

José Antonio Menoni

Técnicas para a Construção de Interpolantes,
Associadas à Método de Runge-Kutta



UNESP - Universidade Estadual Paulista

IBILCE - Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas

DCCE - Departamento de Ciências de Computação e Estatística

**TÉCNICAS PARA A CONSTRUÇÃO DE INTERPOLANTES, ASSOCIADAS A
MÉTODO DE RUNGE-KUTTA**

JOSÉ ANTONIO MENONI

Dissertação apresentada ao DCCE/IBILCE/UNESP-SP,
como parte dos pré-requisitos para obtenção do título de
mestre em Ciências Matemática - área de concentração:
Matemática Aplicada e Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins



695/95

SÃO JOSÉ DO RIO PRETO

1994

ABSTRACT

The aim of this work is to analyse techniques to the interpolates construction, associate to explicit and embedded pairs of Runge-Kutta method . Such techniques permit the determination to the exact solution of the initial value problem not only at the end of each integration step, but also in internal points to this step. Associated to each one of these tecniques we tried to show a procedure which allow to estimate the local approaching error, whose order will be always equivalent to the Runge-Kutta one used.

RESUMO

O objetivo desse trabalho é abordar técnicas para a construção de interpolantes, associados a pares de métodos de Runge-Kutta explícitos e embutidos. Tais técnicas possibilitam a determinação de aproximantes para a solução exata do problema valor inicial não somente ao final de cada passo de integração, mas também em pontos internos a esse passo. Associado a cada uma dessas técnicas, procuramos mostrar um procedimento que permita estimar o erro local da aproximante, cuja ordem será sempre equivalente à do método de Runge-Kutta utilizado.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	4
----------------------	---

CAPÍTULO I - Definições e Conceitos Básicos

I.1 - Equações Diferenciais Ordinárias	7
I.2 - Alguns resultados sobre desenvolvimento em Série de Taylor	8
I.3 - Interpolação polinomial	10

CAPÍTULO II - Métodos de Runge-Kutta

II.1 - Introdução	13
II.2 - Método de Runge-Kutta	13
II.3 - Erro de Truncamento Local	15
II.4 - Ordem de consistência.	17
II.5 - As condições de ordem	18
II.6 - Condições de ordem para $p=5$	20
II.7 - As condições de simplificação	22

CAPÍTULO III - Métodos de Runge-Kutta com fator escala

III.1 - Introdução	27
III.2 - Métodos com fator de escala	28
III.3 - A construção do método	31
III.4 - Um método com fator de escala	34
III.5 - Considerações finais	36

BIBLIOGRAFIA



CAPÍTULO IV - Interpolação de Hermite associado a um método de Runge-Kutta

IV.1 - Introdução	37
IV.2 - O Problema	37
IV.3 - A Construção do interpolante	40
IV.4 - A ordem da interpolante	41
IV.5 - O Interpolante e os métodos com fator de escala .	44
IV.6 - Considerações finais	46

CAPÍTULO V - Um processo contínuo para a obtenção de aproximantes

V.1 - Introdução	47
V.2 - A Construção do método.	47
V.3 - O Método de Runge-Kutta de ordem 4	57
V.4 - Uma combinação conveniente para os k_i 's	58
V.5 - Considerações finais	61

CAPÍTULO VI - Métodos de Runge-Kutta e interpolante com ordem elevada

VI.1 - Introdução	62
VI.2 - Preliminares	62
VI.3 - A construção da interpolante.	64
VI.4 - A estimativa do erro local	72
VI.5 - Consideração final	74

CAPÍTULO VII - Considerações finais 75

BIBLIOGRAFIA 79

INTRODUÇÃO

Uma linha de pesquisa que ocupa um papel de destaque na Análise Numérica é a da investigação de modelos discretos que bem representem modelos matemáticos contínuos que de alguma forma traduzam um problema concreto, especialmente nas áreas de física, química, biologia e engenharia.

Uma grande quantidade desses modelos, são o que a literatura define como problemas de valor inicial para equações diferenciais ordinárias (p.v.i.) explicitados na forma:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)) \\ y(a) = y_0 \end{cases} \quad \text{para } x \in [a, b]$$

Apesar de sua importância, nem sempre é possível explicitar sua solução $y(x)$, muito embora se verifiquem todas as hipóteses que garantam a existência e unicidade da solução. Isto torna bastante interessante a tentativa de uma aproximação para a solução do p.v.i, em pontos do intervalo de sua existência.

Este trabalho tem como objetivo apresentar técnicas para a construção de interpolantes, associadas a métodos de Runge-Kutta explícitos, possibilitando, assim, a obtenção de um aproximante não apenas ao final do passo de integração, mas também em pontos internos ao passo. Ainda, tais técnicas interpolatórias permitem determinar uma estimativa para o erro local.

No capítulo I, apresentamos resultados básicos relacionados



com a existência e unicidade da solução do problema valor inicial, o desenvolvimento de funções de duas variáveis em série de Taylor, além de abordarmos os problemas de interpolação de Hermite e de Hermite-Birkoff.

No capítulo II, são apresentados conceitos básicos relativos aos métodos de Runge-Kutta, bem como as condições para a construção de um método de Runge-Kutta com ordem 5, utilizando-se o que a literatura denomina de condições de simplificação.

No capítulo III, abordamos uma técnica desenvolvida por [Horn-1983], que permite determinar aproximantes em pontos $x=x_n+\sigma h$, $\sigma \in (0,1]$ internos ao passo de integração, e ainda consideramos o controle do erro local.

No capítulo IV, consideramos um método de Runge-Kutta explícito com ordem p e usando da possibilidade de determinar aproximações internas ao passo de integração com a mesma ordem p do método considerado, analisamos a construção através do polinômio interpolador de Hermite, de um interpolante que seja de classe C^1 e que gere aproximantes também de ordem p .

No capítulo V, é analisada a existência de um polinômio $P(x)$ devido a Sarafyan-1988, que aproxima a solução exata $y(x)$ com ordem 5, em qualquer ponto fixo interno ao intervalo de integração. A construção desse polinômio exige a cada passo 6 avaliações da derivada. Nos pontos localizados entre o ponto inicial do passo e o ponto fixado a aproximação é de ordem 4.



Como os quatro primeiros estágios são comuns a todo polinômio da família, podemos ajustar o passo e estimar o erro de forma computacionalmente vantajosa.

No capítulo VI, apresentamos uma técnica proposta por Shampine e Bogacki, em 1990, que consideram a possibilidade de, a partir de um método de Runge-Kutta conhecido gerar uma nova aproximação para a solução, mas que apresente um parâmetro para a redefinição do tamanho do passo. A grande vantagem dessa técnica está no fato de que para a obtenção da nova aproximação utilizamos os mesmos estágios considerados no método de Runge-Kutta básico.

Ainda, analisamos o problema de controle do erro local da nova aproximação.

CAPÍTULO I

Definições e Conceitos Básicos

I.1 - Equações Diferenciais Ordinárias

Consideremos o sistema de equações diferenciais ordinárias (E.D.O).

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad (1-1)$$

onde $f: [a, b] \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$. Uma solução de (1-1) é uma função $y \in C^1([a, b], \mathbb{R}^n)$, a qual satisfaz (1-1) para todo $x \in [a, b]$. Se além disso, impusermos:

$$y(a) = y_0 \quad (1-2)$$

o par (1-1) e (1-2) constitui o que se denomina um problema de valor inicial (P.V.I.).

Quanto à existência e unicidade da solução do P.V.I., esta é assegurada pelo seguinte teorema, que se encontra em [Lambert-1991]. (enunciado para $n=1$)

Teorema I.1 - Seja $f(x, y)$ definida e contínua em todo ponto de $D = \{(x, y) / a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty\}$. Seja $L > 0$ uma constante tal que para todos x, y, y' com (x, y) e $(x, y') \in D$, tem-se:



$$|f(x, y) - f(x, y')| \leq L |y - y'| \quad (1-3)$$

Então, se y_0 é um número qualquer dado, existe uma única solução $y(x)$ do P.V.I., definido por (1-1) e (1-2) onde $y(x)$ é contínua e diferenciável para todo $(x, y) \in D$.

A desigualdade (1-3) é conhecida como condição de Lipschitz e a constante L como constante de Lipschitz de $f(x, y)$ em relação a y .

Vale ainda registrar que se $f(x, y)$ for continuamente diferenciável em relação a y para todo ponto $(x, y) \in D$, então $f(x, y)$ satisfaz à condição de Lipschitz em relação a y para todo $(x, y) \in D$. Esta por sua vez garante a continuidade de $f(x, y)$ em relação a y para todo $(x, y) \in D$.

I.2 - Alguns resultados sobre desenvolvimento em Série de Taylor

Neste trabalho será considerado em vários momentos o desenvolvimento de funções em série de Taylor. Basicamente precisaremos do desenvolvimento de funções de uma e duas variáveis, cujos resultados apresentamos a seguir.

Teorema I.2 - Sejam $f \in C^n[a, b]$, $x_0 \in [a, b]$ e ainda $f^{(n+1)}$ existe em $[a, b]$. Então para qualquer $x \in [a, b]$, existe $\xi(x)$ entre x_0 e x com $f(x) = P_n(x) + R_n(x)$ onde:



$$P_n(x) = f(x_0) + f^{(1)}(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2}f^{(2)}(x_0)(x-x_0)^2 +$$

$$+ \frac{1}{6}f^{(3)}(x_0)(x-x_0)^3 + \dots + \frac{1}{(n)!}f^{(n)}(x_0)(x-x_0)^n$$

(1-4)

$$R_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)(x-x_0)^{(n+1)}$$

Teorema I.3 - Suponha que $f(x,y)$ e todas suas derivadas

parciais de ordem menor ou igual a $n+1$ sejam contínuas em

$D = \{(x,y) / a \leq x \leq b, c \leq y \leq d\}$. Para qualquer $(x,y) \in D$, existe $\xi \in [x, x_0]$ e

$\eta \in [y, y_0]$, com $f(x,y) = P_n(x,y) + R_n(x,y)$, onde:

$$P_n(x,y) = f(x_0, y_0) + \left\{ \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)(x-x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)(y-y_0) \right\} +$$

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

$$+ \frac{1}{n!} \sum_{i=1}^n (x-x_0)^{n-i} (y-y_0)^i \frac{\partial^n f}{\partial x^{n-i} \partial y^i}(x_0, y_0)$$

$$R_n(x,y) = \frac{1}{(n+1)!} \sum_{j=0}^{n+1} (x-x_0)^{n+1-j} (y-y_0)^j \frac{\partial^{n+1} f}{\partial x^{n+1-j} \partial y^j}(\xi, \eta)$$

Podemos considerar para as expressões das derivadas parciais

de $f(x,y)$, a seguinte notação, encontradas em [Diran Sarafyan-

1984]:

$$D^{(n)} f = \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} f^{(j)} \cdot_{n-j} f_j$$

(1-5)

$$D^{(n)} f_i = \sum_{j=0}^n f^{(j)} \cdot_{n-j} f_{i+j}$$

$$f_{,q} = \frac{\partial^{n+q} f}{\partial x^n \partial y^q}$$

$$f_{,p} = \frac{\partial^p f}{\partial x^p}$$

$$f_{,q} = \frac{\partial^q f}{\partial y^q}$$

Além dessa notação introduziremos duas outras relações devidas a [Huta-1956] dadas por:

$$(D^{(n)} f)' = D^{(n+1)} f + n D^{(n-1)} f_1 Df' \quad (1-6)$$

$$D^{(n)} f_i' = D^{(n+1)} f_i + n D^{(n-1)} f_{i+1} Df$$

I.3 - Interpolação polinomial

Dado um conjunto $G = \{g_0, g_1, \dots, g_n\}$ de funções linearmente independentes e n vezes continuamente diferenciáveis em $[a, b]$, e valores $c_{i,k}$ para $i=1(1)m$ e $k=0(1)n$, a obtenção de um polinômio

$$P(x) = \sum_{j=0}^n a_j g_j(x)$$

com a_j real, tal que para valores $x_i \in [a, b]$ e k inteiro positivo

$$P^{(k)}(x_i) = c_{i,k}$$

é conhecido como **problema de interpolação polinomial**.

Esse problema pode ser caracterizado através de um conjunto $X = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$, com $x_1 < x_2 < \dots < x_m$, o conjunto G definido

anteriormente e de uma matriz $E = (e_{i,k})$ com m linhas e $n+1$ colunas, $m \geq 1$ e $n \geq 0$, tal que:

$$1) e_{i,k} = 0 \text{ ou } e_{i,k} = 1$$

$$2) \sum e_{i,k} = n+1, \text{ para qualquer } i, k \quad (1-7)$$

$$3) \text{ Para todo } i, i=1(1)m, \text{ existe } e_{i,k} = 0$$

Seja $E = \{(i,k)/e_{i,k}=1\}$. Logo, (X,G,E) caracteriza o problema de interpolação polinomial (1-6) e dizemos que E é a matriz de interpolação do problema.

Considere os dados $c_{i,k}$ como sendo os valores assumidos por uma função conhecida $y(x)$ e suas derivadas, isto é,

$$c_{i,k} = y^{(k)}(x_i) = y_i^{(k)}.$$

Uma classe importante pode ser obtida quando além de (1-7), os elementos de E verificam a seguinte propriedade:

$$\text{se } e_{i,k}=1 \text{ e } 0 \leq k' \leq k \text{ então } e_{i,k'}=1.$$

Assim, temos que (1-7) se verifica para $y(x_i)$ e um certo número de derivadas consecutivas $y_i^{(k)}$, $k=1(1)n_i-1$, constituindo os chamados **problemas de interpolação de Hermite**.

Um caso particular é quando tomamos E tal que para todo i , $e_{i,0}=1$ e $e_{i,k}=0$ se $k>0$. Portanto teremos na matriz de interpolação $m=n+1$ e (1-7) constitui a classe dos **problemas de interpolação de Lagrange**, um caso particular dos problemas de Hermite.

