

Janaina Anelusa Oliveira Buosi

Uma nova classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois

1910001097



**UMA NOVA CLASSE DE MÉTODOS DE
RUNGE-KUTTA DE PASSO DOIS**

Janayna Anelusa Oliveira Buosi

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada
MAP - 064

Uma nova classe de métodos de Runge-Kutta de passo 2

Janayna Anelusa Oliveira Buosi

Dissertação apresentada ao Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Câmpus de São José do Rio Preto, São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins



T 1.097/02

São José do Rio Preto

22 de fevereiro de 2002

x 518.72 : 51
B944m

10104003 - Matemática
aplicada

Buosi, Janayna Anelusa Oliveira.

Uma nova classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois / Janayna Anelusa Oliveira Buosi. – São José do Rio Preto : [s.n.], 2002.
101 f. : il. ; 30 cm.

Orientador: Sebastião Pereira Martins.

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas.

1. Matemática aplicada e computacional. 2. Análise numérica. 3. Métodos numéricos. 4. Equações diferenciais ordinária. I. Sebastião Pereira Martins. II. Universidade Estadual Paulista. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas. III. Título.

CDU – 519.62



À minha mãe,
Ao meu pai já falecido,
Ao meu noivo,
Aos meus amigos de pós
Dedico



Agradecimentos

Primeiramente, ao Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deu a oportunidade de fazer parte do grupo de pesquisa em História da Educação e da Pedagogia.

A todos os membros do grupo de trabalho: Prof. Dr. Manoel Monteiro Junior, Prof. Dr. Manoel H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deram a oportunidade de fazer parte do grupo de trabalho.

Ao Prof. Dr. Manoel H. M. Silva, a todos os membros do grupo de trabalho: Prof. Dr. Manoel H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deram a oportunidade de fazer parte do grupo de trabalho.

A todos os membros do grupo de trabalho: Prof. Dr. Manoel H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deram a oportunidade de fazer parte do grupo de trabalho.

A todos os membros do grupo de trabalho: Prof. Dr. Manoel H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deram a oportunidade de fazer parte do grupo de trabalho.

A todos os membros do grupo de trabalho: Prof. Dr. Manoel H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deram a oportunidade de fazer parte do grupo de trabalho.

A todos os membros do grupo de trabalho: Prof. Dr. Manoel H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deram a oportunidade de fazer parte do grupo de trabalho.

A todos os membros do grupo de trabalho: Prof. Dr. Manoel H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deram a oportunidade de fazer parte do grupo de trabalho.

A todos os membros do grupo de trabalho: Prof. Dr. Manoel H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que me deram a oportunidade de fazer parte do grupo de trabalho.

"A verdade é sempre a realidade interpretada,
acomodada a um fim construtivo e pedagógico."

Oswald de Andrade

Agradecimentos

Primeiramente, ao Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que mesmo aposentado, se propos orientar-me, com toda a sua sabedoria, tolerância e paciência.

A todos os membros da banca, Prof. Dr. Messias Meneguette Junior, Profa. Dra. Heloisa H. M. Silva e Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que aceitaram o convite de participarem desta banca.

Ao Prof. Dr. Maurílio Boaventura, à Profa. Dr. Heloisa H. M. Silva e à Profa. Dra. Cleonice Fátima Bracciali por toda colaboração.

À CAPES, pelo auxílio financeiro concedido durante toda a realização deste trabalho.

A todos os professores e funcionários do DCCE, que de alguma forma contribuíram para a minha formação.

Aos colegas da pós-graduação e amigos, pelo companheirismo, amizade e incentivo que ajudaram para a elaboração deste trabalho.

Ao meu noivo Juliano, pela sua compreensão e apoio.

À minha mãe por todo apoio dado, desde o afetivo até o financeiro.

Finalmente, quero agradecer a Deus o nosso criador, pois sem Ele nada disso seria possível.



Resumo

O objetivo principal deste trabalho é apresentar a classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois (TSRK), proposta por Z. Jackiewicz e S. Tracogna em 1995. Apresentamos essa classe de métodos na sua formulação clássica, como um método linear geral e por fim como um A-método. Dessa forma, estudamos o erro de discretização e construímos as condições de ordem até a ordem 6 e através dessas condições foram construídas algumas famílias de métodos. Abordamos a estabilidade dessa classe de métodos, a construção do polinômio de estabilidade e como ilustração apresentamos alguns métodos A-estáveis ou A_0 -estáveis.

Sumário

Abstract

The main objective of this work is to introduce the class of two-step Runge-Kutta methods (TSRK), proposed by Z. Jackiewicz and S. Tracogna in 1995. We present this class of methods in the classic formulation, as a general linear method and finally as a A-method. In this way, we study the discretization error and build order conditions up to order 6 from which we derive some family of methods. We also deal with the stability of this class of methods and the construction of the stability polynomial. Some A-stable or A_0 -stable methods are presented for illustration.

Sumário

Introdução	10
1 Métodos de Runge-Kutta de passo um	12
1.1 Introdução	12
1.2 A classe dos métodos de Runge-Kutta	13
1.3 Erro de truncamento local e as condições de ordem	14
1.4 Estabilidade	16
2 Métodos lineares gerais e A-métodos	21
2.1 Introdução	21
2.2 Método linear geral	21
2.3 O método de Runge-Kutta como um método linear geral	23
2.4 O método de Runge-Kutta como um A-método	24
3 Métodos de Runge-Kutta de passo dois	26
3.1 Introdução	26
3.2 Um resumo histórico	26
4 Uma classe de métodos RK de passo dois	30
4.1 Introdução	30
4.2 A formulação clássica do método	31

4.3	A formulação como um método linear geral e como um A-método	33
5	Erro de discretização	35
5.1	Introdução	35
5.2	Erro de discretização	35
5.3	As constantes de erro	38
5.4	A condição de ordem	44
6	A construção das condições de ordem até ordem 6	54
6.1	Introdução	54
6.2	As condições de ordem	54
7	Construção de métodos TSRK	60
7.1	Introdução	60
7.2	Métodos TSRK com $m=1$	60
7.3	Métodos TSRK com $m = 2$	63
8	A estabilidade dos métodos TSRK	69
8.1	Introdução	69
8.2	Construção do polinômio de estabilidade	69
8.3	Polinômios de estabilidade para $m=1$	74
8.4	Polinômios de estabilidade para $m=2$	80
8.5	Métodos TSRK A-estáveis e A_0 -estáveis	86
	Considerações finais	92
	Referências bibliograficas	100

Introdução

A classe dos métodos de Runge-Kutta, como ferramenta para a integração numérica de sistemas de equações diferenciais ordinárias associados a uma condição inicial, tem sido desde 1895 objeto de investigação.

Byrne e Lambert [9], propuseram em 1966 uma nova classe de métodos que não podiam ser mais caracterizados como métodos de Runge-Kutta, pois passaram a exigir aproximações em dois pontos anteriores a cada integração, mas mantinham a característica dos métodos de Runge-Kutta, de combinar valores da derivada da função que se está integrando em pontos interiores ao intervalo. Tais métodos foram inicialmente denominados *métodos Pseudo Runge-Kutta* e mais à diante *métodos de Runge-Kutta de passo dois*.

O objetivo principal deste trabalho é apresentar uma dessas classes de métodos, proposta por Z. Jackiewicz e S. Tracogna em 1995 [16].

No primeiro capítulo apresentamos conceitos básicos relacionados com a classe dos métodos de Runge-Kutta, em especial resultados relativos à estabilidade dessa classe de métodos.

No capítulo seguinte são apresentadas as classes dos métodos lineares gerais e dos A-métodos, propostos respectivamente por Butcher [7] e Albrecht [2].

Um resumo histórico evolutivo dos métodos de Runge-Kutta de passo dois é apresentado no capítulo 3.

A classe dos métodos de Runge-Kutta de passo dois, proposta por Jackiewicz e Tracogna [16] é o objetivo maior deste trabalho. Os resultados aqui apresentados, apesar de estarem todos relacionados em [4] e [16] foram por nós considerados com maiores detalhes de desenvolvimento e justificativas, bem como abordados em uma sequência diferente da considerada pelos autores. Assim o fizemos por entendermos que o leitor com menor domínio no assunto teria menos dificuldades de leitura e compreensão.

No capítulo 4, inicialmente apresentamos essa classe de métodos através de sua formulação clássica, e a seguir escrevendo-os como um método linear geral e como um A-método, conforme proposto pelos autores.

No capítulo seguinte apresentamos, de forma detalhada, o estudo do erro de discretização, considerando resultados e desenvolvimentos de Albrecht.

A partir de resultados desse capítulo, são construídos no capítulo 6 as condições de ordem para a classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois, apresentando as condições para métodos de ordem até 6.

No capítulo 7, a partir das condições de ordem desenvolvidas no capítulo anterior, apresentamos famílias de métodos de Runge-Kutta de passo dois com um e com dois estágios, para ordem 2, 3 e 4.

Finalmente, no capítulo 8 abordamos a estabilidade dessa classe de métodos, explorando a construção do polinômio de estabilidade e como ilustração apresentamos alguns métodos que são A-estáveis ou A_0 -estáveis.



Capítulo 1

Métodos de Runge-Kutta de passo um

1.1 Introdução

Seja o problema de valor inicial (pvi) dado por:

$$\begin{cases} y' = F(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (1.1)$$

onde $F : [a, b] \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, para o qual, assumiremos a existência e a unicidade da solução $y(x)$.

