos múltiplos. A seguir serão apresentadas três modificações do método de Euler que pertencem a estas categorias.

Assim como para o método de Euler, o objetivo continua sendo buscar uma solução aproximada para o PVI:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \qquad\qquad y(t_0) = y_0$$

1 Método de Euler Aprimorado (Fórmula de Heun)

Este método faz parte da categoria de passos múltiplos, onde os valores da derivada em mais de um ponto são utilizados para determinar o próximo ponto.

A fórmula de Heun é uma modificação simples do método de Euler e consiste em uma abordagem preditiva-corretiva. O passo inicial consiste determinar um valor preditor com base no método de Euler:

$$y^*_{n+1} = y_n + \Delta t \cdot f(t_n, y_n)$$

A partir deste valor, é calculada uma etapa corretora com base no valor médio da função avaliada em y_n e no valor preditor y^*_{n+1}:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2} \cdot (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y^*_{n+1}))$$

Esta fórmula representa uma correção do valor estimado anteriormente y^*_{n+1}.

Para implementar computacionalmente este método, pode-se utilizar a mesma estrutura geral apresentada para o método de Euler, sendo necessário somente modificar o passo 4:

Passo 4: Para $i = 1$ até $i = n$ calcular:

$$k1 = f(t[i], y[i])$$
$$yp[i+1] = y[i] + \Delta t \times k_1$$
$$t[i+1] = t[i] + \Delta t$$
$$k2 = f(t[i+1], yp[i+1])$$
$$y[i+1] = y[i] + (\Delta t/2)(k1 + k2)$$

Exemplo 01) Repita o exemplo visto anteriormente utilizando a fórmula de Euler aprimorada.

Lembrando do PVI ($\Delta t = 0.2$):

$$\frac{dy}{dt} = 2t^2y^2 \qquad\qquad y(0) = 1$$

A resolução com o método de Euler modificado envolve mais etapas:

- Passo 1:

$$k1 = f(t_0, y_0) = 0 \qquad yp_1 = y_0 + \Delta t \cdot k1 = 1 \qquad t_1 = t_0 + \Delta t = 0.2$$

$$k2 = f(t_1, yp_1) = 0.08 \qquad y_1 = y_0 + (\Delta t/2) \cdot (k1 + k2) = 1.008$$

- Passo 2:

$$k1 = f(t_1, y_1) = 0.08128 \qquad yp_2 = y_1 + \Delta t \cdot k1 = 1.0243 \qquad t_2 = t_1 + \Delta t = 0.4$$

$$k2 = f(t_2, yp_2) = 0.3357 \qquad y_2 = y_1 + (\Delta t/2) \cdot (k1 + k2) = 1.0497$$

- Passo 3:

$$k1 = f(t_2, y_2) = 0.35259 \qquad yp_3 = y_2 + \Delta t \cdot k1 = 1.1202 \qquad t_3 = t_2 + \Delta t = 0.6$$

$$k2 = f(t_3, yp_3) = 0.90349 \qquad y_3 = y_2 + (\Delta t/2) \cdot (k1 + k2) = 1.1753$$

- Passo 4:

$$k1 = f(t_3, y_3) = 0.99456 \qquad yp_4 = y_3 + \Delta t \cdot k1 = 1.3742 \qquad t_4 = t_3 + \Delta t = 0.8$$

$$k2 = f(t_4, yp_4) = 2.4172 \qquad y_4 = y_3 + (\Delta t/2) \cdot (k1 + k2) = 1.5165$$

- Passo 5:

$$k1 = f(t_4, y_4) = 2.94371 \qquad yp_5 = y_4 + \Delta t \cdot k1 = 2.1052 \qquad t_5 = t_4 + \Delta t = 1$$

$$k2 = f(t_5, yp_5) = 8.8637 \qquad y_5 = y_4 + (\Delta t/2) \cdot (k1 + k2) = 2.6973$$

Para comparação, a solução exata para $t = 0.8$ é $y = 1.5182$ e para $t = 1$ é $y = 3$.