Assim $p(x)$ pode ser escrito de forma análoga aos polinômios de Lagrange como:

$$p(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{n_i-1} L_{i,k}(x) y_i^{(k)}$$

onde L_{ik} são os polinômios generalizados de Lagrange, [Burden-Faires] definidos pelas relações a seguir:

Para $0 \leq i \leq m$ e $0 \leq k \leq n_i$

$$\left\{ \begin{array}{l} l_{ik}(x) = \frac{(x - x_i)^k}{k!} \prod_{j=0}^m \left[\frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \right]^{n_j} \quad j \neq i \\ \left\{ \begin{array}{ll} L_{i, n_i}(x) = l_{i, n_i-1}(x) & \text{para } i=0(1)m, \quad k=n_i-1 \\ L_{ik}(x) = l_{i,k}(x) - \sum_{r=k+1}^{n_i-1} l_{ik}^{(r)}(x_i) L_{i, r} & k=n_i-2, n_i-3, \dots, 0 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

CAPÍTULO II

Métodos de Runge-Kutta

II.1 - Introdução

Neste capítulo pretendemos abordar os métodos de Runge- Kutta, considerando os conceitos de ordem de consistência, erro de truncamento local, erro local e as chamadas "condições de simplificação".

II.2 - Método de Runge-Kutta.

Seja o problema valor inicial (p.v.i.) definido por (1-1) e (1-2) onde f satisfaz às hipótese do teorema I.1, isto é, temos garantia de existência e unicidade da solução $y(x)$ do p.v.i.

Vamos admitir neste trabalho que $y(x)$ é suficiente continuamente diferenciável.

Seja y_{n+1} uma aproximação para a solução exata $y(x)$ em $x=x_{n+1}$, cuja determinação é possível através de métodos numéricos que considerem uma discretização do intervalo $[a,b]$ em pontos $x_{n+1}=x_n+h_n$, $n=0,1,2,\dots$, com $x_0 \geq a$. Observe que h_n significa que seu tamanho pode ser alterado a cada passo, porém, por simplicidade de notação daqui em diante usaremos simplesmente h em lugar de h_n .

Consideraremos aqui a classe de métodos de discretização definida a seguir.



Definição - 2.1

Sejam s um número inteiro positivo e a_i, b_{ij}, c_i , números reais. Denomina-se **método de Runge-Kutta com s estágios** ao algoritmo definido por:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s c_i \cdot k_i, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (2-1-a)$$

onde

$$k_i = f(x_n, y_n) \quad (2-1-b)$$

e

$$k_i = f(x_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s b_{ij} k_j), \quad i=2(1)s \quad (2-1-c)$$

com

$$a_i = \sum_{j=1}^s b_{ij}, \quad i=1(1)s, \quad 0 \leq a_i \leq 1 \quad e$$

$$\sum_{i=1}^s c_i = 1$$

Um método de Runge-Kutta é caracterizado pelos coeficientes a_i, b_{ij}, c_i que usando uma notação devido a Butcher, representamos através da tabela:

a_1	b_{11}	b_{12}	$\dots$	b_{1s}
a_2	b_{21}	b_{22}	$\dots$	b_{2s}
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
a_s	b_{s1}	b_{s2}	$\dots$	b_{ss}
	c_1	c_2	$\dots$	c_s

ou ainda na forma matricial:

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{a} & \mathbf{B} \\ \hline & \mathbf{c}^t \end{array}$$

onde $\mathbf{a}=(a_i)$, $\mathbf{B}=(b_{ij})$ e $\mathbf{c}=(c_i)$.

Dizemos que um método de Runge Kutta é explícito se $b_{ij}=0$ para $i \leq j$, e é implícito se para algum $i < j$, $b_{ij} \neq 0$.

Na prática, torna-se importante a avaliação de que os aproximantes y_{n+1} para $y(x_{n+1})$ obtidos por (2-1), tenham uma determinada precisão ϵ . Para que se possa avaliar essa informação vamos introduzir os conceitos de erro de truncamento local, erro local e de ordem de consistência de um método de Runge-Kutta.

II.3 - Erro de Truncamento Local

Denomina-se **erro de truncamento local** (E.T.L) de um método de Runge-Kutta ao valor t_{n+1} , obtido pela expressão:

$$t_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - hg(x_n, y(x_n), h) \quad (2-2-a)$$

onde

$$g(x_n, y(x_n), h) = \sum_{i=1}^s c_i k_i \quad (2-2-b)$$

onde as derivadas k_i 's, definidas por (2-1-b/c) são também avaliadas a solução exata.

Podemos considerar o p.v.i. redefinido localmente por:

$$\begin{cases} u'_n = f(x, u_n) \\ u_n(x_n) = y_n \end{cases} \quad (2-3)$$

Isto é equivalente a assumir que ao integrarmos numericamente o p.v.i. (1-1) e (1-2) de x_n para x_{n+1} temos $y(x_n) = y_n$. Daí, podemos em (2-2-a), considerar $g(x_n, y_n, h)$ ao invés de $g(x_n, y(x_n), h)$, que juntamente com (2-1-a) nos dá:

$$t_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1} \quad (2-4)$$

Essa expressão nos fornece o que denominamos de **erro local**. Para diferenciar a notação daqui em diante substituiremos t_{n+1} por T_{n+1} , quando a hipótese para o erro local estiver sendo considerada.

Considerando a expansão em série de Taylor da função f em torno do ponto $(x_n, y(x_n))$ obtemos para o erro local uma expressão em potências de h , dada por:

$$T_{n+1} = \sum_{j=1}^{\infty} h^j \sum_{k=1}^{\lambda_j} l_k^{(j)} D_k^{(j)} \quad (2-5)$$

onde:

$l_k^{(j)}$, são valores que dependem apenas dos coeficientes das fórmulas de Runge-Kutta.



$D_k^{(j)}$, são expressões que envolvem as derivadas parciais de f , avaliadas em $(x_n, y(x_n))$, denominadas diferenciais elementares.

Vale registrar que a expressão para o erro de truncamento local em potências de h será análoga à fornecida por (2-5).

II.4 - Ordem de consistência.

Dizemos que um método de Runge-Kutta definido por (2-1) tem **ordem de consistência p** , com p inteiro positivo, se tivermos em (2-5):

$$l_k^{(j)} = 0 \quad \text{para} \quad j = 1(1)p \quad \text{e} \quad k = 1(1)\lambda_j, \quad (2-6)$$

Logo, quando o método tem ordem p , podemos reescrever (2-5) como:

$$T_{n+1} = h^{p+1} \sum_{k=1}^{\lambda_{n+1}} l_k^{(p+1)} D_k^{(p+1)} + O(h^{p+2}) \quad (2-7)$$

Considerando as equações (2.2) e (2.3) podemos avaliar a precisão da aproximação y_{n+1} em cada passo da integração em função do tamanho de h . Uma técnica hoje bastante considerada para medir essa precisão consiste em utilizar a cada passo dois métodos de Runge-Kutta, sendo um de ordem p e o outro de ordem q , com $q > p$, que fornecem respectivamente aproximantes y_{n+1} e y_{n+1}^* para a solução exata $y(x_{n+1})$. Considerando (2-4), podemos tomar como uma estimativa válida para o erro local da aproximação de ordem p , o valor **est** dado por:



$$\text{est} = y_{n+1}^* - y_{n+1} \quad (2-8)$$

Para um melhor entendimento dessa diferença como estimativa para o erro indicamos por exemplo [Lambert-1991].

Assim, com o uso de uma norma específica podemos testar se:

$$\| \text{est} \| \leq \epsilon$$

onde ϵ é a precisão desejada para a aproximação y_{n+1} .

Se esta desigualdade for verificada concluímos que o tamanho de h , considerado naquele passo, pode ser aceito, pois a precisão desejada será teoricamente alcançada. Caso contrário, o tamanho de h deve ser diminuído e nova tentativa efetuada. Isto é, podemos trabalhar durante a integração com um tamanho de passo variável e ainda assim preservando a cada passo a exigência de precisão desejada pelo usuário. Com isso, podemos explorar, a um custo computacional razoável, uma das grandes vantagens dos métodos de Runge-Kutta, que é a possibilidade de variação do tamanho de h durante a integração.

II.5 - As condições de ordem

As equações (2-5) nos fornecem o que denominamos de **condições de ordem** de um método de Runge-Kutta, pois através delas podemos construir métodos com ordem de consistência p .

Abordaremos, a seguir, o problema da determinação das condições de ordem para a classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos com s estágios e ordem $p \leq 5$. Vamos nos restringir a $p \leq 5$ apenas para simplificar o volume de trabalho, muito embora o raciocínio se aplique a qualquer ordem.

Considerando para a fórmula do método de Runge-Kutta, definido em (2-1), a expansão em série de Taylor de $y(x_{n+1})$, numa vizinhança de $x=x_n$ resulta:

$$y(x_n+h) = y_n + \sum_{i=1}^6 \frac{h^i}{i!} y^{(i)}(x_n) + O(h^6) \quad (2-9)$$

Utilizando a notação simbólica introduzida em (1-6) obtemos:

$$\begin{aligned} y(x_n+h) = & y_n + hf + \frac{1}{2!} h^2 Df + \frac{1}{3!} h^3 [D^{(2)}f + f_1 Df] + \\ & + \frac{1}{4!} h^4 [D^{(3)}f + 3Df_1 Df + f_1 D^{(2)}f + f_1^2 Df] + \\ & + \frac{1}{5!} h^5 [D^{(4)}f + f_1 D^{(3)}f + f_1^2 D^{(2)}f + f_1^3 Df + 4D^{(2)}f Df_1 + \\ & + 6D^{(2)}f_1 Df + 7f_1 Df_1 Df + 3f_2 (Df)^2] + O(h^6) \end{aligned} \quad (2-10)$$

Considerando que de maneira análoga podemos expandir por Taylor os k_i 's dados em (2-1-c) numa vizinhança de $x=x_n$, expressando-os em potências de h e ainda a simplificação:

$$A_{i,r} = \sum_{t=2}^r a_t^i \cdot b_{t,i,r}, \quad i=1(1)s \quad \text{e} \quad r=2(1)s \quad (2-11)$$

usando então em (2-1-a) obtemos:



$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s c_i f + h^2 \sum_{i=1}^s c_i a_i Df +$$

$$h^3 \left\{ \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^s c_i \cdot a_i^2 \right] D^{(2)} f + \left[\sum_{i=2}^s c_i \cdot A_{i-1,1} \right] f_1 Df \right\} +$$

$$+ h^4 \left\{ \left[\frac{1}{6} \sum_{i=1}^s c_i \cdot a_i^3 \right] D^{(3)} f + \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^s c_i \cdot A_{i-1,2} \right] f_1 \cdot D^{(2)} f + \right.$$

$$\left. \left[\sum_{i=2}^s c_i a_i A_{i-1,1} Df_1 Df + \sum_{i=3}^s c_i \sum_{j=1}^{i-1} A_{j,1} b_{i,j+1} \right] f_1^2 \cdot \right] Df \}$$

$$+ h^5 \left\{ \left[\frac{1}{24} \sum_{i=1}^s c_i a_i^4 \right] D^{(4)} f + \right. \quad (2-12)$$

$$+ \left[\frac{1}{6} \sum_{i=1}^s c_i A_{i-1,1} \right] f_1 D^{(3)} f + \frac{1}{2} \left[\sum_{i=3}^s c_i \sum_{j=1}^{i-2} A_{j,2} \cdot b_{i,j+1} \right] f_1^2 D^{(2)} f +$$

$$+ \left[\sum_{i=1}^s c_i \sum_{j=3}^{i-1} b_{i,j} \sum_{m=2}^{j-1} b_{j,m} A_{m-1,1} \right] f_1^3 Df + \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^s c_i a_i A_{i,2} \right] D^{(2)} f Df_1 +$$

$$+ \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^s c_i a_i^2 A_{i-1,1} \right] D^{(2)} f_1 Df + \left[\sum_{i=3}^s c_i \sum_{j=1}^{i-2} (a_{j+1} + a_j) b_{i,j+1} A_{j,1} \right] f_1 Df_1 Df +$$

$$+ \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^s c_i A_{i-1}^2 \right] f_2 (Df)^2 \right\} + O(h^6)$$

Substituindo agora (2-10) e (2-12) em (2-4), obtemos a expressão para o erro local como em (2-5).

II.6 - Condições de ordem para p=5

Conforme (2-6), para que tenhamos métodos com ordem p=5, todos os coeficientes das potências de h^p em (2-12) devem ser nulas, até p=5.

Isto é, a classe dos métodos de Runge-Kutta, explícitos com $p=5$, cujos coeficientes são as soluções do sistema não linear com 16 equações e 21 incógnitas, é dada por:

$$\sum_{i=1}^5 c_i = 1 \quad (2-13-a)$$

$$\sum_{i=1}^5 c_i a_i = \frac{1}{2} \quad (2-13-b)$$

$$\sum_{i=1}^5 c_i a_i^2 = \frac{1}{3} \quad (2-13-c)$$

$$\sum_{i=2}^5 c_i A_{i-1,1} = \frac{1}{6} \quad (2-13-d)$$

$$\sum_{i=1}^5 c_i a_i^3 = \frac{1}{4} \quad (2-13-e)$$

$$\sum_{i=2}^5 c_i A_{i-1,2} = \frac{1}{12} \quad (2-13-f)$$

$$\sum_{i=2}^5 c_i a_i A_{i-1,1} = \frac{1}{8} \quad (2-13-g)$$

$$\sum_{i=3}^5 c_i \sum_{j=1}^{i-1} A_{j,1} b_{i,j+1} = \frac{1}{24} \quad (2-13-h)$$

$$\sum_{i=1}^5 c_i a_i^4 = \frac{1}{5} \quad (2-13-i)$$

$$\sum_{i=4}^5 c_i A_{i-1,1} = \frac{1}{20} \quad (2-13-j)$$

$$\sum_{i=4}^5 c_i A_{j,2} b_{i,j+1} = \frac{1}{60} \quad (2-13-k)$$

$$\sum_{i=2}^3 c_i \sum_{j=3}^{i-1} b_{i,j} \sum_{m=2}^{j-1} b_{j,m} A_{m,1} = \frac{1}{120} \quad (2-13-1)$$

$$\sum_{i=2}^3 c_i a_i A_{i-1,2} = \frac{1}{15} \quad (2-13-m)$$

$$\sum_{i=1}^3 c_i a_i^2 A_{i-1,1} = \frac{1}{10} \quad (2-13-n)$$

$$\sum_{i=3}^3 c_i \sum_{j=1}^{i-2} b_{i,j+1} A_{i,1} (a_i + a_{j+1}) = \frac{7}{120} \quad (2-13-o)$$

$$\sum_{i=1}^3 c_i A_{i-1,1}^2 = \frac{1}{20} \quad (2-13-p)$$

Vale registrar que para a obtenção de um método Runge-Kutta, com ordem 2, devemos considerar apenas as equações (2-13-a/b). Para métodos com ordem 3, além das necessárias para de ordem 2, também devemos considerar as equações (2-13-c/d). E para métodos com ordem 4, além das consideradas para ordem 2 e 3, também as equações (2-13-e/f/g).