Consideremos a discretização do intervalo $[a, b]$ em pontos $x_n = x_0 + nh$, para $n = 1, 2, \dots, N$, onde $x_0 = a$ e $h \in \mathbb{R}_+$ é o tamanho do passo em cada integração do pvi.

Para a integração numérica de (1.1) considerando a discretização de $[a, b]$, os métodos de Runge-Kutta (MRK) constituem uma classe de métodos de passo um muito utilizada e eficiente para uma parcela considerável de problemas.

Esta classe de métodos se divide em três subclasses: explícitos, implícitos e semi-implícitos.

Enquanto os MRK explícitos são muito utilizados para a resolução de problemas de valor inicial não-stiff, os implícitos são mais eficientes se o problema é stiff.

Neste capítulo apresentaremos formalmente a classe dos métodos de Runge-Kutta e, considerando tais métodos definiremos o erro de truncamento local, as



condições de ordem e alguns tipos de estabilidades.

Esses conceitos serão utilizados nos próximos capítulos deste trabalho.

1.2 A classe dos métodos de Runge-Kutta

Definição 1.1. Denomina-se **método de Runge-Kutta (MRK)** com s estágios, a todo método de passo um dado por:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i K_i \quad (1.2)$$

$$K_i = F(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j), \quad i = 1, 2, \dots, s;$$

com $c_i, a_{ij}, b_i \in \mathbb{R}$, y_{n+1} é uma aproximação para $y(x)$ em $x = x_n + c_i h$ e ainda os c_i 's satisfazem:

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij} \quad e \quad 0 \leq c_i \leq 1,$$

para $i = 1, 2, \dots, s$.

Podemos representar os coeficientes desse método através de uma tabela matricial, proposta por Butcher, dada por:

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^t \end{array} \quad \text{ou} \quad \begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_s \end{array}$$

Dependendo dos valores assumidos pelos coeficientes da matriz A , podemos caracterizar as três subclasses de métodos de Runge-Kutta:

• **explícitos** : se $a_{ij} = 0$, para todo $i \leq j$. Isto é, a matriz A é estritamente triangular inferior.

$$\begin{array}{c|cccccc} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ c_2 & a_{21} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{s\ s-1} & 0 \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & 0 \end{array}$$

• **semi-implícitos** : se $a_{ij} = 0$, para todo $i < j$ e $a_{ii} \neq 0$, para pelo menos um i . Isto é, a matriz A é triangular inferior.

• **implícitos** : se $a_{ij} \neq 0$, para pelo menos um $i < j$. Isto é, a matriz A não é triangular inferior.

Entre os semi-implícitos ainda podemos destacar uma classe especial de métodos, quando $a_{ij} = 0$ para $i < j$, $j = 1, 2, \dots, s$ e $a_{ii} = \lambda$ ($\lambda \in \mathbb{R}$); $i = 1, 2, \dots, s$. São os denominados métodos de **RK diagonalmente implícitos**, identificados na literatura por métodos DIRK.

1.3 Erro de truncamento local e as condições de ordem

Definição 1.2. Denominamos erro de truncamento local de um método de Runge-Kutta com s estágios, num ponto x_{n+1} , ao resíduo T_{n+1} dado por:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - [y(x_n) + h \sum_{i=1}^s b_i K_i] \quad (1.3)$$

onde as avaliações K_i 's são obtidas utilizando-se a solução exata $y(x_n)$ em lugar de y_n .

Considerando a hipótese local $y_n = y(x_n)$ e denotando por $\tilde{y}_{n+1}$ à aproximação obtida, temos:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1} \quad (1.4)$$

ou seja, o erro de truncamento local nada mais é do que a diferença entre a solução exata e a aproximada no ponto x_{n+1} .

Expandindo $y(x_{n+1})$ e $\tilde{y}_{n+1}$ em série de Taylor na vizinhança do ponto x_n , podemos expressar T_{n+1} em potências de h , isto é:

$$T_{n+1} = U_1h + U_2h^2 + U_3h^3 + \dots + U_{p+1}h^{p+1} + \dots,$$

onde os U_i 's são expressões que envolvem produtos de coeficientes do método e derivadas parciais da função $F(x, y)$. Assim podemos definir o conceito a seguir.

Definição 1.3. Dizemos que o método de Runge-Kutta tem **ordem de consistência** p se sob a hipótese local $y_n = y(x_n)$ obtivermos que $T_{n+1} = O(h^{p+1})$.

Ou seja,

$$U_1 = U_2 = U_3 = \dots = U_p = 0 \quad \text{e} \quad U_{p+1} \neq 0.$$

No entanto, para que tenhamos $U_i = 0$ para $i = 1, 2, \dots, p$, é necessário que as expressões que envolvem os coeficientes do método sejam nulas. Isto gera o que chamamos de **condições de ordem**, as quais os coeficientes do método deverão satisfazer para que este tenha ordem de consistência p .

A tabela abaixo, nos dá as condições de ordem para um método de Runge-Kutta (MRK) ter até ordem 5.

Ordem					Condições
$p = 5$	$p = 4$	$p = 3$	$p = 2$	$p = 1$	
				↓	$\sum_i b_i = 1$
			↓		$\sum_i b_i c_i^j = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, p-1$
		↓			$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}$
					$\sum_{i,j} b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8}$
					$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}$
	↓				$\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}$
					$\sum_{i,j} b_i c_i^2 a_{ij} c_j = \frac{1}{10}$
					$\sum_{i,j} b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15}$
					$\sum_{i,j,k} b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{30}$
					$\sum_i b_i (\sum_i a_{ij} c_j)^2 = \frac{1}{20}$
					$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20}$
					$\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k = \frac{1}{40}$
					$\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60}$
↓					$\sum_{i,j,k,m} b_i a_{ij} a_{jk} a_{km} c_m = \frac{1}{120}$

É importante destacar que as condições acima se fazem necessárias de forma acumulativa. Isto é, para que tenhamos ordem 2 a condição $\sum_i b_i = 1$ também é necessária. E assim por diante.

Conforme Lambert [19], existe uma relação muito importante entre o número mínimo de estágios e a ordem máxima atingível, dada pela seguinte tabela:

Ordem (p)	Número de estágios (s)
1	1
2	2
3	3
4	4
5	6
6	7
7	9
8	11
9	$12 \leq s \leq 17$
10	$13 \leq s \leq 17$

1.4 Estabilidade

Definição 1.4. *Aplicando o MRK dado por (1.2) ao problema teste*

$$y' = \lambda y, \lambda \in \mathbb{C}, \Re(\lambda) < 0 \tag{1.5}$$

cuja solução exata é $y(x) = e^{\lambda x}$, obteremos uma equação de diferenças da forma

$$y_{n+1} = R(z)y_n \tag{1.6}$$

*onde $z = \lambda h$ e $R(z)$ é o fator denominado **função de estabilidade do método**.*

A solução de (1.6) é:

$$y_n = \{R(z)\}^n y_0$$

Logo, $y_n \rightarrow 0$ com $n \rightarrow \infty$ se, somente se,

$$|R(z)| < 1 \tag{1.7}$$

Assim, definimos:

Definição 1.5. *Um método de Runge-Kutta é dito **absolutamente estável** para os valores de z que satisfazem (1.7).*



Definição 1.6. Denominamos a região $\mathcal{R}_A$ do plano complexo, na qual se verifica (1.7), de **região de estabilidade absoluta do método**, definida por

$$\mathcal{R}_A = \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| < 1\} \quad (1.8)$$

e a intersecção de $\mathcal{R}_A$ com o eixo real de **intervalo de estabilidade absoluta**.

Na formulação clássica dos métodos de RK a função de estabilidade $R(z)$ é uma expressão racional, ou seja, quociente de dois polinômios. Logo, não devemos falar em polinômio de estabilidade.

Por outro lado, quando escritos como um MLG ou na forma de um A-método, conceitos introduzidos respectivamente por Butcher [7] e Albrecht [2] que serão apresentados no capítulo seguinte, podemos construir o polinômio de estabilidade de um método de RK e então determinar seu intervalo de estabilidade absoluta.

Para isso serão necessários alguns resultados da teoria dos polinômios, que apresentaremos à seguir.

Definição 1.7. Um polinômio $\pi(r)$ de grau k é dito ser de **Schur** se as raízes r_t satisfazem $|r_t| < 1$, $t = 1, 2, \dots, k$.

Infelizmente, essa condição geralmente é de difícil verificação. O que justifica a existência de alguns critérios como caminho alternativo. Aqui, ilustraremos o critério conhecido como critério de Schur.

• Critério de Schur

Seja $\phi(r)$ um polinômio de grau k , com coeficientes complexos, da forma:

$$\phi(r) = c_k r^k + c_{k-1} r^{k-1} + \dots + c_1 r + c_0 \quad (1.9)$$

onde $c_k \neq 0$, $c_0 \neq 0$.

Consideremos os polinômios:

$$\hat{\phi}(r) = c_0^* r^k + c_1^* r^{k-1} + \dots + c_{k-1}^* r + c_k^*, \quad (1.10)$$

onde c_j^* é o complexo conjugado de c_j , e

$$\phi_1(r) = \frac{1}{r} [\hat{\phi}(0)\phi(r) - \phi(0)\hat{\phi}(r)]. \quad (1.11)$$

Claramente $\phi_1(r)$ tem grau no máximo $k - 1$. Então, podemos definir o seguinte teorema, conhecido como **teorema de Schur** ou **critério de Schur**.