2 Método de Euler Implícito (Inverso)

O método de Euler explícito utiliza a inclinação da reta tangente no ponto n para estimar o valor da solução no ponto $n + 1$:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \cdot (f(t_n, y_n))$$

De forma alternativa, poderia-se utilizara a inclinação da reta tangente no próprio ponto $n + 1$. Esta formulação dá origem ao método de Eulet implícito ou inverso ou regressivo:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \cdot (f(t_{n+1}, y_{n+1}))$$

Como a variável y_{n+1} aparece nos dois lados da igualdade, pode ser necessário utilizar algum método iterativo para a resolução do problema, caso não seja possível explicitar o valor y_{n+1}. Para EDO's lineares sempre é possível isolar y_{n+1}, no entanto para não-lineares isso usualmente não é possível.

Esta formulação representa um método implícito, pois a variável y_{n+1} depende implicitamente dela mesmo. Assim como a formulação explícita, este método representa uma aproximação de primeira ordem, porém, como será visto nas próximas aulas, os métodos implícitos possuem uma grande vantagem sobre os explícitos em relação à *estabilidade* do método.

Exemplo 02) Resolva o seguinte PVI utilizando o método de Euler implícito, com $\Delta t = 0.1$ até $t = 0.3$:

$$\frac{dy}{dt} = t^2 + ty \qquad\qquad y(0) = 1$$

3 Regra do Ponto Médio

Lembrando da Fórmula de Taylor com o resto de Lagrange:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t\, y'(t_n) + \frac{\Delta t^2}{2!} y''(c)$$

Quando os termos de segunda ordem são desconsiderados, obtém-se o método de Euler explícito. Uma maneira de se conseguir uma aproximação mais precisa (com maior ordem) é considerar um maior número de termos na expansão. Por exemplo, caso o termo de terceira ordem também for considerado, temos que:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t\, y'(t_n) + \frac{\Delta t^2}{2!} y''(t_n) + \frac{\Delta t^3}{3!} y'''(c)$$

onde novamente $c \in (t_n, t_{n+1})$.

De forma semelhante, pode-se substituir Δt por $-\Delta t$ para se obter uma aproximação para y_{n-1}:

$$y_{n-1} = y_n - \Delta t\, y'(t_n) + \frac{\Delta t^2}{2!} y''(t_n) - \frac{\Delta t^3}{3!} y'''(d)$$

onde $d \in (t_{n-1}, t_n)$.

Fazendo a expansão para y_{n+1} menos a expansão para y_{n-1}:

$$y_{n+1} - y_{n-1} = 2\Delta t y'(t_n) + \frac{y'''(c) + y'''(d)}{3!} \Delta t^3$$

Novamente, como as derivadas $y'''(c)$ e $y'''(d)$ são dois escalares, a relação anterior pode ser expressa como:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\Delta t y'(t_n) + O(\Delta t^3)$$

Desconsiderando os termos de terceira ordem:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\Delta t y'(t_n)$$

Esta relação é conhecida como regra do ponto médio e representa uma aproximação de segunda ordem para y_{n+1}. Esta fórmula depende do conhecimento do valor da variável em três pontos, por isso não pode ser utilizara para determinar y_1, já que y_{-1} não existe. Outra relação pode ser utilizada para determinar o ponto y_1, e a relação anterior pode ser usada para os demais pontos.

Comparando com o método de Euler explícito:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t y'(t_n) \qquad \rightarrow \qquad y'(t_n) = \frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t}$$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\Delta t y'(t_n) \qquad \rightarrow \qquad y'(t_n) = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2\Delta t}$$

Exemplo 07:) Utilize a regra do ponto médio para resolver o seguinte PVI até $t = 0.3$, utilizando $\Delta t = 0.1$:

$$\frac{dy}{dt} = y + 2t + t^2 \qquad\qquad y(0) = 1$$

Para avaliar o primeiro ponto, pode-se utilizar alguma formulação distinta. Como a regra do ponto médio é um método de segunda ordem, é recomendável a utilização de outro método de segunda ordem para não haver uma perda muito grande de precisão.