II.7 - As condições de simplificação

A fim de simplificar a busca de soluções para o sistema (2-13), podemos considerar outras equações denominadas **condições de simplificação**, conforme Butcher-1987. A utilização de condições de simplificação torna-se, na prática muito interessante, pois permite eliminar, no sistema, algumas das condições de



ordem, tornando assim menos complicada a busca de soluções para o sistema (2-13).

Dentre as condições de simplificação conhecidas, listamos a seguir as que serão usadas neste trabalho:

$$A_{i,j} = \sum_{k=1}^{i-1} a_k^{(j)} b_{i,k} \quad \text{para } i=2(1)s, \quad \text{e } j=1,2. \quad (2-14-a)$$

$$A_{i,j} = \frac{1}{j+1} a_{i+1}^{j+1}; \quad \text{para } i=2(1)s, \quad \text{e } j=1,2. \quad (2-14-b)$$

$$\sum_{j=1}^s c_j b_{i,j} = c_j (1-a_i), \quad \text{para } i=1(1)s \quad (2-14-c)$$

$$\sum_{i=1}^s b_{i,i} a_i = \frac{1}{2} a_i^2 \quad \text{para } i=1(1)s \quad (2-14-d)$$

Vale observar que para a obtenção de métodos explícitos com ordem $p \geq 5$, devemos sempre considerar $c_2=0$, como procuraremos mostrar a seguir.

Subtraindo (2-13-n) da equação (2-13-p) somada com $1/4$ de (2-13-i) e usando a condição de simplificação (2-14-b) e a condição (2-11) obtemos:

$$\sum_{i=1}^s c_i \sum_{j=1}^s (b_{i,j} a_i - \frac{1}{2} a_i^2)^2 = 0 \quad (2-15)$$

Como, sob o ponto de vista computacional, não é interessante trabalharmos com os coeficientes c_i 's assumindo valores negativos, devemos considerar de (2-15) que:



$$(b_{ij}a_j - \frac{1}{2}a_i^2) = 0, \quad i, j = 1(1)s, \quad (2-16-a)$$

ou

$$c_i = 0 \quad (2-16-b)$$

Para $i=2$ temos, $b_{21}a_1 - (1/2)a_2^2 = 0$, como estamos considerando métodos explícitos, então, necessariamente teremos que $a_2=0$, pois a_1 sempre será nulo. Isso implicaria em obtermos, para $p \geq 5$, métodos com um estágio a menos do que o número mínimo, comprovadamente necessário.

Logo, sempre devemos considerar para métodos explícitos com ordem $p \geq 5$ a condição' $c_2=0$.

Com o uso de (2-14) o sistema (2-13) fica reduzido às seguintes equações:

$$\sum_{i=1}^s c_i = 1 \quad (2-17-a)$$

$$\sum_{i=1}^s c_i a_i = \frac{1}{2} \quad (2-17-b)$$

$$\sum_{i=1}^s c_i a_i^2 = \frac{1}{3} \quad (2-17-c)$$

$$\sum_{i=1}^s c_i a_i^3 = \frac{1}{4} \quad (2-17-d)$$

$$\sum_{i=1}^s c_i a_i^4 = \frac{1}{5} \quad (2-17-e)$$

$$\sum_{i=3}^s c_i \sum_{j=1}^{i-1} A_{i,j} b_{i,j+1} = \frac{1}{24} \quad (2-17-f)$$

$$\sum_{i=1}^s c_i \sum_{j=1}^{i-1} b_{i,j+1} A_{j,1} (a_i + a_j) = \frac{7}{120} \quad (2-17-g)$$

$$\sum_{i=1}^s c_i b_{i,i} b_{i,i-1} A_{i-2,1} = \frac{1}{120} \quad (2-17-h)$$

$$\sum_{i=1}^s c_i A_{i,1}^2 = \frac{1}{120} \quad (2-17-i)$$

Vejamos então como algumas das equações de (2-13) tornam-se redundantes quando consideramos (2-14), resultando (2-16).

Usando (2-14-b), a equação (2-13-d) fica reduzida a equação (2-13-c). De fato:

$$1/6 = \sum_{i=2}^s c_i A_{i-1,1} = \sum_{i=1}^s c_i (a_i^2/2)$$

logo, (2-13-d) se reduz a:

$$\sum_{i=1}^s c_i a_i^2 = 1/3$$

Analogamente usando (2-14-b) temos que as equações (2-13-f/g) resultam em (2-13-d) e as equações (2-13-j/n/o) resultam em (2-13-e).

III.1 Usando as equações (2-11), (2-13-j) e (2-14-b) a equação (2-13-l) fica reduzida a (2-16-e).



CAPÍTULO III

Métodos de Runge-Kutta com um fator de Escala

III.1 - Introdução

Este capítulo tem como objetivo determinar a partir de um método de Runge-Kutta com s estágios, um novo método de Runge-Kutta que apresente em seus coeficientes um fator de escala e tenha s' estágios ($s' \geq s$). Através desse método, pretende-se determinar aproximantes para a solução $y(x)$ em pontos internos a $[x_n, x_n+h]$, com ordem de precisão pelo menos igual à do método básico considerado.

Para isto usaremos de um fator de escala $\sigma \in (0,1)$, tornando o passo utilizado com o novo método de tamanho $h' = \sigma h$. A construção de métodos com essa característica foi inicialmente considerada em [Horn-1983].

O método, assim, construído torna-se computacionalmente bastante interessante, quando as avaliações já conhecidas das derivadas no passo (através do método básico) podem ser reutilizadas. Assim, com um acréscimo de poucas avaliações da derivada, e portanto, com um esforço computacional adicional mínimo, geramos aproximações para a solução $y(x)$ em pontos internos ao passo de integração.



III.2 - Métodos com fator de escala

Vamos, então, analisar os procedimentos necessários para a obtenção de tais métodos.

Dado um método de Runge-Kutta com ordem p e s estágios, definido por (2-1), determinamos, através dele, o aproximante y_{n+1} para $y(x)$ em $x=x_{n+1}=x_n+h$.

Seja agora $x_{n+1}^* = x_n + h^*$, onde $h^* = \sigma h$ e $0 < \sigma < 1$.

Pretendemos determinar uma aproximação y_{n+1}^* em x_{n+1}^* , através de um novo método de Runge-Kutta, mas aproveitando as s avaliações k_i das derivadas, construídas para a determinação de y_{n+1} .

Para isso, a aproximação y_{n+1}^* será obtida a partir do método de Runge-Kutta, definido por (2-1), cujo algoritmo é agora reescrito como:



$$y_{n+\sigma}^* = y_n + h^* \sum_{i=1}^{s^*} c_i^* k_i^*, \quad n=0, 1, \dots, \quad (3-1-a)$$

onde

$$k_i^* = f(x_n, y_n) \quad (3-1-b)$$

e

$$k_i^* = f\left[x_n + a_i^* h^*, y_n + h^* \sum_{j=1}^{i-1} b_{i,j}^* k_j^*\right], \quad i=1(1)s^* \quad (3-1-c)$$

Observe que o algoritmo definido por (3.1), nada mais é do que um método de Runge-Kutta com s^* estágios, onde por hipótese consideramos que $s^* > s$.

Como pretendemos utilizar em (3.1) os valores k_i 's obtidos por (2-1-b/c) e para que tenhamos um esforço computacional adicional mínimo devemos considerar $k_i^* = k_i$, $i=1(1)s$.

Para que a relação acima seja satisfeita, vamos admitir que:

$$X_n + a_i h = x_n + a_i^* h^* \quad (3-2-a)$$

$$h \sum_{j=1}^{i-1} b_{i,j} k_j = h^* \sum_{j=1}^{i-1} b_{i,j}^* k_j^* \quad i=1(1)s \quad (3-2-b)$$

Lembrando que $h^* = \sigma h$, se considerarmos as relações:

$$a_i^* = \frac{1}{\sigma} a_i \quad i=1(1)s \quad (3-3-a)$$

$$b_{i,j}^* = \frac{1}{\sigma} b_{i,j} \quad i=1(1)s; \quad j=1(1)i-1 \quad (3-3-b)$$

temos a validade de (3-2).

Portanto, as relações (3-3-a/b) nos fornecem os coeficientes dos primeiros s estágios do novo método de Runge-Kutta, que vai gerar a aproximante $y_{n,\sigma}^*$, todos dependentes do parâmetro σ . Daí, a literatura definir métodos de Runge-Kutta, com essa propriedade, como "métodos de Runge-Kutta com um fator de escala".

Os demais coeficientes, a_i^* , b_{ij}^* para $i=s+1(1)s^*$ e $j=1(1)i-1$ e c_i^* para $i=1(1)s^*$, são obtidos através da utilização das condições de ordem, para métodos de Runge-Kutta com ordem p .

A expressão do erro local para o novo método de Runge-Kutta pode ser obtida de maneira análoga à que resultou na expressão (2-7). Assim, podemos expressar seu erro local por:

$$T_{n,\sigma}^* = (\sigma h)^{p+1} \sum_{k=1}^{\lambda_{n,\sigma}} l_k^{(p+1)}(\sigma) D_k^{(p+1)}(\sigma) + O(\sigma h^{p+2}) \quad (3-4)$$

ou ainda, conforme (2-4):

$$T_{n+\sigma}^* = y_{n+\sigma}^* - y(x_n + \sigma h) \quad (3-5)$$

Temos, então, um par de métodos (o básico considerado e o construído), onde através do método básico, geramos a aproximação em $x=x_{n+1}$ e, utilizando o método com o fator de escala, obtemos as aproximações em pontos x_{n+1}^* , sempre internos ao intervalo $[x_n, x_{n+1}]$.

III.3 - A construção do método

Vamos ilustrar os passos considerados na construção, utilizando-se de um método de Runge-Kutta, com ordem 4 e 7 estágios, obtido a partir de um método básico de Runge-Kutta com ordem 4 e s estágios ($s < 7$). Nesse caso, as condições de ordem para a obtenção do método com 7 estágios, e que apresenta um parâmetro σ , são obtidas analogamente à situação clássica, conforme desenvolvemos no capítulo II.

Considerando, então, como em (2-12), a expansão na forma de Taylor para $y(x_n + \sigma h)$ numa vizinhança de x_n , resulta:



$$\sum_{i=1}^8 c_i^* = 1 \quad (3-6-a)$$

$$\sum_{i=2}^7 a_i^* c_i^* = \frac{\sigma}{2} \quad (3-6-b)$$

$$\sum_{i=2}^7 a_i^{*2} c_i^* = \frac{\sigma^2}{3} \quad (3-6-c)$$

$$\sum_{i=3}^7 c_i^* A_{i-1,1} = \frac{\sigma^2}{6} \quad (3-6-d)$$

$$\sum_{i=2}^7 c_i^* a_i^* = \frac{\sigma^3}{4} \quad (3-6-e)$$

$$\sum_{i=3}^7 c_i^* A_{i-1,2} = \frac{\sigma^3}{12} \quad (3-6-f)$$

$$\sum_{i=3}^7 c_i^* a_i^* A_{i-1,1} = \frac{\sigma^3}{8} \quad (3-6-g)$$

$$\sum_{i=1}^7 c_i^* \sum_{j=1}^{i-2} A_{j,1} b_{i,j}^* = \frac{\sigma^3}{24} \quad (3-6-h)$$

Afim de facilitar a determinação de soluções para (3-6), podemos considerar as condições de simplificação dadas em (2-14).

Utilizando as equações (2-14-a/b), o sistema (3-6) fica reduzido a:

$$\sum_{i=1}^7 c_i^* = 1 \quad (3-7-a)$$

$$\sum_{i=2}^7 c_i^* a_i^* = \frac{\sigma}{2} \quad (3-7-b)$$

$$\sum_{i=2}^7 c_i^* a_i^{*2} = \frac{\sigma^2}{3} \quad (3-7-d)$$

$$\sum_{i=2}^7 c_i^* a_i^{*3} = \frac{\sigma^3}{4} \quad (3-7-e)$$

$$\sum_{i=3}^7 c_i^* a_j^{*k} b_{i,j}^* = 0 \quad (3-7-h)$$

Os coeficientes a_i^* e b_{ij}^* , para $i=1(1)6$ e $j=2(1)i-1$, são determinados por (3-3-a/b), e os coeficientes b_{7j}^* , $j=1(1)6$, são analogamente determinados por $b_{7j}^* = b_{7j}/\sigma$.

Sem perder a generalidade, podemos arbitrar o valor de alguns dos coeficientes do novo método.

Tomando então $b_{72}=b_{73}=b_{74}=0$, e usando das equações (2-14-a) resulta:

$$b_{75}^* = \frac{a_7^2 (2a_7 - 3a_6)}{6a_5 (a_5 - a_6)} \quad (3-8-a)$$

$$b_{76}^* = \frac{a_7^2 (2a_7 - 3a_5)}{6a_6 (a_6 - a_5)} \quad (3-8-b)$$

Das equações de (3-7-a/b/d/e), podemos escrever c_3^* , c_4^* e c_5^* em função de c_6^* , c_7^* e σ .

Tomando $(k,j)=(0,1)$ e $(k,j)=(1,1)$ e usando a equação (3-7-h), os coeficientes c^*_6 e c^*_7 podem ser escritos como polinômios cúbicos em σ .