Teorema 1.1. $\phi(r)$ é um polinômio de Schur $\Leftrightarrow |\hat{\phi}(0)| > |\phi(0)|$ e $\phi_1(r)$ é um polinômio de Schur.

Observe que podemos aplicar sucessivamente o teorema e a cada estágio o grau do polinômio é reduzido de uma unidade até alcançar grau um. Assim, temos simplesmente que dispor de um critério para que um polinômio de grau um seja um polinômio de Schur.

A partir da caracterização do polinômio de Schur podemos encontrar o intervalo de estabilidade absoluta do método, o que é fornecido pelo critério a seguir.

• Critério de Routh-Hurwitz

Este critério tem como objetivo considerar uma transformação que leve as raízes do polinômio que estão dentro do círculo unitário para a região à esquerda do plano complexo. Para isso consideremos a seguinte transformação:

$$r = \frac{1+z}{1-z}; \quad r \in \mathbb{C}, \quad z \in \mathbb{C}$$

Observe que esta transformação leva os pontos do círculo unitário $|r| = 1$ sobre o eixo imaginário $\text{Re}(z) = 0$, os pontos do interior do círculo $|r| < 1$ à esquerda do plano $\text{Re}(z) < 0$ e o ponto $r = 1$ em $z = 0$.

Seja:

$$P(z) := (1-z)^k \pi \left[\frac{1+z}{1-z} \right] = a_0 z^k + a_1 z^{k-1} + \dots + a_k \quad (1.12)$$

com $a_0 > 0$.

Uma condição necessária e suficiente para que as raízes de $P(z)$ estejam à esquerda do plano complexo, ou seja, para que $\pi(r)$ seja um polinômio de Schur são que todos os determinantes menores principais de ordem dois sejam positivos, onde Q é a matriz $k \times k$, definida por:

$$Q = \begin{bmatrix} a_1 & a_3 & a_5 & \dots & a_{2k-1} \\ a_0 & a_2 & a_4 & \dots & a_{2k-2} \\ 0 & a_1 & a_3 & \dots & a_{2k-3} \\ 0 & a_0 & a_2 & \dots & a_{2k-4} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_k \end{bmatrix}$$

onde $a_j = 0$, $j > k$.

Esta condição implica $a_j > 0$, $j = 0, 1, \dots, k$. Assim os coeficientes positivos em (1.12) é uma condição necessária mas não suficiente para estabilidade absoluta.

Para $k = 2, 3, 4$ uma condição necessária e suficiente para a estabilidade absoluta dada pelo critério de Routh-Hurwitz é:

- $k=2$: $a_j > 0$, $j = 0, 1, 2$,
- $k=3$: $\begin{cases} a_j > 0, j = 0, 1, 2, 3 \\ a_1 a_2 - a_3 a_0 > 0 \end{cases}$,
- $k=4$: $\begin{cases} a_j > 0, j = 0, 1, \dots, 4 \\ a_1 a_2 a_3 - a_0 a_3^2 - a_4 a_1^2 > 0 \end{cases}$.

Comparado com o critério de Schur, esta aproximação tem a desvantagem de ser necessária uma manipulação preliminar para obter a equação (1.12). Por outro lado, para pequenos valores de k , é mais fácil encontrar inequações em $\bar{h}$ pelo critério de Routh-Hurwitz do que pelo critério de Schur.

Portanto, na prática construímos o polinômio de estabilidade do método de RK e verificamos se ele é um polinômio de Schur. Na hipótese afirmativa teremos como intervalo de estabilidade absoluta do método aquele para o qual o polinômio é de Schur.

Estes critérios serão utilizados mais tarde em um dos capítulos, onde discutiremos a estabilidade de uma classe de métodos de Runge-Kutta de passo 2, para encontrar o intervalo de estabilidade absoluta e a região de A-estabilidade e A_0 -estabilidade do método.

Alguns problemas de valor inicial envolvendo sistemas de equações diferenciais ordinárias exibem um fenômeno de comportamento que permite caracterizar o problema como sendo do tipo **stiff**. Esse tipo de problema pode ser informalmente caracterizado pelo que se segue:

*"Se um método numérico com um intervalo de estabilidade absoluta finita quando aplicado a um problema com quaisquer condições iniciais é forçado a usar, num certo intervalo de integração, um tamanho de passo excessivamente pequeno, se comparado com o tamanho do passo em intervalos vizinhos, então o problema é do tipo **stiff** nesse intervalo."*

Para resolver numericamente problemas stiff a maior dificuldade está em se trabalhar com um método adequado. A condição de stiff às vezes impõe restrições

tão severas ao tamanho do passo que alguns métodos se tornam computacionalmente inadequados. Isto nos leva a procurar métodos com a maior região de estabilidade $\mathcal{R}_A$ possível. A classe mais recomendada para esse tipo de problema é a dos métodos **A-estáveis**.

A condição de A-estabilidade está relacionada com a condição de estabilidade da matriz do método. Assim, torna-se necessária a definição a seguir, que será considerada no próximo capítulo.

Definição 1.8. Uma matriz é **estável** se existir uma constante c tal que $\|A^m\|_\infty \leq c$ para todo $m = 1, 2, \dots$ onde $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$.

Definição 1.9. Um método é **A-estável** se $\mathcal{R}_A \supseteq \{z/\operatorname{Re}(z) < 0\}$.

Definição 1.10. Um método é **A_0 -estável** se $\mathcal{R}_A \supseteq \{z/\operatorname{Re}(z) < 0, \Im m(z) = 0\}$.

A **A-estabilidade** garante que, para qualquer $h > 0$ escolhido, a solução numérica de $y' = \lambda y$, não crescerá indefinidamente à medida que $n \rightarrow \infty$.

Mas essa exigência pode não ser suficiente quando $\operatorname{Re}(z) \rightarrow -\infty$ e uma nova condição de estabilidade deve ser considerada.

Definição 1.11. Um método é **L-estável** se for A-estável e, além disso,

$$\lim_{\operatorname{Re}(z) \rightarrow -\infty} |R(z)| = 0 \quad (1.13)$$

É importante observar que:

$$\text{L-estabilidade} \Rightarrow \text{A-estabilidade} \Rightarrow \text{A}_0\text{-estabilidade}$$

Capítulo 2

Métodos lineares gerais e A-métodos

2.1 Introdução

Conforme inicialmente proposto por Butcher (1966) em [6], podemos considerar em uma abordagem teórica única as classes de métodos lineares de passo múltiplo e de Runge-Kutta, entre outros. Essa nova classe de métodos é denominada classe dos Métodos Lineares Gerais.

Em [1], [2] e [3] Albrecht também propõe uma nova representação para os métodos numéricos que integram um pvi, denominada A-métodos. Neste capítulo apresentaremos os métodos Lineares Gerais (MLG) e os A-métodos.

2.2 Método linear geral

Consideremos o pvi definido em (1.1) agora escrito em sua forma autônoma:

$$\begin{cases} y' = f(y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (2.1)$$

onde $f : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^{n+1}$ é definida num intervalo onde se tem garantia da existência e unicidade da solução $y(x)$. Assim, podemos definir:



Definição 2.1. Sejam as matrizes $\hat{A} = (\hat{a}_{ij})$, $\hat{B} = (\hat{b}_{ij})$ e $\hat{C} = (\hat{c}_{ij}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Definimos por **método linear geral (MLG)** a todo método numérico para a obtenção de aproximações $y_i^{[n]}$ para a solução de um pvi dado por (2.1), onde:

$$y_i^{[n]} = \sum_{j=1}^N \hat{a}_{ij} y_j^{[n-1]} + h \sum_{j=1}^N \hat{b}_{ij} f(y_j^{[n]}) + h \sum_{j=1}^N \hat{c}_{ij} f(y_j^{[n-1]}), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2.2)$$

com $y_i^{[n]}$ aproximações para $y(x)$ no n -ésimo passo de integração e $y_j^{[n-1]}$ aproximações no passo anterior.

Na hipótese de se estar trabalhando com integração a passo variável serão considerados apenas os passos com sucesso para a caracterização do n -ésimo passo.

Podemos observar que um MLG pode ser caracterizado pelas matrizes $\hat{A}$, $\hat{B}$ e $\hat{C}$. Logo, podemos denotar um MLG dado por (2.2) como um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$. E se a matriz $\hat{C}$ for nula, simplesmente por $(\hat{A}, \hat{B})$.

Definição 2.2. Um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ é dito **estável** se a matriz $\hat{A}$ for estável.

Teorema 2.1. Um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ é **estável** se, e somente se, o polinômio característico da matriz $\hat{A}$ não tiver raiz com valor absoluto maior do que um e as de valor absoluto com tamanho um forem simples.

Definição 2.3. Um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ é dito **pré-consistente** se:

$$\hat{A}\hat{e} = \hat{e},$$

com $\hat{e} = (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^N$.

Se, em adição, para algum vetor $v \in \mathbb{R}^N$ tivermos:

$$\hat{A}v + (\hat{B} + \hat{C})\hat{e} = v + \hat{e},$$

o método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ será **consistente**.

Teorema 2.2. Um MLG é **convergente** se, e somente se, for consistente e estável.

Uma demonstração para os teoremas 2.1 e 2.2 pode ser encontrada em Butcher [8].