Utilizando o método de Euler aprimorado:

$$k1 = f(t_0, y_0) = 1$$

$$yp_1 = y_0 + \Delta t \cdot k1 = 1.1$$

$$t_1 = t_0 + \Delta t = 0.1$$

$$k2 = f(t_1, y_1) = 1.31$$

$$y_1 = y_0 + (\Delta t/2)(k1 + k2) = 1.1155$$

A partir dos valores conhecidos para y_0 e y_1, pode-se agora determinar os demais pontos:

$$y_2 = y_0 + 2\Delta t f(t_1, y_1) = 1 + 2 \cdot 0.1 \cdot (1.1155 + 2 \cdot 0.1 + 0.1^2) = 1.2651$$

$$y_3 = y_1 + 2\Delta t f(t_2, y_2) = 1.1155 + 2 \cdot 0.1 \cdot (1.2651 + 2 \cdot 0.2 + 0.2^2) = 1.4565$$

4 Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta (RK) utilizam a aproximação em série de Taylor para obter formulações de alta ordem sem necessitar o cálculo das derivadas de alta ordem. De forma geral, estes métodos podem ser expressos de forma geral como:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t \phi(t_i, y_i, \Delta t)$$

onde a função $\phi(t_i, y_i, \Delta t)$ é chamada de *incremento* e pode ser interpretada como uma representação da inclinação no intervalo entre t_i e t_{i+1}. Como esta função só depende de pontos já conhecidos, os métodos de Runge-Kutta clássicos são explícitos.

Para um método de ordem n, a função incremento costuma ser expressa na seguinte forma:

$$\phi(t_i, y_i, \Delta t) = a_1 k_1 + a_2 k_2 + a_3 k_3 + \ldots + a_n k_n$$

onde a_1, a_2, $a_3, \ldots, a_n$ são constantes e os termos k_i são dados por:

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_i, y_i) \\
k_2 &= f(t_i + p_1 \Delta t, y_i + q_{11} k_1 \Delta t) \\
k_3 &= f(t_i + p_2 \Delta t, y_i + q_{21} k_1 \Delta t + q_{22} k_2 \Delta t) \\
&\vdots \\
k_n &= f(t_i + p_{n-1} \Delta t, y_i + q_{n-1,1} k_1 \Delta t + q_{n-1,2} k_2 \Delta t + \ldots + q_{n-1,n-1} k_{n-1} \Delta t)
\end{aligned}$$

onde os termos p_i e q_{ij} são constantes. Como pode ser observado, a determinação do parâmetros k_n depende os valores k_i onde $i < n$.

Por exemplo, para um método de primeira ordem a função incremento é avaliada como:

$$\phi(t_i, y_i, \Delta t) = a_1 k_1$$

onde $k_1 = f(t_i, y_i)$. Substituindo na expressão para a forma geral dos métodos de Runge-Kutta:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t(a_1 f(t_i, y_i))$$

Os métodos RK estão baseados diretamente na expansão em série de Taylor em torno do ponto y_i. Como visto anteriormente, a expansão de primeira ordem resulta em:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t f(t_i, y_i)$$

Comparando os termos semelhantes com a equação anterior, observa-se que $a_1 = 1$. O método de Runge-Kutta de primeira ordem corresponde, de fato, ao método de Euler.

4.1 Método de Runge-Kutta de 2^a Ordem

Considere agora que se deseja obter uma aproximação de segunda ordem. Neste caso, temos que:

$$y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2)\Delta t$$

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + p_1 \Delta t, y_i + q_{11} k_1 \Delta t)$$

Para determinar os valores de a_1, a_2, p_1 e q_{11} pode-se primeiramente avaliar a expansão em séries de Taylor de segunda ordem em torno de y_i é dada por:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t f(t_i, y_i) + \frac{df}{dy}\frac{\Delta t^2}{2}$$

Considerando que $f = f(t, y)$, a derivada *total* de f em relação a t é dada por:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dt}$$

Substituindo na expressão anterior:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t f(t_i, y_i) + \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dt}\right)\frac{\Delta t^2}{2}$$

Utilizando um procedimento semelhante, pode-se utilizar a expansão em séries de Taylor para expandir a própria função $f(t, y)$. Lembrando, para uma função de duas variáveis, a expansão em série de Taylor é dada por:

$$f(x, y) = f(x_0, y_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(x - x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(y - y_0) +$$
$$\frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x - x_0)^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x - x_0)(y - y_0) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(y - y_0)^2\right) + \dots$$

De forma equivalente, pode-se avaliar a função em um ponto qualquer $f(x + a, y + b)$ com base no valor de $f(x, y)$. Considerando uma aproximação de primeira ordem:

$$f(x + a, y + b) = f(x, y) + \frac{\partial f}{\partial x}a + \frac{\partial f}{\partial y}b$$