Assim todos os parâmetros c_i^* , $i=1(1)7$ podem ser determinados em função de σ .

III.4 - Um método com fator de escala

Vamos aqui considerar como coeficientes do método básico os coeficientes do método de ordem 4, proposto no par de métodos embutidos, devido a E. Fehlberg-1969. Tais métodos possuem com ordem de consistência 4 e 5, respectivamente, cujos coeficientes são dados pela tabela:

a_i	b_{ik}					c_i	$\bar{c}_i$
0	0					$\frac{25}{216}$	$\frac{16}{135}$
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					0	0
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				$\frac{1408}{2565}$	$\frac{6656}{12825}$
$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$			$\frac{2197}{4104}$	$\frac{28561}{56430}$
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$		$-\frac{1}{5}$	$-\frac{9}{50}$
$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	0	$\frac{2}{55}$



O uso deste par de métodos tem a vantagem que, com uma única avaliação adicional da derivada, podemos determinar uma aproximação para $y(x)$ com um tamanho de passo otimizado, ainda garantindo a qualidade desejada para a aproximação e a um custo adicional mínimo quanto às avaliações da derivada.

Considerando os coeficientes da tabela citada neste parágrafo, e substituindo os respectivos coeficientes, conforme o descrito, e fazendo $a_1=1$, lembrando que $c_2=0$ e $b_{12}=b_{73}=b_{74}=0$, encontramos:

$$b_{11}^* = b_{75}^* = \frac{1}{6\sigma} \quad b_{16}^* = \frac{2}{3\sigma}$$

$$c_1^* = 1 - \sigma(301/120 + \sigma(-269/108 + \sigma(311/360)))$$

$$c_3^* = \sigma(7168/1425 + \sigma(-4096/513 + \sigma(14848/4275)))$$

$$c_4^* = \sigma(-28561/8360 + \sigma(199927/22572 + \sigma(-371293/75240)))$$

$$c_5^* = \sigma(57/50 + \sigma(-3 + \sigma(42/25)))$$

$$c_6^* = \sigma(-96/55 + \sigma(40/11 + \sigma(-102/55)))$$

$$c_7^* = \sigma(3/2 + \sigma(-4 + \sigma(5/2)))$$

Assim, para cada $\sigma \in (0,1)$, ficam determinados os coeficientes do novo método, conforme definido em (3-1) fornecendo portanto, em qualquer ponto interno do intervalo, uma aproximação de ordem quatro.



A escolha, aqui, considerada para os coeficientes livres, usado na construção do método com fator de escala, resultou, em um método com fator de escala cujos coeficientes do erro de truncamento nas parcelas de h^5 , tornam-se nulos quando $\sigma=1$. Isto é, temos para $\sigma=1$ uma aproximação de ordem 5.

É importante registrar que essa aproximação de ordem 5 não é igual à fornecida pelo método básico considerado.

III.5 - Considerações finais

Vale registrar que o método com fator de escala obtido no parágrafo anterior exige apenas uma avaliação adicional da derivada. Em [Horn-1983] está construído um método com fator de escala que possui ordem 5, mas a um custo adicional de duas avaliações da derivada e de mais duas avaliações, a cada vez que a aproximação é gerada num ponto interno do intervalo $[x_n, x_{n+1}]$.

Um outro método proposto por Horn apresenta ordem 5 e permite a obtenção de aproximação em qualquer ponto do intervalo, com custo adicional total de cinco avaliações da derivada.

Nos dois métodos, a aproximação fornecida para $\sigma=1$ é diferente da gerada pelo método básico de ordem 5.



CAPÍTULO IV

Interpolante de Hermite associado a um método de Runge-Kutta

IV.1 - Introdução

Ao considerarmos métodos de Runge-Kutta explícitos, com ordem p , para determinarmos aproximantes para a solução do p.v.i, dado por (1-1) e (1-2), podemos pensar na possibilidade de se utilizar um método, onde algumas das aproximações intermediárias ao passo de integração (utilizadas na construção da aproximante de Runge-Kutta), sejam também de ordem p . Então, utilizando tais aproximações, construímos um polinômio interpolador de Hermite que representa, localmente, a solução do p.v.i com ordem p , e que, globalmente, seja de classe C^1 .

Neste capítulo vamos apresentar uma técnica para a construção dessa interpolante, proposta em [Shampine-1985] e, em seguida, analisar sua ordem.

IV.2 - O Problema

Ao integrarmos o p.v.i. de x_n até x_n+h , através de um método de Runge-Kutta explícito com s estágios e ordem p , sempre consideramos pontos intermediários $x_{nj}=x_n+\alpha_j h$, $j=2(1)s-1$. Assim, nesses pontos geramos aproximações y_{nj} , definidas por:



$$y_{n,j} = y_n + h \sum_{k=0}^{j-1} b_{j,k} k_k$$

e que são necessárias para a construção dos k_j seguintes. Ainda, uma vez obtida a aproximação y_{n+1} , podemos determinar $k_{n+1} = f(x_n + h, y_{n+1})$. Essa avaliação da derivada deve sempre estar disponível para o passo seguinte, apenas não sendo necessária ao final do intervalo de integração. Logo, sua determinação, a cada passo, não implica em custo computacional adicional.

Nos métodos de Runge-Kutta, as aproximações intermediárias $y_{n,j}$, $j=2(1)(s-1)$ não necessariamente apresentam ordem p . Na verdade, a maioria delas tem ordem inferior a p e eventualmente algumas delas são de ordem p .

O que se pretende é construir um polinômio que interpole para x_n, x_{n+1} e alguns dos pontos $x_{n,j}$ as aproximações $y_{n,j}$ e k_j , fornecendo, não apenas uma aproximação local para a solução $u_n(x)$ de (2-4), com a mesma ordem p , do método de Runge-Kutta considerado, mas, principalmente, garantindo que o interpolante seja globalmente de classe C^1 .

Logo, devemos ter, à nossa disposição, uma quantidade suficiente de aproximações $y_{n,j}$ e k_j de ordem p , o que vai nos levar à busca de um método de Runge-Kutta adequado. Para isso, vamos considerar, a partir de um método básico com s estágios, a construção de um método de Runge-Kutta embutido, com um número de estágios $s' > s$ suficiente para tal. Isto é, podemos ter a necessidade



de acrescentar alguns estágios ao método básico onde um deles pode ser a aproximação y_{n+1} .

Na prática estamos considerando um método de Runge-Kutta ampliado, fazendo $a_{s+1}=1$ e $b_{s+1,j}=c_j$ com $j=1(1)s$.

No que segue vamos desenvolver o raciocínio num intervalo $[x_n, x_{n+1}]$ genérico, e então, a fim de simplificar a anotação vamos anotar simplesmente por $u(x)$ a solução exata $u_n(x)$ do p.v.i. definido localmente.

Vamos anotar por z_q , $q=1(1)m$ os m pontos x_{n_j} , onde a aproximação para a solução tem ordem p . De maneira análoga, anotaremos por u_q às aproximações y_{n_j} , correspondentes aos m pontos z_q e por u'_q às aproximações k_j , correspondentes a r dos m pontos z_q .

Conforme adiantamos, queremos que o interpolante seja localmente uma aproximação de ordem p , ou seja da mesma ordem que o método de Runge-Kutta.

Vale lembrar que, como as aproximações tem ordem p , então temos:

$$\|u(z_q) - u_q\| \leq \gamma_q h^{p+1} \quad q=1(1)m \quad (4-1-a)$$

Portanto, também podemos concluir que:

$$\|u'(z_q) - u'_q\| \leq \gamma_q L h^{p+1} \quad q=1(1)r \quad (4-1-b)$$

onde L é a constante de Lipschitz da função $f(x, y)$ com relação à variável y .

IV.3 - A Construção do Interpolante

Seja então $p(x)$ o polinômio interpolador de Hermite definido pelas condições:

$$\begin{aligned} p(z_q) &= u_q & q=1(1)m \\ p'(z_q) &= u'_q & q=1(1)r \end{aligned} \quad (4-2)$$

Conforme definimos no capítulo I, $p(x)$ será dado por:

$$p(x) = \sum_{i=1}^m A_i(x) u_i + \sum_{i=1}^r B_i(x) u'_i \quad (4-3-a)$$

onde

$$B_i(x) = (x - z_i) L_{im}(x) L_{ir}(x), \quad i=1(1)r \quad (4-3-b)$$

$$A_i(x) = \begin{cases} [1 - (x - z_i) \cdot [L'_{im}(z_i) + L'_{ir}(z_i)]] L_{im}(x) \cdot L_{ir}(x) \\ L_{im}(x) \cdot \prod_{q=1}^r \frac{(x - z_q)}{(z_i - z_q)}, & i=r+1(1)m. \end{cases} \quad (4-3-c)$$

e

$$L_{im}(x) = \prod_{q=1}^m \frac{(x - z_q)}{(z_i - z_q)} \quad i=1(1)m$$

A aproximação y_{n+1} terá ordem p em $x=x_n+h$ para todo valor de n considerado, logo, esse poderá ser um dos valores assumidos para z_q



em (4-2), muito embora o procedimento, aqui apresentado, não irá considerar essa exigência como necessária.

Assim, através de (4-3), podemos construir a aproximante $p(x)$ que verifica (4-2), um polinômio interpolador de Hermite. Torna-se, aqui, interessante analisar a ordem de precisão de $p(x)$ como um aproximante local para $u(x)$.

IV.4 - A ordem da interpolante

Considere, $\varphi(x)$ o polinômio de menor grau que interpola a solução local $u(x)$, satisfazendo:

$$\begin{aligned}\varphi(z_q) &= u_q & q=1(1)m \\ \varphi'(z_q) &= u'(z_q) & q=1(1)r\end{aligned}\tag{4-4}$$

Podemos, então, garantir a seguinte desigualdade:

$$\|u^{(k)}(x) - p^{(k)}(x)\| \leq \|u^{(k)}(x) - \varphi^{(k)}(x)\| + \|\varphi^{(k)}(x) - p^{(k)}(x)\|\tag{4-5}$$

Devido a [Kansy-1983], para $0 \leq k \leq m+r$ e $x_n \leq x \leq x_n+h$ podemos assegurar que:

$$\|u^{(k)}(x) - \varphi^{(k)}(x)\| \leq \max[x_n, x_n+h] \cdot \|u^{(m+r)}\| \frac{h^{(m+r-k)}}{(-m+r-k)!}\tag{4-6}$$

A equação (4-6) garante que a interpolante $\varphi(x)$ determina aproximações da ordem $O(h^{m+r-k})$ para a k -ésima derivada de $u(x)$, para todo ponto $x \in (x_n, x_n+h)$.



Desta forma, devemos estudar um limitante para $\|\varphi(x) - p(x)\|$.

Usando de (4-3-a) e (4-4) a equação (4-5) pode ser escrita como:

$$\|\varphi^{(k)}(x) - p^{(k)}(x)\| \leq \sum_{i=1}^m |A_i^{(k)}(x)| \cdot \|u(z_i) - u_i\| + \sum_{i=1}^r |B_i^{(k)}(x)| \cdot \|u'(z_i) - u'_i\|$$

que devido a (4-1) resulta em:

$$\|\varphi^{(k)}(x) - p^{(k)}(x)\| \leq h^{p+1} \left(\sum_{i=1}^m |A_i^{(k)}(x)| \gamma_i + L \cdot \sum_{i=1}^r |B_i^{(k)}(x)| \gamma_i \right) \quad (4-7)$$

A equação (4-7) nos leva a considerar uma análise dos limitantes para $A_i^{(k)}$ e $B_i^{(k)}$.

Para isto fazemos:

$$z_i = x_n + d_i \cdot h, \quad i=1(1)m$$

$$\tau = \min |d_i - d_q| > 0 \quad \text{para } i \neq q \quad (4-8)$$

Usando de (4-8) concluímos que:

$$\left| \prod_{i=1}^m \frac{1}{(z_i - z_q)} \right| \leq \left(\frac{1}{\tau h} \right)^{m-1} \quad \text{com } i \neq q \quad (4-9)$$

A aplicação K vezes do teorema de Rolle, a

$$w_i(x) = \prod_{i \neq q}^m (x - z_q)$$

onde z_q são raízes distintas em $[x_n, x_n+h]$, resulta em:

$$w_i^{(K)}(x) = (m-1) \cdot (m-2) \dots (m-K) \cdot \prod_{q=1}^{m-K-1} (x - c_q^{(K)}) \quad (4-10)$$

Logo, utilizando (4-9) e (4-10) conclui-se que:

$$L_{im}^{(K)} \text{ é da ordem de } o(h^{-K}) \quad (4-11)$$

Derivando, agora, $A_i(x)$ para $i=1(1)r$ dado em (4-3-c), K vezes resulta em:

$$A_i^{(K)} = K \cdot [L_{im}(x) \cdot L_{ir}(x)]^{(K-1)} + [1 - (x - z_i) L'_{im}(z_i) \cdot l'_{ir}(z_i)] [L_{im}(x) \cdot L_{ir}(x)]^{(K)},$$

Podemos, então, concluir que:

$$A_i^{(K)}(x) \text{ é da ordem de } O(h^{-K}), \text{ se } i=1(1)r \quad (4-12)$$

Para $i=r+1(1)m$, com o uso de (4-11), e derivando K vezes $A_i(x)$, concluimos que:

$$A_i^{(K)}(x) \text{ é da ordem de } O(h^{-K}), \text{ para } i=r+1(1)m \quad (4-13)$$

Logo, devido a (4-12) e (4-13), podemos concluir que:

$$A_i^{(K)}(x) \text{ é da ordem de } O(h^{-K}) \text{ para } i=1(1)m \quad (4-14)$$

Derivando $B_i(x)$ dado em (4-3-b), K vezes obtemos:

$$B_i^{(K)}(x) = K \cdot [l_{im} \cdot L_{ir}]^{(K-1)} + [L_{im} \cdot L_{ir}]^{(K)} \cdot (x - z_i)$$

Assim usando, (4-11), concluimos que:



$$B_i^{(k)}(x) \text{ é da ordem de } O(h^{1-k}) \quad (4-15)$$

Considerando, então, (4-14) e (4-15) e substituindo (4-7), concluímos que:

$$\varphi^{(k)}(x) = p^{(k)}(x) + O(h^{p+1-k}) \quad (4-16)$$

Finalmente, usando esses resultados e considerando (4-5), (4-6) e (4-7), podemos concluir que:

$$u^{(k)}(x) = p^{(k)}(x) + O(h^{m+r-k}) + O(h^{p+1-k}), \quad (4-18)$$

Vale registrar que se $m+r \geq p+1$, podemos garantir que a ordem do polinômio interpolador $p(x)$ será a mesma do método de Runge-Kutta considerado.