2.3 O método de Runge-Kutta como um método linear geral

Se considerarmos o pvi dado na forma autônoma (2.1), podemos reescrever o MRK definido por (1.2) numa forma equivalente, dada por:

$$\begin{aligned} Y_i &= y_{n-1} + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j), \quad i = 1, 2, \dots, s, \\ y_n &= y_{n-1} + h \sum_{i=1}^s b_i f(Y_i), \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2.3)$$

Se considerarmos $N = s + 1$, $y_i^{[n]} = Y_i$ para $i = 1, 2, \dots, s$ e $y_{s+1}^{[n]} = y_n$, podemos reescrever o MRK (2.3) na forma de um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$, como:

$$\begin{aligned} y_1^{[n]} &= y_{s+1}^{[n-1]} + h[a_{11} f(y_1^{[n]}) + a_{12} f(y_2^{[n]}) + \dots + a_{1s} f(y_s^{[n]})] \\ y_2^{[n]} &= y_{s+1}^{[n-1]} + h[a_{21} f(y_1^{[n]}) + a_{22} f(y_2^{[n]}) + \dots + a_{2s} f(y_s^{[n]})] \\ &\vdots \\ y_s^{[n]} &= y_{s+1}^{[n-1]} + h[a_{s1} f(y_1^{[n]}) + a_{s2} f(y_2^{[n]}) + \dots + a_{ss} f(y_s^{[n]})] \\ y_{s+1}^{[n]} &= y_{s+1}^{[n-1]} + h[b_1 f(y_1^{[n]}) + b_2 f(y_2^{[n]}) + \dots + b_s f(y_s^{[n]})] \end{aligned} \quad (2.4)$$

ou

$$\begin{bmatrix} y_1^{[n]} \\ y_2^{[n]} \\ \vdots \\ y_s^{[n]} \\ y_{s+1}^{[n]} \end{bmatrix} = \hat{A} \begin{bmatrix} y_1^{[n-1]} \\ y_2^{[n-1]} \\ \vdots \\ y_s^{[n-1]} \\ y_{s+1}^{[n-1]} \end{bmatrix} + h \hat{B} \begin{bmatrix} f(y_1^{[n]}) \\ f(y_2^{[n]}) \\ \vdots \\ f(y_s^{[n]}) \\ f(y_{s+1}^{[n]}) \end{bmatrix} + h \hat{C} \begin{bmatrix} f(y_1^{[n-1]}) \\ f(y_2^{[n-1]}) \\ \vdots \\ f(y_s^{[n-1]}) \\ f(y_{s+1}^{[n-1]}) \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

onde

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{B} = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} & 0 \\ \hline b_1 & b_2 & \dots & b_s & 0 \end{array} \right] \quad e \quad \hat{C} = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Portanto, em (2.5) temos a classe dos MRK com s estágios reescrita na forma (2.2), isto é, como um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ ou simplesmente método $(\hat{A}, \hat{B})$.

Assim, todos os resultados da teoria dos métodos lineares gerais podem ser considerados para o estudo de métodos de Runge-Kutta. Para isso basta reescrevê-los na forma (2.5).

2.4 O método de Runge-Kutta como um A-método

Albrecht [1], [2] e [3] propõe uma nova formulação para a classe geral de métodos numéricos para a integração de um pvi, denominada representação A-métodos, e definida por:

Definição 2.4. Denomina-se **A-método** a todo método numérico para a integração de (1.1) escrito na forma:

$$Y_{n+1} = \mathcal{A}Y_n + h\phi_f(x_n, Y_n, Y_{n+1}; h) \quad (2.6)$$

onde $Y_n, \phi_f \in \mathbb{R}^{\sigma m}$, $\mathcal{A}$ é uma matriz $\sigma m \times \sigma m$ (com m a dimensão do sistema diferencial) e ϕ_f satisfaz a condição de Lipschitz com respeito ao segundo e terceiro argumentos. O subscrito f indica que a dependência de ϕ sobre Y_n, Y_{n+1} é através da função $f(x, y)$ que define o sistema diferencial.

Considere o pvi dado por (1.1) e o método de Runge-Kutta dado por (1.2). Vamos então escrever o método (1.2) como um A-método.

Primeiramente, escrevemos o método de Runge-Kutta (1.2) numa forma alternativa dada por:

$$\begin{aligned} y_{n+c_i} &= y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} F(x_n + c_j h, y_{n+c_j}), \quad i = 1, 2, \dots, s \\ y_{n+1} &= y_n + h \sum_{i=1}^s b_i F(x_n + c_i h, y_{n+c_i}). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Sejam Y_{n+1} e $\hat{F}(x_n, Y_{n+1}; h)$ definidos por:

$$\begin{aligned} Y_{n+1} &:= [y_{n+c_1}, y_{n+c_2}, \dots, y_{n+c_s}, y_{n+1}]^T \\ \hat{F}(x_n, Y_{n+1}; h) &:= [F(x_n + c_1 h, y_{n+c_1}), \dots, F(x_n + c_s h, y_{n+c_s}), F(x_{n+1}, y_{n+1})]^T \end{aligned}$$

e definimos $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ por:

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0_{ss} & e \\ 0_s & 1 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} & 0 \\ b_1 & b_2 & \dots & b_s & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & 0_s \\ b^T & 0 \end{bmatrix}$$

onde O_{ss} é uma matriz nula $s \times s$, $0_s = [0, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^s$ e $e = [1, 1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^s$.

Logo o método (2.7) pode ser escrito na forma de um A-método como:

$$Y_{n+1} = \mathcal{A}Y_n + hB\hat{F}(x_n, Y_{n+1}; h). \quad (2.8)$$

3.1 Introdução

Este capítulo apresenta uma introdução geral sobre os métodos de Runge-Kutta, com ênfase na forma de A-métodos. Os métodos de Runge-Kutta são uma classe de métodos de passo único para a solução numérica de equações diferenciais ordinárias. Eles são baseados na ideia de usar uma única avaliação da função por passo para aproximar a solução.

Por fim, são apresentadas algumas aplicações dos métodos de Runge-Kutta a problemas de valor inicial. Para obter mais detalhes sobre os métodos de Runge-Kutta, o leitor pode consultar a literatura especializada, como o livro de Hairer et al. (1993) ou o livro de Butcher (1993).

3.2 Uma revisão histórica

Um dos primeiros trabalhos publicados sobre métodos de Runge-Kutta foi o de Runge (1895). Ele introduziu o método de Runge-Kutta de quarta ordem, que é um dos métodos mais conhecidos e utilizados atualmente.

Capítulo 3

Métodos de Runge-Kutta de passo dois

3.1 Introdução

Neste capítulo introduziremos uma nova classe de métodos que, apesar de uma formalização bastante semelhante à dos métodos de Runge-Kutta não apresenta sua característica básica, que é serem de passo um, pois exigem a cada integração o conhecimento de duas aproximações em pontos anteriores e consecutivos.

Por isso, são denominados métodos de Runge-Kutta de passo dois. Por outro lado, embora tenham passo dois, não pertencem à classe dos métodos lineares de passo múltiplo, pois consideram combinações das derivadas em pontos internos ao passo de integração, como acontece com os métodos de Runge-Kutta.

3.2 Um resumo histórico

Um dos primeiros trabalhos introduzindo esses novos métodos foi publicado em 1966 por Byrne e Lambert [9], onde os métodos por eles propostos tem a seguinte formalização:



$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s (v_i K_i^{n-1} + w_i K_i^n)$$

com:

$$\begin{aligned} K_i^{n-1} &= f(x_{n-1} + c_i h, y_{n-1} + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^{n-1}) \\ K_i^n &= f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^n) \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\text{com } c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, s.$$

Os métodos de (3.1) foram definidos como métodos **Pseudo Runge-Kutta**.

Byrne [10] em 1967, Rosen [25] em 1968 e Nakashima [20] e [21], em 1982, propuseram novas formulações de métodos pseudo Runge-Kutta, mas que são pequenas variações de (3.1).

Em 1987, Nakashima [22] apresenta uma classe de métodos pseudo Runge-Kutta, definida por:

$$Y_{n+1} = r_1 Y_{n-1} + r_2 Y_n + h \sum_{i=1}^s b_i K_i$$

com:

$$\begin{aligned} K_1 &= f(x_{n-1}, Y_{n-1}) \\ K_2 &= f(x_n, Y_n) \\ K_i &= f(x_n + c_i h, Y_n + a_i(Y_n - Y_{n-1}) + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j), \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\text{com } i = 3, 4, \dots, s, \text{ para } c_i = a_i + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}, \quad 0 \leq c_i \leq 1.$$

Os métodos definidos por (3.1) e (3.2), quando considerados isoladamente, permitem somente trabalhar com tamanho de passo fixo.

A partir de um trabalho de R.A. Renaut [24], publicado em 1990, os métodos pseudo Runge-Kutta passaram a ser denominados métodos de Runge-Kutta de passo dois.

Os métodos propostos por Renaut são do tipo explícito com s-estágios, definidos por:

$$y_{n+1} = (1 - \beta)y_n + \beta y_{n-1} + h \sum_{i=1}^s [v_i f(y_{n-1}^i) + w_i f(y_n^i)]$$

com:

$$y_s^i = \begin{cases} y_i & \text{para } i = 1 \\ y_s + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(y_s^j) & \text{para } i > 1. \end{cases} \quad (3.3)$$

Observe que os métodos de (3.3) são uma generalização dos métodos propostos por Byrne e Lambert [9] e definidos em (3.1). Basta considerarmos em (3.3) $\beta = 0$ que obtemos (3.1).