Assim, considerando a definição de k_2, o termo $f(t_i + p_1 \Delta t, y_i + q_{11} k_1 \Delta t)$ pode ser expresso como:

$$k_2 = f(t_i + p_1 \Delta t, y_i + q_{11} k_1 \Delta t) = f(t_i, y_i) + p_1 \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + q_{11} k_1 \Delta t \frac{\partial f}{\partial y}$$

Substituindo os valores de k_1 e k_2 na expressão para $y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2)\Delta t$ e colocando os termos de mesma ordem em evidência:

$$y_{i+1} = y_i + (a_1 f(t_i, y_i) + a_2 f(t_i, y_i))\Delta t + \left(a_2 p_1 \frac{\partial f}{\partial t} + a_2 q_{11} f(t_i, y_i) \frac{\partial f}{\partial y} \right) \Delta t^2$$

Comparando com a equação obtida anteriormente:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t f(t_i, y_i) + \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} \right) \frac{\Delta t^2}{2}$$

Igualando os coeficientes com os termos de mesma ordem, observa-se que as seguintes relações devem ser satisfeitas:

$$a_1 + a_1 = 1$$

$$a_2 p_1 = 1/2$$

$$a_2 q_{11} = 1/2$$

Este sistema possui três equações e quatro variáveis, portanto não existe solução única. No entanto, a partir do momento em que um dos valores é especificado, os demais podem ser calculados. Isto implica que existem infinitas formulações para o método de Runge-Kutta de segunda ordem.

4.1.1 Euler Modificado ($a_2 = 0.5$)

Assumindo que $a_2 = 0.5$, obtém-se que $a_1 = 0.5$ e $p_1 = q_{11} = 1$. Assim, o método de Runge-Kutta de segunda ordem resulta em:

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + \Delta t, y_i + k_1 \Delta t)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{(k_1 + k_2)}{2} \Delta t$$

Este método corresponde ao método de Euler modificado (fórmula de Heun).

4.1.2 Regra do Ponto Médio ($a_2 = 1$)

Fazendo $a_2 = 1$, temos que $a_1 = 0$ e $p_1 = q_{11} = 1/2$:

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + \Delta t/2, y_i + k_1 \Delta t/2)$$

$$y_{i+1} = y_i + k_2 \Delta t$$

Esta formulação corresponde ao método de Euler modificado com base na regra do ponto médio.

4.1.3 Método de Ralston ($a_2 = 2/3$)

Fazendo $a_2 = 2/3$, os demais valores são avaliados como $a_1 = 1/3$ e $p_1 = q_{11} = 3/4$:

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + 3\Delta t/4, y_i + 3k_1\Delta t/4)$$

$$y_{i+1} = y_i + (k_1/3 + 2k_2/3)\Delta t$$

Esta formulação é chamada de Método de Ralston

4.2 Método de Runge-Kutta de 4^a Ordem

Seguindo o mesmo procedimento mostrado anteriormente para uma aproximação de quarta ordem, obtém-se o método RK4. Este é possivelmente o método mais empregado para a resolução de PVI's, devido a sua alta precisão e por ser um método explícito.

Neste caso, os parâmetros k_1, k_2, k_3 e k_4 são avaliados como:

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + \Delta t/2, y_i + k_1\Delta t/2)$$

$$k_3 = f(t_i + \Delta t/2, y_i + k_2\Delta t/2)$$

$$k_4 = f(t_{i+1}, y_i + k_3\Delta t)$$

Com base nestes valores, o ponto y_{n+1} é avaliado como:

$$y_{n+1} = y_n + (1/6)(k1 + 2 \cdot k2 + 2 \cdot k3 + k4)$$

A utilização de passos de tempo Δt constantes para todos os casos possui uma série de desvantagens, especialmente porque em muitos casos a equação pode precisar de valores muito pequenos para manter a precisão em alguns pontos, enquanto que em outros pontos valores maiores poderiam ser utilizados para reduzir o número de cálculos realizados.

Muitos softwares utilizam uma abordagem que determina localmente o tamanho necessário para os passos, através da comparação dos resultados obtidos com RK4 e uma formulação de Runge-Kutta de quinta ordem (ex. ode45 do Matlab).

Exemplo 08:) Utilize o método RK4 para resolver o seguinte PVI, adotando $\Delta t = 0.1$ até $t = 0.3$:

$$\frac{dy}{dt} = -y + 2t \qquad\qquad y(0) = 2$$