IV.5 - O Interpolante e os métodos com Fator de Escala

Vamos, agora, mostrar que o interpolante (4-3) é na verdade um caso especial das fórmulas embutidas com um fator de escala.

Para isso, escrevemos (4-3) na forma:



$$p(x) = \sum_{i=1}^m A_i(x) [y_n + h \sum_{q=1}^{j(i)-1} b_{j(i),q} \cdot k_q] + \sum_{i=1}^r B_i(x) k_{j(i)} \quad (4-17)$$

com $j(i)$, função conveniente de i .

Da definição do polinômio interpolador, temos que a soma dos $A_i(x)$, para $i=1(1)s$, será igual a 1.

Para $z_n = x_n + \sigma h$ verificamos que:

$$L_{im}(x_n + \sigma h) = \prod_{i=1}^n \frac{\sigma - d_q}{d_i - d_q}$$

isto é, $L_{im}(x_n + \sigma h)$ é função apenas de σ .

Analogamente, usando (4-3), concluimos que:

$$A_i(x + \sigma h) = a_i(\sigma)$$

$$e \quad (4-18)$$

$$B_i(x_n + \sigma h) = h b_i(\sigma)$$

Usando (4-18) podemos escrever (4-17) para $x = x_n + \sigma h$ como:

$$P(x_n + \sigma h) = y_n + \sigma h \left[\sum_{i=1}^m \frac{a_i(\sigma)}{\sigma} \sum_{q=1}^{j(i)-1} b_{j(i),q} k_q + \sum_{i=1}^r \frac{b_i(\sigma)}{\sigma} k_{j(i)} \right] \quad (4-19)$$

Logo, da maneira como (4-19) esta escrita, podemos desenvolver cada um dos somatórios, concluir sua semelhança com as fórmulas embutidas. Isto é, a técnica, aqui apresentada nada mais é do que um caso especial de fórmulas embutidas. Desta forma, podemos analisar o erro do interpolante de maneira análoga às dos métodos escala.



IV.6-Considerações finais

Um processo contínuo para a obtenção de aproximantes

A escolha dos pontos de interpolação para a construção do interpolante de Hermite não afeta a sua ordem. O que podemos ter é que após determinarmos esses pontos de interpolação, através de um método de Runge-Kutta de ordem p , garantirmos a ordem do interpolante.

Como o interpolante aqui construído se assemelha com os métodos com fator de escala, do capítulo anterior, seria interessante, para a determinação dos pontos de interpolação, usarmos da idéia daquele capítulo. Ainda que não fora tratado o erro local para o aproximante determinado, de Hermite, essa estimativa pode ser feita pelas técnicas já conhecidas.

ordem p que o método básico considerado, quando usamos $a \in [0,1]$ fixo, e aproximantes de ordem $p-1$, quando consideramos quaisquer pontos entre x_i e x_{i+1} .

Para ilustrar a construção da técnica, vamos considerar métodos de ordem 5, quando tomamos a fixo, e de ordem 4 para a livre no passo.

V.2 - A Construção do método.

Através da expansão em série de Taylor da função $f(x,y)$ em torno do ponto (x_0, y_0) , podemos expressar os coeficientes c_i, a_i, b_i do método de Runge-Kutta em função de a .



Um processo contínuo para a obtenção de aproximantes**V.1 - Introdução**

Neste capítulo, vamos novamente considerar a obtenção, através de métodos de Runge-Kutta, de aproximantes $y_{n+\alpha}$ para a solução do p.v.i., definido por (1-1) e (1-2) em pontos $x=x_n+\alpha h$, $\alpha \in [0,1]$.

Para isso, vamos voltar à idéia explorada no capítulo III, onde procuramos construir métodos de Runge-Kutta com um fator escala. O objetivo aqui será o de gerarmos aproximantes da mesma ordem p que o método básico considerado, quando usamos $\alpha \in (0,1]$ fixo, e aproximantes de ordem $p-1$, quando consideramos quaisquer pontos entre x_n e $x_n+\alpha h$.

Para ilustrar a construção da técnica, vamos considerar métodos de ordem 5, quando tomamos α fixo, e de ordem 4 para α livre no passo.

V.2 - A Construção do método.

Através da expansão em série de Taylor da função $f(x,y)$ em torno do ponto $(x_{n+\alpha}, y_{n+\alpha})$, podemos expressar os coeficientes c_i, a_i, b_{ij} do método de Runge-Kutta em função de α .



Da mesma forma, as condições de ordem do método também podem ser expressadas em função de α . Considerando, então, esses procedimentos, chegamos às condições de ordem para $p \leq 5$, todas em função de α , e que são:

$$\sum_{i=1}^6 c_i = \alpha \quad (5-1-a)$$

$$\sum_{i=2}^6 c_i a_i = \frac{\alpha^2}{2} \quad (5-1-b)$$

$$\sum_{i=2}^6 c_i a_i^2 = \frac{\alpha^3}{3} \quad (5-1-c)$$

$$\sum_{i=3}^6 c_i A_{i-1,1} = \frac{\alpha^3}{6} \quad (5-1-d)$$

$$\sum_{i=2}^6 c_i a_i^3 = \frac{\alpha^4}{4} \quad (5-1-e)$$

$$\sum_{i=3}^6 c_i A_{i-1,2} = \frac{\alpha^4}{12} \quad (5-1-f)$$

$$\sum_{i=3}^6 c_i a_i A_{i-1,1} = \frac{\alpha^4}{8} \quad (5-1-g)$$

$$\sum_{i=4}^6 c_i \sum_{j=2}^{i-1} A_{j,1} b_{i,j+1} = \frac{\alpha^4}{24} \quad (5-1-h)$$

$$\sum_{i=2}^6 c_i a_i^4 = \frac{\alpha^5}{5} \quad (5-1-i)$$

$$\sum_{i=3}^6 c_i A_{i-1,3} = \frac{\alpha^5}{20} \quad (5-1-j)$$

$$\sum_{i=4}^6 c_i \sum_{j=1}^{i-2} A_{j,2} b_{i,j+1} = \frac{\alpha^5}{60} \quad (5-1-k)$$

$$\sum_{i=5}^6 c_i \sum_{j=4}^{i-1} b_{ij} \sum_{m=3}^{j-1} b_{jm} A_{m-1,1} = \frac{\alpha^5}{120} \quad (5-1-l)$$

$$\sum_{i=3}^6 c_i a_i A_{i-1,1} = \frac{\alpha^5}{15} \quad (5-1-m)$$

$$\sum_{i=3}^6 c_i a_i^2 A_{i-1,1} = \frac{\alpha^5}{10} \quad (5-1-n)$$

$$\sum_{i=4}^6 \sum_{j=4}^6 c_i \sum_{j=1}^{i-1} (a_i + a_{j+1} b_{i,j+1} A_{j-1,1}) = \frac{7\alpha^5}{120} \quad (5-1-o)$$

$$\sum_{i=2}^6 c_i A_{i,1}^2 = \frac{\alpha^5}{20} \quad (5-1-p)$$

Observe que, se considerarmos nas equações de (5-1), $\alpha=1$, obtemos as condições de ordem, para os métodos de Runge-Kutta com ordem 5 e 6 estágios, dadas em (2-13).

Assim, devemos buscar soluções para o sistema (5-1), que nos forneçam métodos de Runge-Kutta nas condições aqui desejadas.

Para isto, como fizemos em (2-13), vamos resolver o sistema usando a condição de simplificação (2-14-b) e, ainda considerando como hipótese:

$$b_{4,2} = b_{5,2} = b_{6,2} = 0 \quad (5-2)$$

Usando (5-2) e (2-11) na equação (5-1-j), e subtraindo (5-1-k) associada (2-14-b) concluimos que $c_3=0$. Ainda, conforme visto em (2-16), também teremos $c_2=0$.

Logo, o sistema (5-1) fica reduzido a:

$$c_1 + c_4 + c_5 + c_6 = \alpha \quad (5-3-a)$$

$$c_4 a_4 + c_5 a_5 + c_6 a_6 = \frac{\alpha^2}{2} \quad (5-3-b)$$

$$c_4 a_4^2 + c_5 a_5^2 + c_6 a_6^2 = \frac{\alpha^3}{3} \quad (5-3-c)$$

$$c_4 a_4^3 + c_5 a_5^3 + c_6 a_6^3 = \frac{\alpha^4}{4} \quad (5-3-d)$$

$$c_4 a_4^4 + c_5 a_5^4 + c_6 a_6^4 = \frac{\alpha^5}{5} \quad (5-3-e)$$

$$c_4 b_{4,3} + c_5 b_{5,3} + c_6 b_{6,3} = 0 \alpha^5 \quad (5-3-f)$$

$$c_5 [a_4 b_{5,4}] + c_6 [a_4 b_{6,4} + a_5 b_{6,5}] = \frac{\alpha^5}{20} \quad (5-3-g)$$

O sistema não linear (5-3) apresenta 7 equações a 10 incógnitas, logo, em princípio, possui 3 coeficientes livres.

Usando das equações (2-11) e (2-14-b), obtemos em função de a_4 os valores dos seguintes coeficientes, utilizados no método:

$$a_2 = \frac{4}{9} a_4; \quad a_3 = \frac{2}{3} a_4 \quad b_{3,2} = \frac{1}{2} a_4 \quad b_{4,3} = \frac{3}{4} a_4$$

$$b_{5,3} = \frac{3a_5^2 [3a_4 - 2a_5]}{4a_4^2} \quad b_{5,4} = \frac{a_5^2 [a_5 - a_4]}{a_4^2}$$

Veremos, a seguir que utilizando para as equações do sistema (5-3) duas outras condições de consistência ($\Delta_1 = \Delta_2 = 0$), teremos apenas um coeficiente livre, a ser escolhido entre a_4 e a_5 , e com esse procedimento conseguiremos uma família de métodos de Runge-Kutta de modo que, para $\alpha \in (0,1]$, o aproximante $y_{n,\alpha}$ para a solução exata $y(x)$, em $x = x_n + \alpha h$, terá ordem 5, e ordem 4 para $x_n < x \leq x_n + \alpha h$.

De fato, considerando as equações (5-3-c/d/e/f), obtemos a condição de consistência:

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} a_4 & a_5 & a_6 & \frac{\alpha^2}{2} \\ a_4^2 & a_5^2 & a_6^2 & \frac{\alpha^3}{3} \\ a_4^3 & a_5^3 & a_6^3 & \frac{\alpha^4}{4} \\ a_4^4 & a_5^4 & a_6^4 & \frac{\alpha^5}{5} \end{vmatrix} = 0 \quad (5-4)$$

Assumindo que $a_4 a_5 a_6 (a_6 - a_5) (a_4 - a_6) (a_5 - a_4) \neq 0$ podemos reescrever (5-4) como:

$$\Delta_1 = 12\alpha^3 - 15\alpha^2(a_4 + a_5 + a_6) + 20\alpha(a_4 a_5 + a_4 a_6 + a_5 a_6) - 30a_4 a_5 a_6 = 0 \quad (5-5)$$

Das equações (5-3-d/e/h) e usando (2-14-b), (5-3-g) junto com (2-11), temos então, a condição de consistência Δ_2 dada por:

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} a_4 & a_5 & \frac{\alpha^3}{6} \\ a_4^2 & a_5^2 & \frac{\alpha^4}{12} \\ a_4^3 & a_5^3 & \frac{\alpha^5}{20} \end{vmatrix} = 0 \quad (5-6)$$

Desenvolvendo o determinante de (5-6) resulta:

$$\Delta_2 = 3\alpha^2 - 5\alpha(a_4 + a_5) + 10a_4a_5 = 0 \quad (5-7)$$

Assim devido as equações (5-4) e (5-7) podemos escrever:

$$\Delta_1 = (3\alpha - 4a_6) \Delta_2 + (3\alpha^2 + 10a_4a_5) (\alpha - a_6) = 0$$

Como $\Delta_2 = 0$, devemos ter então que:

$$\begin{cases} 3\alpha^2 + 10a_4a_5 = 0 & (5-8-a) \\ \text{ou} \\ \alpha - a_6 = 0 & (5-8-b) \end{cases}$$

O uso de (5-8-a) implica $c_6 = 0$, o que não é conveniente, portanto devemos ter $\alpha = a_6$.

De (5-7), obtemos:

$$a_5 = \frac{\alpha(5a_4 - 3\alpha)}{5(2a_4 - \alpha)}$$

Assim, considerando as condições de consistência (5-5) e (5-7), podemos resolver (5-3), determinando todos coeficientes necessários para a obtenção do método de Runge-Kutta que procuramos.