Uma pequena evolução do trabalho de R.A. Renaut [24] é apresentada por Jackiewicz, Renaut e Feldstein [13] em 1991, que propuseram a seguinte classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois:

$$y_{n+1} = (1 - \theta)y_n + \theta y_{n-1} + h \sum_{i=1}^s [v_i f(Y_{n-1}^i) + w_i f(Y_n^i)]$$

com:

$$Y_{n-1}^i = y_{n-1} + h \sum_{k=1}^s a_{ik} f(Y_{n-1}^k)$$

$$Y_n^i = y_n + h \sum_{k=1}^s a_{ik} f(Y_n^k), \quad i = 1, 2, \dots, s.$$

Em [17], Jackiewicz e Zennaro, em 1992, propõem a seguinte classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois:

$$Y_{n+1} = (1 - \xi\theta)Y_n + \xi\theta Y_{n-1} + h_{n-1} \sum_{i=1}^s (v_i K_i^{n-1} + \xi w_i K_i^n)$$

com:

$$K_i^{n-1} = f(x_{n-1} + c_i h_{n-1}, Y_{n-1} + h_{n-1} \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j^{n-1})$$

$$K_i^n = f(x_n + c_i h_n, Y_n + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j^n), \quad i = 1, 2, \dots, s$$

para $\xi = \frac{h_n}{h_{n-1}}$, $h_n = x_{n+1} - x_n$ e $c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}$.

Podemos representar os coeficientes desta classe de métodos através de uma tabela semelhante à proposta por Butcher para os métodos de Runge-Kutta. Para isso basta definirmos os vetores $c = (c_1, c_2, \dots, c_s)^T$, $v = (v_1(\xi), v_2(\xi), \dots, v_s(\xi))^T$, $w = (w_1(\xi), w_2(\xi), \dots, w_s(\xi))^T$ e a matriz $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{s \times s}$ e teremos:

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline \theta & v^T \\ & w^T \end{array} \quad \text{ou} \quad \begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & & & \\ c_2 & a_{21} & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{s \ s-1} \\ \hline \theta & v_1(\xi) & v_2(\xi) & \dots & v_{s-1}(\xi) & v_s(\xi) \\ & w_1(\xi) & w_2(\xi) & \dots & w_{s-1}(\xi) & w_s(\xi) \end{array}$$

Podemos observar que o método (3.5) permite integração a passo variável, pois a cada passo considera-se um passo de tamanho h_n . Além disso, a cada passo são exigidas s novas avaliações da derivada da função f e não $2s$ como a definição do método deixa transparecer. Isto porque, o método aproveita valores já calculados no passo anterior.

No capítulo seguinte abordaremos uma nova classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois, cuja abordagem quanto à caracterização de suas condições de ordem e aspectos relacionados com a estabilidade dos mesmos constituem o objetivo principal deste trabalho.

Capítulo 4

Uma classe de métodos RK de passo dois

4.1 Introdução

Neste capítulo estudaremos uma nova classe de métodos R.K. de passo dois, que a cada passo dependem do conhecimento de aproximações para a solução de (1.1) em dois pontos consecutivos, anteriores ao ponto em que se está integrando.

Mostraremos que estes métodos podem ser considerados como casos especiais dos métodos lineares gerais, introduzidos por Butcher, e que são bastante eficientes quando comparados a outros métodos, quanto ao número de avaliações da função $F(x, y)$, necessárias para se conseguir a ordem desejada.

Suas condições de ordem podem ser obtidas utilizando-se resultados propostos por Albrecht [2], conforme veremos no capítulo seguinte. Esta classe de métodos, quando considerados como métodos lineares gerais, pode ser dividida em 4 subclasses, que são apropriadas para a solução numérica de equações diferenciais stiff ou não stiff, trabalhando num ambiente para computação sequencial ou em paralelo, conforme o caso.



4.2 A formulação clássica do método

Seja o problema de valor inicial (pvi) dado em sua forma autônoma por:

$$\begin{cases} y'(x) = f(y(x)), & x \in [x_0, b] \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (4.1)$$

onde a função $f : \mathbb{R}^q \rightarrow \mathbb{R}^q$.

Iremos trabalhar com métodos que dependem de valores dos estágios obtidos em dois passos consecutivos e anteriores, ou seja, métodos de Runge-Kutta de passo dois (TSRK). Estes métodos, introduzidos por Jackiewicz e Tracogna em [16], tem a seguinte formulação clássica:

$$y_{i+1} = \theta y_{i-1} + (1 - \theta) y_i + h \sum_{j=1}^m (v_j f(Y_{i-1}^j) + w_j f(Y_i^j)) \quad (4.2)$$

$$Y_i^j = u_j y_{i-1} + (1 - u_j) y_i + h \sum_{s=1}^m (a_{js} f(Y_{i-1}^s) + b_{js} f(Y_i^s))$$

com

$$j = 1, 2, \dots, m$$

$$i = 1, 2, \dots, N - 1$$

$$N : \text{inteiro positivo}$$

$$h = \frac{(b - x_0)}{N} \text{ é um tamanho de passo fixo}$$

$$x_i = x_0 + ih ; i = 0, 1, \dots, N$$

$$y_i \text{ é uma aproximação para } y(x_i)$$

$$y \text{ é a solução de (4.1).}$$

Podemos representar (4.2) através de uma tabela de coeficientes, semelhante à representação proposta por Butcher para os MRK:

u	A	B	ou	u_1	a_{11}	a_{12}	$\dots$	a_{1m}	b_{11}	b_{12}	$\dots$	b_{1m}
θ	v^t	w^t		u_2	a_{21}	a_{22}	$\dots$	a_{2m}	b_{21}	b_{22}	$\dots$	b_{2m}
				$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$
				u_m	a_{m1}	a_{m2}	$\dots$	a_{mm}	b_{m1}	b_{m2}	$\dots$	b_{mm}
				θ	v_1	v_2	$\dots$	v_m	w_1	w_2	$\dots$	w_m

Observe que para iniciarmos o processo de integração com o método (4.2) além de y_0 precisamos da aproximação y_1 em x_1 e valores dos estágios Y_o^s , $s = 1, 2, \dots, m$ no intervalo $[x_0, x_1]$. Esses valores poderão ser encontrados, por exemplo, utilizando-se um MRK com ordem apropriada.

Assim, para avançarmos de x_i para x_{i+1} necessitamos calcular somente Y_i^j , uma vez que Y_{i-1}^j já foi obtido no passo anterior. Isto nos propicia um ganho extra de graus de liberdade, associados com um método de passo 2, sem a necessidade de avaliações extras da função.

A forma da matriz B permite determinar o custo de implementação do método (4.2). Butcher em [8], introduziu a classe de métodos de integração com múltiplos estágios e diagonalmente implícitos (DIMSIM). Considerando essa classe de métodos propostos por Butcher, os métodos TSRK (4.2) podem se subdivididos em 4 subclasses ou tipos, que dependem da natureza do problema a resolver e do tipo de arquitetura computacional disponível.

Olhando os TSRK segundo as subclasses propostas por Butcher concluímos que para métodos do tipo 1 ou tipo 2, a matriz B tem a forma:

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_{21} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

ou

$$B = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & \dots & 0 \\ b_{21} & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \dots & \lambda \end{bmatrix}$$

com $\lambda \neq 0$, e estas são apropriadas para sistemas diferenciais não stiff ou stiff, respectivamente, utilizando-se técnica computacional sequencial.

Para métodos do tipo 3 ou tipo 4, a matriz B é da forma:

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

ou

$$B = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda \end{bmatrix}$$

com $\lambda \neq 0$, e são apropriadas para sistemas de equações diferenciais não stiff ou stiff, respectivamente, utilizando a técnica computacional em paralelo.

A existência de parâmetros extras em (4.2), quando comparados com (3.4) e (3.5) pode ser explorada como vantagem ao se utilizar esses métodos TSRK, pois conseguimos construir métodos com alta ordem e com a necessidade de poucos estágios. Por exemplo, existem métodos TSRK explícitos definidos por (4.2) com estágios de ordem 2 e 3 e $m=1$; e com estágios de ordem 4 e 5 com $m=2$. Este ganho considerável em eficiência é um dos maiores atrativos desses métodos para solução de problemas tais como sistemas de EDOs com dimensão alta, equações integrais de Volterra e equações integro-diferenciais, onde há a necessidade de se avaliar o núcleo em muitos pontos no intervalo de integração.

4.3 A formulação como um método linear geral e como um A-método

Consideremos a notação:

$$\begin{aligned} Y_i &= [Y_i^1, Y_i^2, \dots, Y_i^m]^T & w &= [w_1, w_2, \dots, w_m] \\ f(Y_i) &= [f(Y_i^1), f(Y_i^2), \dots, f(Y_i^m)]^T & u &= [u_1, u_2, \dots, u_m] \\ e &= [1, 1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^m & A &= (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times m} \\ v &= [v_1, v_2, \dots, v_m] & B &= (b_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times m} \end{aligned}$$

Utilizando-a no método (4.2), obtemos:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= \theta y_{i-1} + (1 - \theta)y_i + hv^T f(Y_{i-1}) + hw^T f(Y_i) \\ Y_i &= uy_{i-1} + (e - u)y_i + hAf(Y_{i-1}) + hBf(Y_i) \end{aligned} \quad (4.3)$$

com $i = 1, 2, \dots, N - 1$.