De (5-3-c/d/e), obtemos:

$$c_6 = \frac{\alpha[3\alpha^2 - 4\alpha(a_4 + a_5) + 6a_4a_5]}{12[\alpha^2 + a_4a_5 - \alpha(a_5 + a_4)]} \quad (5-9-a)$$

$$c_5 = \frac{\alpha^3(2a_4 - \alpha)}{12[a_5(a_5 - \alpha)(a_5 - a_4)]} \quad (5-9-b)$$

$$c_4 = \frac{\alpha^3(2a_5 - \alpha)}{12a_4(a_4 - \alpha)(a_4 - a_5)} \quad (5-9-c)$$

Substituindo (5-9) em (5-3-f), obtemos:

$$b_{6,3} = \frac{3\alpha^2[\alpha^2(2a_5 - a_4) - 6\alpha a_4a_5 + 6a_4^2a_5]}{4a_4^2[3\alpha^2 - 4\alpha(a_4 + a_5) + 6a_4a_5]} \quad (5-9-d)$$

De (5-3-g), associada a (2-14-b) e (2-11), determinamos:



$$b_{6,4} = \frac{\alpha^2 (a_4 - \alpha) [\alpha^4 + \alpha a_5 (a_5 - 4a_4) + 2a_4^2 a_5]}{a_4^2 (a_5 - a_4) [3\alpha^2 - 4\alpha (a_4 + a_5) + 6a_4 a_5]} \quad (5-9-e)$$

$$b_{6,5} = \frac{\alpha^2 (\alpha - 2a_4) (\alpha - a_4) (\alpha - a_5)}{a_5 (a_5 - a_4) [3\alpha^2 - 4\alpha (a_4 + a_5) + 6a_4 a_5]} \quad (5-9-f)$$

$$b_{6,1} = \alpha - \sum_{j=3}^5 b_{6,j} \quad (5-9-g)$$

Portanto os coeficientes do método de Runge-Kutta com ordem 5, são dados por:

$\frac{4}{9}a_4$	$\frac{4}{9}a_4$					
$\frac{2}{3}a_4$	$\frac{1}{6}a_4$	$\frac{1}{6}a_4$				
a_4	$\frac{1}{4}a_4$	0	$\frac{3}{4}a_4$			(5-10)
$\frac{\alpha(5a_4 - 3\alpha)}{5(2a_4 - \alpha)}$	$b_{5,1}(\alpha, a_4)$	0	$b_{5,3}(\alpha, a_4)$	$b_{5,4}(\alpha, a_4)$		
a_6	$b_{6,1}(\alpha, a_4)$	0	$b_{6,3}(\alpha, a_4)$	$b_{6,4}(\alpha, a_4)$	$b_{6,5}(\alpha, a_4)$	
	$c_1(\alpha, a_4)$	0	0	$c_4(\alpha, a_4)$	$c_5(\alpha, a_4)$	$c_6(\alpha, a_4)$

Observe, então, que os quatro primeiros estágios independem do valor de α , logo, ao alterarmos o valor de α , somente k_5 e k_6 devem ser novamente avaliados.

Portanto, tomando $\alpha=1$, um aproximante y_{n+1} de ordem 5, é obtido em $x_{n+1}=x_n+h$, para o que necessitamos de apenas 2 avaliações adicionais da derivada (k_5 e k_6). Outros aproximantes $y_{n+\alpha}$, também de ordem 5, podem ser obtidos para outros valores de $\alpha \in (0,1)$.

Vale registrar que nem todos os aproximantes internos ao passo têm a mesma ordem do método considerado, sendo, na verdade, o maior número desses aproximantes com ordem inferior a p . Alguns valores de α tais como 1, $3/4$, $1/2$, $1/4$ garantem aproximantes de ordem 5.

Como ilustração considerando, $a_6=\alpha=1$ e $a_4=1/3$ em (5-10) obtemos o método:

$$\begin{array}{c|cccccc}
 \frac{4}{27} & \frac{4}{27} & & & & & \\
 \frac{2}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{6} & & & & \\
 \frac{1}{3} & 0 & \frac{3}{12} & & & & \\
 \frac{4}{5} & \frac{88}{125} & 0 & -\frac{324}{125} & \frac{336}{125} & & \\
 1 & -\frac{133}{28} & 0 & \frac{567}{28} & -\frac{456}{28} & \frac{50}{28} & \\
 \hline
 & \frac{35}{336} & 0 & 0 & \frac{162}{336} & \frac{125}{336} & \frac{14}{336}
 \end{array} \tag{5-11}$$

Portanto o aproximante y_{n+1} , com ordem 5, é gerado por:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{336} (35k_1 + 162k_4 + 125k_5 + 14k_6) \quad (5-12)$$

Agora, se $\alpha=1/2$ e $a_3=1/3$, reavaliando k_5 e k_6 , escrevemos então (5-10), como a seguir:

$\frac{4}{27}$	$\frac{4}{27}$					
$\frac{2}{9}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{6}$				
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{12}$	0	$\frac{3}{12}$			(5-15-a)
$\frac{1}{10}$	$\frac{67}{1000}$	0	$\frac{54}{1000}$	$-\frac{21}{1000}$		(5-13)
$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{378}{280}$	$\frac{237}{280}$	$\frac{400}{280}$		(5-15-c)
	$\frac{14}{672}$	0	0	$\frac{162}{672}$	$\frac{125}{672}$	$\frac{35}{672}$

De (5-15-b, c e d) resulta:

e escrevemos:

e, portanto, um aproximante $y_{n+1/2}$, de ordem 5, é gerado:

$$y_{n+1/2} = y_n + c_1 k_1 + c_2 k_2 + c_3 k_3 + c_4 k_4 \quad (5-17)$$

$$y_{n+1/2} = y_n + \frac{1}{672} (14k_1 + 162k_4 + 125k_5 + 35k_6) \quad (5-14)$$

V.3 - O Método de Runge-Kutta de ordem 4

Nosso objetivo, agora, é gerar através de métodos de Runge-Kutta de ordem 4, aproximantes para $y(x)$, com $x \in (x_n, x_n + \alpha \cdot h)$.

Através das equações (5-3-a/b/c/d), podemos determinar todos os coeficientes do método de Runge-Kutta de ordem 4, e para distingui-los dos coeficientes do método de ordem 5, já determinado, substituiremos α por t e, portanto, teremos $c_i = c_i(t)$, com $0 < t \leq 1$, dados pelas equações:

$$c_1 + c_4 + c_5 + c_6 = t \quad (5-15-a)$$

$$c_4 a_4 + c_5 a_5 + c_6 a_6 = \frac{t^2}{2} \quad (5-15-b)$$

$$c_4 a_4^2 + c_5 a_5^2 + c_6 a_6^2 = \frac{t^3}{3} \quad (5-15-c)$$

$$c_4 a_4^3 + c_5 a_5^3 + c_6 a_6^3 = \frac{t^4}{4} \quad (5-15-d)$$

De (5-15-b, c e d) resulta:

e escrevemos:

$$y_{n+t} = y_n + c_1 k_1 + c_4 k_4 + c_5 k_5 + c_6 k_6 \quad (5-17)$$

que é um método que gera aproximantes com ordem 4 para um parametro $t \in (0, 1)$.



$$c_6 = \frac{t^2 [3t^2 - 4t(a_4 + a_5) + 6a_4 a_5]}{12a_4(a_6 - a_3)(a_6 - a_4)} \quad (5-16-a)$$

$$c_5 = \frac{t^2 [3t^2 - 4t(a_4 + a_6) + 6a_4 a_6]}{12a_4(a_4 - a_5)(a_4 - a_6)} \quad (5-16-b)$$

$$c_4 = \frac{t^2 [3t^2 - 4t(a_5 + a_6) + 6a_5 a_6]}{12a_4(a_4 - a_5)(a_4 - a_6)} \quad (5-16-c)$$

$$c_1 = t - (c_6 + c_5 + c_4) \quad (5-16-d)$$

V.4 - Uma combinação conveniente para os k_i 's

Utilizando, convenientemente, uma combinação para os k_i 's de um método de Runge-Kutta de ordem 5, já construído, pretendemos construir um interpolante, que gera aproximantes de ordem 4 para todos os pontos entre x_n e $x_n + \alpha h$ e, para o ponto $x = x_n + \alpha h$, o aproximante $y_{n+\alpha}$ seja de ordem 5.

Para isso podemos reescrever (5-17) em potências de t , como mostramos a seguir, definindo:

$$S_1 = k_1$$

$$S_2 = \frac{1}{2} \left[\frac{a_5 a_6 (k_4 - k_1)}{a_4 (a_4 - a_6) (a_4 - a_5)} + \frac{a_4 a_6 (k_5 - k_1)}{a_5 (a_5 - a_4) (a_5 - a_6)} + \frac{a_4 a_5 (k_6 - k_1)}{a_6 (a_6 - a_4) (a_6 - a_5)} \right]$$

$$S_3 = \frac{1}{3} \left[\frac{(a_5 + a_6) (k_1 - k_4)}{a_4 (a_4 - a_5) (a_4 - a_6)} + \frac{(a_4 + a_6) (k_1 - k_5)}{a_5 (a_5 - a_4) (a_5 - a_6)} + \frac{(a_4 + a_5) (k_1 - k_6)}{a_6 (a_6 - a_4) (a_6 - a_5)} \right] \quad (5-18)$$

$$S_4 = \frac{1}{4} \left[\frac{k_4 - k_1}{a_4 (a_4 - a_5) (a_4 - a_6)} + \frac{k_5 - k_1}{a_5 (a_5 - a_4) (a_5 - a_6)} + \frac{k_6 - k_1}{a_6 (a_6 - a_4) (a_6 - a_5)} \right]$$

e daí



$$y_{n+t} = y_n + \sum_{n=1}^4 S_n t^n \quad (5-19)$$

Assim, temos (5-19) fornecendo um aproximante de ordem 4 para todo ponto $x \in (x_n, x_n + \alpha h)$. Se $t = \alpha$, $\alpha \in (0, 1)$ fixo, temos em (5-19) um aproximante de ordem 5. Isso pode ser facilmente verificado, pois, usando (5-8-b), concluimos que $c_i(t) = c_i(\alpha, a_4)$ para $i=4, 5, 6$, o que implica que (5-19) é um polinômio de grau 5 em α .

Retomando o primeiro exemplo apresentado, onde $a_6 = \alpha = 1$ e $a_3 = 1/3$, nas fórmulas (5-18), resulta:

$$S_1 = k_1$$

$$S_2 = \frac{1}{56} [-147k_1 + 216k_4 - 125k_5 + 56k_6]$$

$$S_3 = \frac{1}{42} [112k_1 - 243k_4 + 250k_5 - 119k_6]$$

$$S_4 = \frac{5}{112} [-21k_1 + 54k_4 - 74k_5 + 42k_6]$$

Substituindo em (5-19), obtemos:

$$y_{n+1} = y_n + S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = y_n + \frac{1}{336} [35k_0 + 162k_4 + 125k_5 + 14k_6]$$

que é a equação (5-12), e portanto, um método de ordem 5.

Fazendo, agora, $a_6 = \alpha = 1/2$, $a_3 = 1/3$, as fórmulas (5-18) fornecem:



$$S_1 = k_1$$

$$S_2 = \frac{1}{14} [-105k_1 - 27k_3 + 125k_4 + 7k_5]$$

$$S_3 = \frac{1}{21} [392k_1 + 324k_3 - 625k_4 - 91k_5]$$

$$S_4 = \frac{15}{14} [-14k_1 - 18k_3 + 25k_4 + 7k_5]$$

para $t=1/2$, obtemos:

$$y_{4_{(x_0 + \frac{1}{2}h)}} = y_0 + \frac{1}{672} [14k_1 + 162k_3 + 125k_4 + 35k_5]$$

Estes dois exemplos mostram que para $t=\alpha$ (α :fixo), temos aproximantes de ordem 5, dados por (1-19) e, para $x \in (x_n, x_n + \alpha \cdot h)$ aproximantes de ordem 4.

V.5 - Considerações finais

O interpolante de ordem 5, aqui construído, que determina aproximantes em $x=x_n + \alpha h$, $\alpha \in (0,1]$, tem a particularidade de expressar todos os coeficientes necessários em função de α e a_4 , isso torna-se interessante, pois para cada vez que alteramos o valor de α somente as derivadas k_5 e k_6 devem ser reavaliadas.

O interpolante que gera aproximantes de ordem 4 para os pontos internos a $(x_n, x_n + \alpha h)$ e aproximantes de ordem 5 em $x=x_n + \alpha h$,



é construído após uma combinação conveniente dos k_i 's de ordem 5, associados a um método de ordem 4.

Esse interpolante assegura, para as suas derivadas, aproximações com uma ordem menor, isto é: se o interpolante for de ordem 4, sua primeira derivada assegura aproximações de ordem 3, e a segunda derivada aproximações de ordem 2.

Neste trabalho, pretendemos construir um interpolante que seja globalmente de classe C^1 e que gere aproximações em pontos internos ao passo, sem a necessidade de avaliações adicionais da derivada para se obter aproximações em diferentes pontos do passo considerado.

Considerando o par de métodos embutidos devido a Dormand-Prince-1981, com ordens 5 e 4 respectivamente e com 13 estágios, o interpolante a ser construído terá ordem 5 para todos os pontos do intervalo (x_n, x_{n+1}) , garantindo ordem 4 apenas para alguns pontos do intervalo citado.

Para a obtenção de uma estimativa para o erro local, usaremos das técnicas propostas em [Shampine-Bogacki-1990] e a segunda técnica proposta em [Gladwell e outros-1987].

VI.2 - Preliminares

Consideremos as aproximações $y'_{n,p}$ e $y_{n,q}$ com ordens p e q respectivamente, $q < p$, geradas através de um par de métodos embutidos de Runge-Kutta explícitos com s estágios:



CAPÍTULO VI

Métodos de Runge-Kutta e Interpolantes com Ordem Elevada

VI.1 - Introdução

Assim como fizemos em outros capítulos deste trabalho, neste pretendemos construir um interpolante que seja globalmente de classe C^1 e que gere aproximantes em pontos internos ao passo, sem a necessidade de avaliações adicionais da derivada para se obter aproximantes em diferentes pontos do passo considerado.

Considerando o par de métodos embutidos devido a [Dormand-Prince-1981], com ordem 7 e 8 respectivamente e com 13 estágios, o interpolante a ser construído terá ordem 5 para todos os pontos do intervalo (x_n, x_{n+h}) , garantindo ordem 6 apenas para alguns pontos do intervalo citado.

Para a obtenção de uma estimativa para o erro local, usaremos das técnicas proposta em [Shampine-Bogacki-1990] e a segunda técnica proposta em [Gladwell e outros-1987].

VI.2 - Preliminares

Consideremos as aproximações y_{n+1}^* e y_{n+1} , com ordem p e q respectivamente, $q < p$, geradas através de um par de métodos embutidos de Runge-Kutta explícitos com s estágios:



$$y_{n+1}^* = y_n^* + h \sum_{i=1}^s c_i k_i \quad (6-1-a)$$

$$y_{n+1} = y_n^* + h \sum_{i=1}^s c_i k_i \quad (6-1-b)$$

onde

$$k_i = f(x_n, y_n^*),$$

$$k_i = f(x_n + a_i h, y_n^* + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j), \quad i=2(1)s \quad (6-1-c)$$

e

$$a_i = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}$$

VI.3 - A Construção da Interpolante.