Para podermos simplificar ainda mais, vamos acrescentar às equações de (4.3) duas identidades, obtendo:

$$\begin{aligned} Y_{i-1} &= Y_{i-1} \\ Y_i &= uy_{i-1} + (e - u)y_i + hAf(Y_{i-1}) + hBf(Y_i) \\ y_i &= y_i \\ y_{i+1} &= \theta y_{i-1} + (1 - \theta)y_i + hv^T f(Y_{i-1}) + hw^T f(Y_i) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Usando notação matricial, podemos reescrever (4.4) como:

$$\begin{bmatrix} Y_{i-1} \\ Y_i \\ y_i \\ y_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & e - u \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \theta & 1 - \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_{i-2} \\ Y_{i-1} \\ y_{i-1} \\ y_i \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ v^T & w^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(Y_{i-1}) \\ f(Y_i) \\ f(y_i) \\ f(y_{i+1}) \end{bmatrix}$$

Sejam:

$$\begin{aligned} Z_i &= [Y_{i-1}^T, Y_i^T, y_i, y_{i+1}]^T \\ Z_0 &= [0, Y_0^T, y_0, y_1]^T \\ f(Z_i) &= [f(Y_{i-1})^T, f(Y_i)^T, f(y_i), f(y_{i+1})]^T \end{aligned}$$

com Y_0 obtido da iteração inicial, e consideremos as matrizes:

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & e - u \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \theta & 1 - \theta \end{bmatrix}, \quad \mathcal{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ v^T & w^T & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

onde $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B} \in \mathbb{R}^{(2m+2) \times (2m+2)}$, com 0 vetor nulo ou matriz nula de dimensão apropriada e $I \in \mathbb{R}^{m \times m}$.

Assim, podemos representar (4.3) como um A-método, como definido por Albrecht [1]:

$$Z_i = \mathcal{A}Z_{i-1} + h\mathcal{B}f(Z_i); \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \quad (4.5)$$

Como a matriz $\mathcal{A}$ tem autovalores $1, -\theta$ e o autovalor 0 com multiplicidade $2m$ e como a matriz $\mathcal{B}$ é uma matriz triangular inferior seus autovalores estão na diagonal principal, ou seja, possui como autovalores 0 com multiplicidade $m+2$ e os autovalores da matriz B .

Logo, por um resultado de Albrecht podemos adiantar que o método é zero estável $\iff -1 < \theta < 1$.

No capítulo seguinte desenvolveremos as condições de ordem dos métodos (4.2), agora escritos na forma (4.5).

Capítulo 5

Erro de discretização

5.1 Introdução

No capítulo anterior mostramos que os métodos de Runge-Kutta de passo dois, definidos em (4.2), podem ser representados na formulação de um A-método, conforme proposto por Albrecht [1] e [2].

Neste capítulo vamos utilizar os conceitos qualitativos desenvolvidos por Albrecht, e assim estabelecer os resultados necessários para se construir as condições de ordem dos TSRK propostos por Jackiewicz e Tracogna [16], o que será feito no próximo capítulo.

5.2 Erro de discretização

Sejam os valores dos estágios Y_i^j aproximações para $y(x_i + c_j h)$, e consideremos os vetores:

$$\begin{aligned}c &= [c_1, c_2, \dots, c_m]^T \\ y(x_i + ch) &= [y(x_i + c_1 h), y(x_i + c_2 h), \dots, y(x_i + c_m h)]^T \\ f(y(x_i + ch)) &= [f(y(x_i + c_1 h)), f(y(x_i + c_2 h)), \dots, f(y(x_i + c_m h))]^T \\ z(x_i) &= [y(x_{i-1} + ch)^T, y(x_i + ch)^T, y(x_i), y(x_{i+1})]^T \\ f(z(x_i)) &= [f(y(x_{i-1} + ch))^T, f(y(x_i + ch))^T, f(y(x_i)), f(y(x_{i+1}))]^T\end{aligned}$$

Exigindo que $y(x_i + c_j h) - Y_i^j = O(h)$ pelo menos, para $j = 1, 2, \dots, m$ quando $h \rightarrow 0$, podemos definir o conceito de erro de discretização para o método (4.5).



Definição 5.1. Denominamos erro de discretização do método (4.5) em x_{i+1} e denotamos por $hd(x_{i+1})$ o resíduo obtido substituindo-se Z_i por $z(x_i)$, Z_{i-1} por $z(x_{i-1})$ e $f(Z_i)$ por $f(z(x_i))$ em (4.5).

Isto é:

$$\begin{aligned} z(x_i) &= \mathcal{A}z(x_{i-1}) + h\mathcal{B}f(z(x_i)) + hd(x_{i+1}), \text{ com } i = 1, 2, \dots, N-1 \\ z(x_0) &= [0, y(x_0 + ch)^T, y(x_0), y(x_1)]^T. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Seja $d(x_{i+1}) = [d^{(1)}(x_{i+1})^T, d^{(2)}(x_{i+1})^T, \hat{d}^{(1)}(x_{i+1}), \hat{d}^{(2)}(x_{i+1})]^T$. Então obtemos:

$$\begin{aligned} hd(x_{i+1}) &= h \begin{bmatrix} d^{(1)}(x_{i+1}) \\ d^{(2)}(x_{i+1}) \\ \hat{d}^{(1)}(x_{i+1}) \\ \hat{d}^{(2)}(x_{i+1}) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} y(x_{i-1} + ch) \\ y(x_i + ch) \\ y(x_i) \\ y(x_{i+1}) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & e - u \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \theta & 1 - \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y(x_{i-2} + ch) \\ y(x_{i-1} + ch) \\ y(x_{i-1}) \\ y(x_i) \end{bmatrix} \\ &\quad - h \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ v^T & w^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(y(x_{i-1} + ch)) \\ f(y(x_i + ch)) \\ f(y(x_i)) \\ f(y(x_{i+1})) \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} y(x_{i-1} + ch) - y(x_{i-1} + ch) \\ y(x_i + ch) - uy(x_{i-1}) - (e - u)y(x_i) - hAf(y(x_{i-1} + ch)) - hBf(y(x_i + ch)) \\ y(x_i) - y(x_i) \\ y(x_{i+1}) - \theta y(x_{i-1}) - (1 - \theta)y(x_i) - hv^T f(y(x_{i-1} + ch)) - hw^T f(y(x_i + ch)) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Considerando que $e = [1, 1, \dots, 1]^T$ então $y(x_{i-1} + ch)^T = y(x_i + (c - e)h)^T$, e ainda, $y'(x_i) = f(y(x_i))$.

Logo, podemos definir:

$$\begin{aligned}hd^{(2)}(x_{i+1}) &= y(x_i + ch) - uy(x_{i-1}) - (e - u)y(x_i) \\ &\quad - hAy'(x_i + (c - e)h) - hBy'(x_i + ch)\end{aligned}\quad (5.2)$$

e

$$\begin{aligned}h\hat{d}^{(2)}(x_{i+1}) &= y(x_{i+1}) - \theta y(x_{i-1}) - (1 - \theta)y(x_i) \\ &\quad - hv^T y'(x_i + (c - e)h) - hw^T y'(x_i + ch)\end{aligned}\quad (5.3)$$

Expandindo $y(x_{i-1})$, $y(x_{i+1})$, $y(x_i + ch)$, $y'(x_i + (c - e)h)$ e $y'(x_i + ch)$ em série de Taylor em torno do ponto x_i e substituindo nas expressões (5.2) e (5.3), obtemos respectivamente:

$$\begin{aligned}hd^{(2)}(x_{i+1}) &= y(x_i) + chy'(x_i) + c^2 \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + c^3 \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \dots \\ &\quad - u \left[y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \dots \right] - (e - u)y(x_i) \\ &\quad - hA \left[y'(x_i) + (c - e)hy''(x_i) + (c - e)^2 \frac{h^2}{2!} y'''(x_i) + \dots \right] \\ &\quad - hB \left[y'(x_i) + chy''(x_i) + c^2 \frac{h^2}{2!} y'''(x_i) + \dots \right] \\ &= [c + u - A - B]hy'(x_i) + \left[\frac{(c^2 - u)}{2!} - (c - e)A - cB \right] h^2 y''(x_i) \\ &\quad + \left[\frac{(c^3 + u)}{3!} - \frac{(c - e)^2}{2!} A - \frac{c}{2!} B \right] h^3 y'''(x_i) + \dots\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}h\hat{d}^{(2)}(x_{i+1}) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \dots \\ &\quad - \theta \left[y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \dots \right] - (1 - \theta)y(x_i) \\ &\quad - hv^T \left[y'(x_i) + (c - e)hy''(x_i) + (c - e)^2 \frac{h^2}{2!} y'''(x_i) + \dots \right] \\ &\quad - hw^T \left[y'(x_i) + chy''(x_i) + c^2 \frac{h^2}{2!} y'''(x_i) + \dots \right] \\ &= [1 + \theta - v^T - w^T]hy'(x_i) + \left[\frac{1}{2!} - \frac{1}{2!}\theta - (c - e)v^T - cw^T \right] h^2 y''(x_i) \\ &\quad + \left[\frac{1}{3!} + \frac{1}{3!}\theta - \frac{(c - e)^2}{2!} v^T - \frac{c}{2!} w^T \right] h^3 y'''(x_i) + \dots\end{aligned}$$

5.3 As constantes de erro

Sejam:

$$C_\nu = \frac{c^\nu}{\nu!} - \frac{(-1)^\nu}{\nu!} u - \frac{A(c-e)^{\nu-1}}{(\nu-1)!} - \frac{Bc^{\nu-1}}{(\nu-1)!} \quad (5.4)$$

$$\hat{C}_\nu = \frac{1}{\nu!} - \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \theta - \frac{v^T(c-e)^{\nu-1}}{(\nu-1)!} - \frac{w^T c^{\nu-1}}{(\nu-1)!} \quad (5.5)$$

com $\nu = 1, 2, \dots$. As constantes C_ν e $\hat{C}_\nu$ são denominadas de **Constantes de erro** do método.