Note que, ao avançarmos a integração, vamos utilizar sempre a aproximação de ordem mais alta y_n^* também no método de ordem menor, isto é, consideraremos "extrapolação local".

Ainda, como pretendemos obter interpolantes que sejam globalmente de classe C^1 , vamos necessitar não apenas do valor da aproximação em x_n e x_{n+1} , mas, também, do valor da aproximação para a derivada $f(x, y)$ nesses pontos. Assim, a cada passo, devemos determinar $f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)$ independentemente da necessidade de considerarmos, ou não, novos passos de integração. Considerando $a_s=1$ essa avaliação da derivada pode ser utilizada na obtenção de y_{n+1}^* , com $x_{n+1}=x_n+h$

Como já observamos no capítulo anterior, essa avaliação no passo corrente da derivada em x_{n+1} não acarretará custo



computacional adicional, a menos quando chegarmos ao ponto final do intervalo de integração. Essa técnica é identificada em [Shampine-Bogacki, 1990] como FSAL - First Same As Last.

Quando essa técnica não é utilizada, o que se faz é considerar a avaliação da derivada no passo corrente como um último estágio do método. Isto é, independente de utilizarmos ou não a FSAL no par de métodos embutidos, vamos considerar:

$$a_s^* = 1 \quad c_s^* = b_{s,j} \quad j = 1(1)s-1 \quad (6-2)$$

Observe que, assim definidos, os coeficientes c_i^* terão soma igual a 1, como deve ser.

VI.3 - A Construção da Interpolante.

Para melhor entendimento, a idéia a ser, aqui, apresentada será desenvolvida, considerando o particular par de métodos embutidos de ordem 7 e 8 respectivamente, apresentado por [Dormand e Prince, 1981], e que considera 13 avaliações da função $f(x,y)$ a cada passo. Segundo [Shampine e Bogacki, 1990], esse é um dos melhores pares de métodos com ordem alta, justificando-se, portanto, sua utilização.

Considerando a observação do final do parágrafo anterior, neste caso, teremos $s=14$ e $c_{14}^*=0$, apesar de não considerarmos a técnica FSAL.

O problema a ser resolvido consiste em gerarmos aproximações $y_{n+\sigma}^*$ para $y(x_n+\sigma h)$, $0 < \sigma \leq 1$ utilizando informações



obtidas enquanto avançamos de x_n para x_{n+1} através do par de métodos de Runge-Kutta, definido por (6-1-c)

Na prática, o que se pretende é gerar $y_{n+\sigma}^*$ através de um método de Runge-Kutta com passo σh , que pode ser obtida a partir da idéia explorada em [Horn-1983] e apresentada no capítulo III deste trabalho. Isto é, para $\sigma \neq 0$ calculamos:

$$a_i^* = a_i / \sigma, \quad b_{ij}^* = b_{ij} / \sigma \quad \text{para } i=1(1)s, \quad j=1(1)i-1$$

Para isto, consideramos:

que são definidos como em (3-1).

$$y_{n+\sigma}^* = y_n^* + \sigma h \sum_{i=1}^s c_i^*(\sigma) k_i \quad (6-3-a)$$

onde

$$k_1 = f(x_n, y_n^*)$$

$$k_i = f(x_n + a_i \sigma h, y_n^* + \sigma h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}^* k_j) \quad , \quad i=2(1)s \quad , \quad (6-3-b)$$

Podemos representar a expressão do erro local da aproximação $y_{n+\sigma}^*$ em potências de σh , através da expansão em série de Taylor, como fizemos em (3-4). Isto é, podemos escrever:

$$y_{n+\sigma}^* - u(x_n + \sigma h) = \sum_{j=1}^{\infty} (\sigma h)^j \sum_{k=1}^{\lambda_j} \tau_k^{*(j)}(\sigma) D_k^{(j)}(\sigma) \quad (6-4)$$

onde apenas os coeficientes $\tau_k^{*(j)}(\sigma)$ dependem dos coeficientes do método de Runge-Kutta (6-3). Como todos os coeficientes definidos

no método já são conhecidos, exceto $c_i^*(\sigma)$, $i=1(1)14$, nossa meta é, então, determinar estes coeficientes a fim de garantir uma certa ordem na aproximação gerada pelo método definido em (6-3), para todo σ entre 0 e 1.

De (6-4) temos que a aproximação terá ordem m se:

$$\tau_k^{*(j)}(\sigma) = 0, \quad k=1(1)r_j \quad \text{e} \quad j=1(1)m \quad (6-6)$$

Vale a pena adiantar que, conforme veremos mais à frente, o valor máximo a ser alcançado por m será 5.

Observe que para $m=5$, como estamos trabalhando com métodos de ordem 7 e 8, podemos dispor de um certo grau de liberdade na escolha dos coeficientes. Logo, seria natural aproveitarmos desse fato, por exemplo, procurando encontrar entre os métodos de ordem 5, "o mais preciso possível". Isto é: o que se pretende é a busca de um método cujo coeficiente do termo dominante, na expressão do erro local, seja mínimo.

Vale a pena lembrar que a expressão do erro não é apenas dependente do método, mas também, do problema de valor inicial, através das diferenciais elementares $D_k^{(j)}$.

No caso em questão, como a ordem máxima alcançável é 5, devemos impor condições para que os coeficientes de $(\sigma h)^6$, que são as condições de ordem para método com ordem 6, sejam suficientemente próximos de zero na expansão (6-4). Isto é, vamos optar por tornar mínima para todo $\sigma \in (0,1)$ a quantidade:



$$T_6(\sigma) = \sigma^6 \sqrt{\left(\sum_{k=1}^{20} [\tau_k^{(6)}(\sigma)]^2 \right)} \quad (6-5)$$

[Dormand e Prince, 1980] mostram que os coeficientes do erro local para o método de ordem inferior a q podem ser expressos por:

$$\tau_q^{(j)} = \sum_{i=1}^{14} c_i r_{iq}^{(j)} - \frac{1}{\gamma_q^{(j)}} \quad (6-6)$$

onde:

$r_{iq}^{(j)}$, dependem dos parâmetros a_{st} e c_s das fórmulas de Runge-Kutta, definidas em (6-1).

$\gamma_q^{(j)}$, são valores numéricos que dependem somente de j e q . Ainda, vamos considerar a condição de simplificação:

$$r_{i,1}^{(k)} = \frac{a_i^{k-1}}{(k-1)!}, \quad \forall i, k \quad (6-7)$$

Por outro lado, os coeficientes do erro local da interpolante $y_{n,\sigma}^*$ podem ser determinados sem maiores dificuldades a partir das expressões correspondentes para $\tau_q^{(j)}$, dados por (6-6). Isto é:

$$\tau_k^{(j)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma^{j-1}} \sum_{i=1}^{14} c_i(\sigma) r_{ik}^{(j)} - \frac{1}{\gamma_k^{(j)}} \quad (6-8)$$



A condição de consistência do método de Runge-Kutta nos garante que:

$$c_1^*(\sigma) = 1 - \sum_{i=2}^{14} c_i^*(\sigma)$$

Fazendo agora:

$$\tau_q^{(j)} = 0 \quad q=1(1)\lambda_j \quad \text{e } j=1(1)5.$$

e usando de (6-8), obtemos:

$$\tau_1^{(1)}(\sigma) = \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{i1}^{(1)} - \frac{1}{\gamma_1^{(1)}} \quad (6-9-a)$$

$$\tau_1^{(2)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma} \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{i1}^{(2)} - \frac{1}{\gamma_1^{(2)}} \quad (6-9-b)$$

$$\tau_k^{(3)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{ik}^{(3)} - \frac{1}{\gamma_k^{(3)}}, \quad k=1, 2 \quad (6-9-c)$$

$$\tau_k^{(4)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma^3} \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{ik}^{(4)} - \frac{1}{\gamma_k^{(4)}}, \quad k=1(1)4 \quad (6-9-d)$$

$$\tau_k^{(5)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma^4} \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{ik}^{(5)} - \frac{1}{\gamma_k^{(5)}}, \quad k=1(1)9 \quad (6-9-e)$$

Usando as condições de simplificação dadas em (2-14), as 16 equações de (6-9) podem ser reduzidas a 5 equações dadas em (6-10) por:

Considerando como hipótese simplificadora de trabalho, $c_2^*(\sigma) = c_3^*(\sigma) = c_4^*(\sigma) = c_5^*(\sigma) = 0$ e, usando a condição de simplificação (6-7), o sistema (6-10) pode ser expresso na forma matricial por:



$$\tau_1^{(1)}(\sigma) = \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{i1}^{(1)} - \frac{1}{\gamma_1^{(1)}} \quad (6-10-a)$$

$$\tau_1^{(2)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma} \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{i1}^{(2)} - \frac{1}{\gamma_1^{(2)}} \quad (6-10-b)$$

$$\tau_1^{(3)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{i1}^{(3)} - \frac{1}{\gamma_1^{(3)}} \quad (6-10-c)$$

$$\tau_1^{(4)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma^3} \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{i1}^{(4)} - \frac{1}{\gamma_1^{(4)}} \quad (6-10-d)$$

$$\tau_1^{(5)}(\sigma) = \frac{1}{\sigma^4} \sum_{i=1}^{14} c_i^*(\sigma) r_{i1}^{(5)} - \frac{1}{\gamma_1^{(5)}} \quad (6-10-e)$$

$$\begin{bmatrix} a_6 & a_7 & \dots & a_{14} \\ a_6^2/2 & a_7^2/2 & \dots & a_{14}^2/2 \\ a_6^3/6 & a_7^3/6 & \dots & a_{14}^3/6 \\ a_6^4/24 & a_7^4/24 & \dots & a_{14}^4/24 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_6^*(\sigma) \\ c_7^*(\sigma) \\ \dots \\ c_{14}^*(\sigma) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma \\ \frac{\sigma^2}{3} \\ \frac{\sigma^3}{4} \\ \frac{\sigma^4}{5} \end{bmatrix} \quad (6-11)$$

Escrevendo em (6-10) os coeficientes $c_6^*(\sigma)$, $c_7^*(\sigma)$, $c_8^*(\sigma)$, $c_9^*(\sigma)$ em função dos demais, podemos reescrever o sistema como:

Dai, como foi feito em capitulos anteriores, usando as condições de simplificação dadas por (2-14) e (6-6), tornamos muitas destas equações redundantes, reduzindo, portanto, o sistema de 20 para 4 equações que, segundo (6-5), são:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/24 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ a_6 & a_7 & a_8 & a_9 \\ a_6^2 & a_7^2 & a_8^2 & a_9^2 \\ a_6^3 & a_7^3 & a_8^3 & a_9^3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_9 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_6^*(\sigma) \\ c_7^*(\sigma) \\ c_8^*(\sigma) \\ c_9^*(\sigma) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma}{2} - \sum_{i=10}^{14} c_i^*(\sigma) a_i \\ \frac{\sigma^2}{3} - \sum_{i=10}^{14} c_i^*(\sigma) a_i^2 \\ \frac{\sigma^3}{4} - \sum_{i=10}^{14} c_i^*(\sigma) a_i^3 \\ \frac{\sigma^4}{5} - \sum_{i=10}^{14} c_i^*(\sigma) a_i^4 \end{bmatrix} \quad (6-)$$

Como a_6, a_7, a_8 e a_9 devem ser não nulos, as matrizes diagonais terão determinante não nulo.

Ainda, como a segunda matriz nesse sistema é a matriz de Van der Mond, podemos concluir que, quando a_6, a_7, a_8 e a_9 forem distintos entre si a solução será não nula, e única para cada valor de σ entre 0 e 1. Isto é para cada valor de σ entre 0 e 1, um método de Runge-Kutta de ordem 5 é obtido.

Desejamos que esse método, além de ter ordem 5, gere bons aproximantes $y_{n,\sigma}^*$. Para isso, podemos considerar que a quantidade definida por (6-5) tenha um valor muito próximo de zero. O que na prática se traduz em obtermos um método com desempenho próximo do alcançável por um método de ordem 6.

Para condução do raciocínio, podemos tomar as condições de ordem que caracterizam um método de Runge-Kutta de ordem 6, que são dadas por (6-8), fazendo $j=6$ e $k=1(1)20$.

Daí, como foi feito em capítulos anteriores, usando as condições de simplificação dadas por (2-14) e (6-6), tornamos muitas destas equações redundantes, reduzindo, portanto, o sistema de 20 para 4 equações que, segundo [Shampine-Bogacki-1990], podem ser escritas na forma matricial por:

$$\begin{bmatrix} 3\sqrt{11}\bar{4} r_{61}^{(6)} & 3\sqrt{11}\bar{4} r_{71}^{(6)} & \dots & 3\sqrt{11}\bar{4} r_{141}^{(6)} \\ \sqrt{7}\bar{8} r_{67}^{(6)} & \sqrt{7}\bar{8} r_{77}^{(6)} & \dots & \sqrt{7}\bar{8} r_{147}^{(6)} \\ \sqrt{1}\bar{1} r_{615}^{(6)} & \sqrt{1}\bar{1} r_{715}^{(6)} & \dots & \sqrt{1}\bar{1} r_{1415}^{(6)} \\ r_{620}^{(6)} & r_{720}^{(6)} & \dots & r_{1420}^{(6)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_6^*(\sigma) \\ c_7^*(\sigma) \\ . \\ . \\ . \\ c_{14}^*(\sigma) \end{bmatrix} = \frac{\sigma^5}{720} \begin{bmatrix} 3\sqrt{11}\bar{4} \\ \sqrt{7}\bar{8} \\ \sqrt{1}\bar{1} \\ 1 \end{bmatrix} \quad (6-13)$$

Se o sistema (6-13) admitisse solução para todo σ entre 0 e 1, teríamos, a possibilidade de obtenção de um método de Runge-Kutta de ordem 6. Nas condições desejadas, utilizando o método dos mínimos quadrados para a resolução do sistema (6-13), obtemos, para cada valor de σ , os coeficientes de $c_i^*(\sigma)$ expressos como polinômios de grau 5 em σ . As expressões desses coeficientes podem ser encontradas de forma aproximada com 18 dígitos, em [Shampine-Bogacki-1990]. Embora não única, todas as soluções nos levam a:

$$T_6(\sigma) = 9.158 \times 10^{-5} |\sigma^5(\sigma-1)^2(14\sigma^2-14\sigma+3)|$$

Se considerarmos $T_6(\sigma)=0$ (o que corresponde a métodos com ordem 6), verificamos que a mesma só é satisfeita para $\sigma=0$, $\sigma=1$ e $\sigma=1/2 \pm \sqrt{7}/14$. Isto é, não é possível construir métodos de



Runge-Kutta nessas condições, com ordem 6, para todo σ entre 0 e 1. Portanto, a ordem máxima m alcançável para σ entre 0 e 1 será $m=5$, como havíamos adiantado.