Assim:

$$h \begin{bmatrix} d^{(1)}(x_{i+1}) \\ d^{(2)}(x_{i+1}) \\ \hat{d}^{(1)}(x_{i+1}) \\ \hat{d}^{(2)}(x_{i+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ C_1 h y'(x_i) + C_2 h^2 y''(x_i) + C_3 h^3 y'''(x_i) + \dots \\ 0 \\ \hat{C}_1 h y'(x_i) + \hat{C}_2 h^2 y''(x_i) + \hat{C}_3 h^3 y'''(x_i) + \dots \end{bmatrix}$$

Se assumirmos que $C_1 = 0$, obtemos a condição para a garantia de consistência do método:

$$\begin{aligned} C_1 &= 0 \\ \Rightarrow 0 &= c - (-1)u - A \frac{(c-e)^{1-1}}{(1-1)!} - B \frac{c^{1-1}}{(1-1)!} \\ \Rightarrow 0 &= c + u - Ae - Be \\ \Rightarrow c &= (A+B)e - u. \end{aligned}$$

No que segue iremos supor esta condição de consistência válida. Ela será necessária quando formos construir as condições de ordem para os métodos que estamos estudando.

Subtraindo (4.5) de (5.1) obtemos a relação de recorrência linear.

$$\begin{aligned} z(x_i) - Z_i &= \mathcal{A}[z(x_{i-1}) - Z_{i-1}] + h\mathcal{B}[f(z(x_i)) - f(Z_i)] + hd(x_{i+1}) \\ \Rightarrow q(x_{i+1}) &= \mathcal{A}q(x_i) + h\mathcal{B}t(x_{i+1}) + hd(x_{i+1}) \end{aligned} \quad (5.6)$$

onde:

$$q(x_{i+1}) = \begin{bmatrix} q^{(1)}(x_{i+1}) \\ q^{(2)}(x_{i+1}) \\ \hat{q}^{(1)}(x_{i+1}) \\ \hat{q}^{(2)}(x_{i+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y(x_i + (c-e)h) - Y_{i-1} \\ y(x_i + ch) - Y_i \\ y(x_i) - y_i \\ y(x_{i+1}) - y_{i+1} \end{bmatrix}$$

$$t(x_{i+1}) = \begin{bmatrix} t^{(1)}(x_{i+1}) \\ t^{(2)}(x_{i+1}) \\ \hat{t}^{(1)}(x_{i+1}) \\ \hat{t}^{(2)}(x_{i+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(y(x_i + (c-e)h)) - f(Y_{i-1}) \\ f(y(x_i + ch)) - f(Y_i) \\ f(y(x_i)) - f(y_i) \\ f(y(x_{i+1})) - f(y_{i+1}) \end{bmatrix}$$

com $i = 1, 2, \dots, N-1$; e

$$q(x_1) = \begin{bmatrix} 0 \\ y(x_0 + ch) - Y_0 \\ y(x_0) - y_0 \\ y(x_1) - y_1 \end{bmatrix}; \quad t(x_1) = \begin{bmatrix} 0 \\ f(y(x_0 + ch)) - f(Y_0) \\ f(y(x_0)) - f(y_0) \\ f(y(x_1)) - f(y_1) \end{bmatrix}.$$

Logo:

$$q(x_2) = \mathcal{A} q(x_1) + h\mathcal{B} t(x_2) + hd(x_2)$$

$$\begin{aligned} q(x_3) &= \mathcal{A} q(x_2) + h\mathcal{B} t(x_3) + hd(x_3) \\ &= \mathcal{A} \{ \mathcal{A} q(x_1) + h\mathcal{B} t(x_2) + hd(x_2) \} + h\mathcal{B} t(x_3) + hd(x_3) \\ &= \mathcal{A}^2 q(x_1) + h\mathcal{A}\mathcal{B} t(x_2) + h\mathcal{A} d(x_2) + h\mathcal{B} t(x_3) + hd(x_3) \\ &= \mathcal{A}^2 q(x_1) + h \sum_{l=1}^2 \mathcal{A}^{2-l} d(x_{l+1}) + h \sum_{l=1}^{2-l} \mathcal{A}^{2-l} \mathcal{B} t(x_{l+1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q(x_4) &= \mathcal{A} q(x_3) + h\mathcal{B} t(x_4) + hd(x_4) \\ &= \mathcal{A} \left\{ \mathcal{A}^2 q(x_1) + h \sum_{l=1}^2 \mathcal{A}^{2-l} d(x_{l+1}) + h \sum_{l=1}^{2-l} \mathcal{A}^{2-l} \mathcal{B} t(x_{l+1}) \right\} \\ &\quad + h\mathcal{B} t(x_4) + hd(x_4) \\ &= \mathcal{A}^3 q(x_1) + h \sum_{l=1}^3 \mathcal{A}^{3-l} d(x_{l+1}) + h \sum_{l=1}^{3-l} \mathcal{A}^{3-l} \mathcal{B} t(x_{l+1}) \end{aligned}$$

Por recursividade, concluímos que (5.6) pode ser reescrita como:

$$q(x_{i+1}) = \mathcal{A}^i q(x_1) + h \sum_{l=1}^i \mathcal{A}^{i-l} d(x_{l+1}) + h \sum_{l=1}^i \mathcal{A}^{i-l} \mathcal{B} t(x_{l+1}). \quad (5.7)$$

Também podemos verificar que:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}^2 &= \begin{bmatrix} 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & e-u \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \theta & 1-\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & e-u \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \theta & 1-\theta \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & u & e-u \\ 0 & 0 & (e-u)\theta & u+(e-u)(1-\theta) \\ 0 & 0 & \theta & 1-\theta \\ 0 & 0 & (1-\theta)\theta & \theta+(1-\theta)^2 \end{bmatrix} \\ \mathcal{A}^3 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & (e-u)\theta & u+(e-u)(1-\theta) \\ 0 & 0 & u\theta+(e-u)(1-\theta)\theta & u(1-\theta)+(e-u)(\theta+(1-\theta)^2) \\ 0 & 0 & (1-\theta)\theta & \theta+(1-\theta)^2 \\ 0 & 0 & \theta^2+(1-\theta)^2\theta & \theta(1-\theta)+(1-\theta)(\theta+(1-\theta)^2) \end{bmatrix}\end{aligned}$$

assim as matrizes $\mathcal{A}^\mu$ para $\mu \geq 2$ tem a seguinte estrutura:

$$\mathcal{A}^\mu = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \alpha_{11}^{(\mu)} & \alpha_{12}^{(\mu)} \\ 0 & 0 & \alpha_{21}^{(\mu)} & \alpha_{22}^{(\mu)} \\ 0 & 0 & \beta_{11}^{(\mu)} & \beta_{12}^{(\mu)} \\ 0 & 0 & \beta_{21}^{(\mu)} & \beta_{22}^{(\mu)} \end{bmatrix}$$

onde os vetores $\alpha_{kl}^{(\mu)} \in \mathbb{R}^m$ e os escalares $\beta_{kl}^{(\mu)}$ são uniformemente limitados com respeito a cada μ , se o método (4.5) é zero-estável.

Portanto, para $i \geq 1$, temos:

$$\begin{aligned}q(x_{i+1}) &= \mathcal{A}^i q(x_1) + h d(x_{i+1}) + h \mathcal{A} d(x_i) + h \sum_{l=1}^{i-2} \mathcal{A}^{i-l} d(x_{l+1}) + h \mathcal{B} t(x_{i+1}) \\ &\quad + h \mathcal{A} \mathcal{B} t(x_i) + h \sum_{l=1}^{i-2} \mathcal{A}^{i-l} \mathcal{B} t(x_{l+1})\end{aligned}\tag{5.8}$$

Reescrevendo a equação (5.8) na forma matricial, podemos estabelecer algumas relações.