VI.4 - A Estimativa do Erro Local

Conforme já vimos no capítulo II, uma técnica para o controle do erro local, que tem se mostrado computacionalmente eficiente, quando trabalhamos com um par de métodos de Runge-Kutta embutidas de ordem p e q , respectivamente, com $p < q$, é considerarmos a diferença das duas aproximações como uma nova estimativa para o erro local ao integrarmos com o método de ordem p .

Do desenvolvimento apresentado no parágrafo anterior, ao trabalharmos com um par de métodos embutidos de ordem 7 e 8, respectivamente, construímos um interpolante com ordem 5 para todo o intervalo entre x_n e x_{n+1} .

Vamos, agora, discutir o problema de controle do erro local da interpolante.

A primeira hipótese seria pensarmos em considerar a estimativa obtida em x_n e x_{n+1} , para a aproximação de ordem 7, como válida em todo ponto entre x_n e x_{n+1} , pois, na verdade, estamos considerando em cada ponto um $h^* = \sigma h$, com $0 < \sigma < h$, logo, com $h^* < h$. Porém, conforme constatamos, a interpolante obtida será de ordem 5, apenas garantindo ordem 6 para particulares valores de σ . Portanto, torna-se não confiável para todos os pontos entre x_n e



x_{n+1} a estimativa do erro local obtida para x_{n+1} . [Shampine-Bogacki-1990] propõe uma outra técnica para o controle do erro local, que apresentamos a seguir.

Conforme vimos no parágrafo anterior, para σ assumindo valores iguais a $1/2 + \sqrt{7}/14$ a interpolante terá ordem 6 e não 5, como acontece para os demais valores de σ entre 0 e 1.

Considerando, então, $\sigma^* = 1/2 + \sqrt{7}/14$, podemos gerar a aproximação para $y_{n+\sigma^*}$ dada por:

$$y_{n+\sigma^*} = y_n^* + \sigma^* \sum_{i=1}^{14} \bar{c}_i k_i$$

onde os coeficientes de c_i são obtidos através de (6-10) e (6-13). Sabemos que a aproximação $y_{n+\sigma^*}^*$ terá como erro local

$$\phi_6^*(\sigma) = (\sigma h)^6 \sum_{k=1}^{20} \tau_k^{*(6)} D_k^{(6)} + o(\sigma h)^7.$$

Logo, para $\sigma = \sigma^*$, esse erro local pode ser estimado através da quantidade $h\Delta = y_{n+\sigma^*}^* - \hat{y}_{n+\sigma^*}$, seguindo o raciocínio explicitado no início deste parágrafo.

Observe que $\Delta = \sum \bar{d}_i k_i$, $i=1(1)14$, com $\bar{d}'_i = \sigma^* [c_i^*(\sigma^*) - c_i]$. Para o par de métodos 7 e 8 considerados no parágrafo anterior, os valores de $\bar{d}_i$ são apresentados no trabalho de Shampine e Bogacki.

Então, a precisão apresentada por $\hat{y}_{n+\sigma^*}$ foi obtida por um método de Runge-Kutta com ordem 6, podendo ser pensada e válida, também para os demais valores de σ entre 0 e 1, geradas por um método de ordem 5. Essa é a proposta de Shampine e Bogacki, que



admitem ser uma técnica que teoricamente parece ser aceitável, embora não exaustivamente testada computacionalmente.

Um outro caminho para o controle do erro local é trabalharmos com limitantes, como o proposto por Gladwell e outros-1987, que demonstraram que:

$$\|\phi_e(\sigma)\| \leq h^6 \sqrt{20} T^*(\sigma) \Gamma^{(6)} + o(h^7)$$

onde $\Gamma^{(6)} = \max \|D_k^{(6)}\|$, com $k = 1(1)20$ e $T^*(\sigma)$, é como definido em (6-5).

A partir daí, podemos considerar a comparação de limitantes para o erro local, ao invés dos próprios erros.

Vale a pena registrar que, em qualquer das escolhas, devemos ser bastante conservadores na previsão do tamanho do passo, pois rejeições do passo, quando trabalhamos com método de Runge-Kutta, que exigem 13 avaliações da derivada por passo pode ser computacionalmente caro, tornando a técnica não competitiva.

VI.5 - Consideração final

A idéia para a construção deste interpolante, é bastante interessante, já que não necessita de avaliações adicionais, para determinar aproximantes em diferentes pontos, mas pode não ser aceitável em termos de custo computacional, pois o número de estágios é alto.

CAPÍTULO VII

Considerações finais

O objetivo principal desta dissertação foi o de apresentar de uma forma que esperamos tenha sido clara ao leitor, utilizando uma linguagem e notação única, as principais técnicas hoje disponíveis para, utilizando métodos de Runge-Kutta, integrar problemas de valor inicial com "saída densa", isto é, quando valores aproximados para a solução exata $y(x)$ são necessários em pontos muito próximos no intervalo de existência da solução.

Esses problemas passaram a ser efetivamente considerados a partir do momento em que se tinham métodos numéricos que permitiam a integração a passo variável e a um custo computacional adicional baixo. Nesse sentido, os métodos de Runge-Kutta explícitos embutidos trouxeram uma grande contribuição, pois a partir da diferença entre as duas aproximações geradas no ponto podemos estimar o erro local da aproximação de menor ordem, a um custo adicional pequeno. A partir dessa estimativa é possível determinar um "tamanho ótimo" para o próximo passo de integração e com uma boa chance de êxito. Isto pode nos levar a alcançar o final do intervalo de integração com um menor número de passos, logo, com economia no tempo de processamento e no número de avaliações da função $f(x,y)$.

Porém, essa possibilidade de trabalharmos com um tamanho de passo otimizado torna-se na maioria das vezes não aplicável para problemas com saída densa.



Isto levou os pesquisadores na área a buscar técnicas que ao se utilizar métodos de Runge-Kutta, tais problemas não eliminem a possibilidade de se considerar o tamanho ótimo para o passo.

Temos hoje várias técnicas que consideram essa possibilidade com eficiência computacional e qualidade numérica.

Um dos primeiros trabalhos nessa linha é o de Horn, publicado em 1983, cuja técnica apresentamos no capítulo III. Como pode ser constatado da análise do capítulo, Horn propõe, a partir de um método de Runge-Kutta básico a obtenção de um novo método com passo $h^* = \sigma h$, com a pretensão de que σ possa assumir qualquer valor no intervalo $[0,1]$.

Partindo do método de Fehlberg com ordem 4 (pag-34) Horn obtem para todo valor de σ , entre 0 e 1, um novo método de ordem 4 e ainda, para $\sigma=1$ temos um método de ordem 5. Esse método exige a cada ponto uma avaliação adicional da derivada $f(x,y)$. Para obtermos ordem 5 em qualquer ponto interno ao passo o método de Horn exige duas avaliações adicionais em cada ponto onde a aproximação é desejada.

Horn obteve um outro método que fornece aproximação com ordem 5 em qualquer ponto, a um custo adicional total de 5 avaliações da derivada.

Uma outra técnica voltada para a solução numérica de problemas com saída densa considera a associação de um polinômio interpolador de Hermite às aproximação disponíveis no passo, geradas através de um método de Runge-Kutta. Essa técnica foi



proposta por Shampine e publicada em 1985. O capítulo IV é dedicado à apresentação da mesma e à análise do erro da interpolante associada.

O problema computacional dessa técnica está na necessidade de que se tenha a cada passo um número mínimo de aproximações de ordem p , a fim de gerar a interpolante com ordem p . Isto faz com que o método de Runge-Kutta tenha necessariamente mais estágios do que o mínimo necessário para um método com ordem p .

No seção IV.4 foi apresentado um estudo sobre a precisão da interpolante, mostrando sob quais condições ele tem a mesma ordem que o método de Runge-Kutta considerado. Ainda, na seção final mostramos a relação entre a interpolante obtida e o método proposto por Horn.

Voltando à idéia considerada por Horn, no capítulo V mostramos como é possível obter métodos com ordem p , quando consideramos o passo $h' = \sigma h$ com σ fixo entre 0 e 1, e com ordem $p-1$ para todo ponto interno ao intervalo $[x_n, x_n + h']$. Vale lembrar que p é a ordem do método de Runge-Kutta considerado. Essa técnica foi inicialmente explorada por Sarafyan, em 1984, que levou a um aproximante com ordem 4. A partir daí, o próprio Sarafyan, propõe em 1987 uma família de aproximantes onde para qualquer escolha de σ entre 0 e 1 nos fornece uma aproximação com ordem 5, que necessitam de 6 avaliações da derivada, mas tendo 4 dessas avaliações comuns a todos os pontos (não dependem de σ). Todos os procedimentos para a obtenção desses métodos são desenvolvidos no capítulo V.



Finalmente, apresentamos no capítulo VI uma técnica interpolatória que permite gerar aproximações com ordem elevada, proposta por Shampine e Bogacki em 1990. A técnica foi desenvolvida considerando-se um par de métodos de Runge-Kutta com ordem 7 e 8 respectivamente, porém, como pode ser observado da análise apresentada no capítulo, podemos considera-la para qualquer ordem.

Além das técnicas aqui apresentadas não podemos deixar de mencionar outras apresentadas em [Enright e outros, 1986] que propõe a construção de interpolantes de Hermite-Birkhoff. Essa técnica foi estudada por [Vasconcelos, 1994] e apresentada em sua dissertação de mestrado. Analisando-a podemos dizer que a mesma é qualitativamente muito boa pois se serve das propriedades dos polinômios interpoladores de Hermite-Birkhoff, porém a existência da interpolante depende dos pontos de interpolação considerados.

Como não existem regras para a escolha desses pontos o problema de obtenção da interpolante pode levar ao insucesso da técnica, o que não acontece com nenhuma das técnicas aqui apresentadas.

Gostaríamos de registrar que nosso trabalho teve como meta o entendimento dessas técnicas e a possibilidade de apresentá-las de forma detalhada. Reconhecemos que em uma segunda etapa desse trabalho, a implementação das técnicas e uma avaliação comparativa pode trazer uma grande contribuição.



BIBLIOGRAFIA

- BUTCHER, J.C** - The Numerical Analysis of O.D.E: Runge-Kutta and General Methodos-John Wiley & Sons-1987.
- BURDEN - FAIRES** - Numerical Analysis; Pws-Kent Publishing der Company- 1993.
- DORMAND, J.R.** and **PRINCE, P.J.** - A Family of Embedded Rung-Kutta Formulas. Journal of Computational and Applied Mathematics, v.6, n.1, pp.19-26, 1980.
- FEHLBERG, E.**- Low-order classical Runge-Kutta formulas with step size control and their application to some heat transfer problems. Nasa TR R-315, National Aeronautics and Space Administration, Washington, DC, July, 1969.
- GLADWELL, I., SHAMPINE, L.F., BACA, L.S.** and **BRANKL, R.W.**- Pratical aspects of interpolation in Runge-Kutta codes SIAM J. Sci. St. Comput, vol.8, .3, pp.33-341, 1987.
- HORN, M.K** - Fourth- and Fifth-Order, Scaled Runge-Kutta Algorithms for Treating Dense Output*. SIAM J. Numer. Anal., Vol.20 , n°3, pp.558-568, 1983.



SCHOENBERG, J.J. - On Hermite-Stieltjes Interpolation. J. Math.

HUTA, A. - Une amélioration de la méthode de Runge-Kutta_Nyström pour la resolution numérique des équations differentielles du premier ordre. Acta Fac. Nat. Univ. Cominian. Math. 1, Relations (X) and (XI), pag.202, 1956.

KANSY, K. - Elementare Fehlerdastellung fur Ableitungen bei der Hermite-Interpolation, Numer. Math., 21 pp.401-404, (1983).

1990.

LAMBERT, J.D - Numerical methods for Ordinary Differential Systems: the initial value problem. John Wiley & Sons, Ltd- 1991.

Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, UNESP, 1994. 67p. Dissertação (Mestrado em

PRINCE, P.J. and **DORMAND, J.R.** - High order embedded Runge-Kutta Formulae. Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol.7, nº1, pp.67-75, 1981.

SARAFYAN, D. - Continuos Aproximate Solution of Ordinary Differential Equations and Their Systemas. Comp & Maths withs Appls, vol.10, nº2, pp.139-159, 1984.

SARAFYAN, D. - Families of Continuos Approximate process for the solution of ordinary differential equations. Comput. Math. Applic., v.16, n.10/11, pp.887-894, 1988.



SCHOENBERG, J.J - On Hermite-Birkhoff interpolation. J.Math. Anal. Appl., n 16, pp 538-543, 1966.

SHAMPINE, L.F - Interpolation For Runge-Kutta Methods*. SIAM J. Numer. Anal., vol.22, n°5, pp.1014-1027, 1985.

SHAMPINE, L.F. and **BOGACKI, P.** - Interpolating High-Order Runge-Kutta Formulas. Computers Math. Applic, v.20, n°3, pp.15-24, 1990.

VASCONCELOS, L.A.S. - Métodos de Runge-Kutta: O Controle do Erro Local e a Construção de Interpolante. São José do Rio Preto. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, UNESP, 1994. 67p. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional).