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} q^{(1)}(x_{i+1}) \\ q^{(2)}(x_{i+1}) \\ \hat{q}^{(1)}(x_{i+1}) \\ \hat{q}^{(2)}(x_{i+1}) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & \alpha_{11}^{(i)} & \alpha_{12}^{(i)} \\ 0 & 0 & \alpha_{21}^{(i)} & \alpha_{22}^{(i)} \\ 0 & 0 & \beta_{11}^{(i)} & \beta_{12}^{(i)} \\ 0 & 0 & \beta_{21}^{(i)} & \beta_{22}^{(i)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q^{(1)}(x_1) \\ q^{(2)}(x_1) \\ \hat{q}^{(1)}(x_1) \\ \hat{q}^{(2)}(x_1) \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} d^{(1)}(x_{i+1}) \\ d^{(2)}(x_{i+1}) \\ \hat{d}^{(1)}(x_{i+1}) \\ \hat{d}^{(2)}(x_{i+1}) \end{bmatrix} \\
&+ h \begin{bmatrix} 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & e-u \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \theta & 1-\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d^{(1)}(x_i) \\ d^{(2)}(x_i) \\ \hat{d}^{(1)}(x_i) \\ \hat{d}^{(2)}(x_i) \end{bmatrix} \\
&+ h \sum_{l=1}^{i-2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \alpha_{11}^{(i-l)} & \alpha_{12}^{(i-l)} \\ 0 & 0 & \alpha_{21}^{(i-l)} & \alpha_{22}^{(i-l)} \\ 0 & 0 & \beta_{11}^{(i-l)} & \beta_{12}^{(i-l)} \\ 0 & 0 & \beta_{21}^{(i-l)} & \beta_{22}^{(i-l)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d^{(1)}(x_{l+1}) \\ d^{(2)}(x_{l+1}) \\ \hat{d}^{(1)}(x_{l+1}) \\ \hat{d}^{(2)}(x_{l+1}) \end{bmatrix} \\
&+ h \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ v^T & w^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t^{(1)}(x_{i+1}) \\ t^{(2)}(x_{i+1}) \\ \hat{t}^{(1)}(x_{i+1}) \\ \hat{t}^{(2)}(x_{i+1}) \end{bmatrix} \\
&+ h \begin{bmatrix} 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & e-u \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \theta & 1-\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ v^T & w^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t^{(1)}(x_i) \\ t^{(2)}(x_i) \\ \hat{t}^{(1)}(x_i) \\ \hat{t}^{(2)}(x_i) \end{bmatrix} \\
&+ h \sum_{l=1}^{i-2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \alpha_{11}^{(i-l)} & \alpha_{12}^{(i-l)} \\ 0 & 0 & \alpha_{21}^{(i-l)} & \alpha_{22}^{(i-l)} \\ 0 & 0 & \beta_{11}^{(i-l)} & \beta_{12}^{(i-l)} \\ 0 & 0 & \beta_{21}^{(i-l)} & \beta_{22}^{(i-l)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ v^T & w^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t^{(1)}(x_{l+1}) \\ t^{(2)}(x_{l+1}) \\ \hat{t}^{(1)}(x_{l+1}) \\ \hat{t}^{(2)}(x_{l+1}) \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Para simplificar a notação escreveremos $q_l^{(\nu)}$, $\hat{q}_l^{(\nu)}$, $t_l^{(\nu)}$, $\hat{t}_l^{(\nu)}$, $d_l^{(\nu)}$ e $\hat{d}_l^{(\nu)}$ ao invés de $q^{(\nu)}(x_l)$, $\hat{q}^{(\nu)}(x_l)$, $t^{(\nu)}(x_l)$, $\hat{t}^{(\nu)}(x_l)$, $d^{(\nu)}(x_l)$ e $\hat{d}^{(\nu)}(x_l)$.

Então temos:

$$\begin{bmatrix} q_{i+1}^{(1)} \\ q_{i+1}^{(2)} \\ \hat{q}_{i+1}^{(1)} \\ \hat{q}_{i+1}^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11}^{(i)} \hat{q}_1^{(1)} + \alpha_{12}^{(i)} \hat{q}_1^{(2)} + h d_{i+1}^{(1)} \\ \alpha_{21}^{(i)} \hat{q}_1^{(1)} + \alpha_{22}^{(i)} \hat{q}_1^{(2)} + h d_{i+1}^{(2)} \\ \beta_{11}^{(i)} \hat{q}_1^{(1)} + \beta_{12}^{(i)} \hat{q}_1^{(2)} + h \hat{d}_{i+1}^{(1)} \\ \beta_{21}^{(i)} \hat{q}_1^{(1)} + \beta_{22}^{(i)} \hat{q}_1^{(2)} + h \hat{d}_{i+1}^{(2)} \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} d_i^{(2)} \\ u \hat{d}_i^{(1)} + (e-u) \hat{d}_i^{(2)} \\ \hat{d}_i^{(2)} \\ \theta \hat{d}_i^{(1)} + (1-\theta) \hat{d}_i^{(2)} \end{bmatrix} +$$

$$\begin{aligned}
& + h \sum_{l=1}^{i-2} \begin{bmatrix} \alpha_{11}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(1)} + \alpha_{12}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(2)} \\ \alpha_{21}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(1)} + \alpha_{22}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(2)} \\ \beta_{11}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(1)} + \beta_{12}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(2)} \\ \beta_{21}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(1)} + \beta_{22}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(2)} \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} 0 \\ At_{i+1}^{(1)} + Bt_{i+1}^{(2)} \\ 0 \\ v^T t_{i+1}^{(1)} + w^T t_{i+1}^{(2)} \end{bmatrix} \\
& + h \begin{bmatrix} At_i^{(1)} + Bt_i^{(2)} \\ (e-u)(v^T t_i^{(1)} + w^T t_i^{(2)}) \\ v^T t_i^{(1)} + w^T t_i^{(2)} \\ (1-\theta)(v^T t_i^{(1)} + w^T t_i^{(2)}) \end{bmatrix} \\
& + h \sum_{l=1}^{i-2} \begin{bmatrix} \alpha_{12}^{(i-l)} v^T t_{l+1}^{(1)} + \alpha_{12}^{(i-l)} w^T t_{l+1}^{(2)} \\ \alpha_{22}^{(i-l)} v^T t_{l+1}^{(1)} + \alpha_{22}^{(i-l)} w^T t_{l+1}^{(2)} \\ \beta_{12}^{(i-l)} v^T t_{l+1}^{(1)} + \beta_{12}^{(i-l)} w^T t_{l+1}^{(2)} \\ \beta_{22}^{(i-l)} v^T t_{l+1}^{(1)} + \beta_{22}^{(i-l)} w^T t_{l+1}^{(2)} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Logo, temos as seguintes relações:

- $q_{i+1}^{(1)} = \alpha_{11}^{(i)} \hat{q}_1^{(1)} + \alpha_{12}^{(i)} \hat{q}_1^{(2)} + h d_{i+1}^{(1)} + h d_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} [\alpha_{11}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(1)} + \alpha_{12}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(2)}]$
 $+ h A t_i^{(1)} + h B t_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \alpha_{12}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}]$
- $q_{i+1}^{(2)} = \alpha_{21}^{(i)} \hat{q}_1^{(1)} + \alpha_{22}^{(i)} \hat{q}_1^{(2)} + h d_{i+1}^{(2)} + h u \hat{d}_i^{(1)} + h(e-u) \hat{d}_i^{(2)}$
 $+ h \sum_{l=1}^{i-2} [\alpha_{21}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(1)} + \alpha_{22}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(2)}] + h A t_{i+1}^{(1)} + h B t_{i+1}^{(2)}$
 $+ h(e-u) v^T t_i^{(1)} + h(e-u) w^T t_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \alpha_{22}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}]$
- $\hat{q}_{i+1}^{(1)} = \beta_{11}^{(i)} \hat{q}_1^{(1)} + \beta_{12}^{(i)} \hat{q}_1^{(2)} + h \hat{d}_{i+1}^{(1)} + h \hat{d}_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} [\beta_{11}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(1)} + \beta_{12}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(2)}]$
 $+ h v^T t_i^{(1)} + h w^T t_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \beta_{12}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}]$
- $\hat{q}_{i+1}^{(2)} = \beta_{21}^{(i)} \hat{q}_1^{(1)} + \beta_{22}^{(i)} \hat{q}_1^{(2)} + h \hat{d}_{i+1}^{(2)} + h \theta \hat{d}_i^{(1)} + h(1-\theta) \hat{d}_i^{(2)}$
 $+ h \sum_{l=1}^{i-2} [\beta_{21}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(1)} + \beta_{22}^{(i-l)} \hat{d}_{l+1}^{(2)}] + h v^T t_{i+1}^{(1)} + h w^T t_{i+1}^{(2)}$
 $+ h(1-\theta) w^T t_i^{(2)} + h(1-\theta) v^T t_i^{(1)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \beta_{22}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}]$

Vamos assumir que os valores iniciais tem ordem p , quando $h \rightarrow 0$ isto é:

$$\hat{q}_1^{(1)} = O(h^p)$$

$$\hat{q}_1^{(2)} = O(h^p)$$

e que os últimos dois estágios de (4.5) tem ordem de consistência p , quando $h \rightarrow 0$ ou seja:

$$\hat{d}_l^{(1)} = O(h^p)$$

$$\hat{d}_l^{(2)} = O(h^p).$$

Na verdade, neste método temos $\hat{d}_l^{(1)} \equiv 0$, e ainda $d_l^{(1)} \equiv 0$. Assim:

- $q_{i+1}^{(1)} = hd_i^{(2)} + hAt_i^{(1)} + hBt_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \alpha_{12}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}] + O(h^p)$
- $q_{i+1}^{(2)} = hd_{i+1}^{(2)} + hAt_{i+1}^{(1)} + hBt_{i+1}^{(2)} + h(e-u)v^T t_i^{(1)} + h(e-u)w^T t_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \alpha_{22}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}] + O(h^p)$
- $\hat{q}_{i+1}^{(1)} = hv^T t_i^{(1)} + hw^T t_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \beta_{12}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}] + O(h^p)$
- $\hat{q}_{i+1}^{(2)} = hv^T t_{i+1}^{(1)} + hw^T t_{i+1}^{(2)} + h(1-\theta)w^T t_i^{(2)} + h(1-\theta)v^T t_i^{(1)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \beta_{22}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}] + O(h^p)$

Observe que $q_{i+1}^{(1)} = q_i^{(2)}$ e $t_{i+1}^{(1)} = t_i^{(2)}$. De fato:

$$\begin{aligned} q_i^{(2)} &= hd_i^{(2)} + hAt_i^{(1)} + hBt_i^{(2)} + h(e-u)v^T t_{i-1}^{(1)} + h(e-u)w^T t_{i-1}^{(2)} \\ &+ h \sum_{l=1}^{i-3} \alpha_{22}^{(i-1-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}] + O(h^p) = \\ &= hd_i^{(2)} + hAt_i^{(1)} + hBt_i^{(2)} + h \sum_{l=1}^{i-2} \alpha_{22}^{(i-l)} [v^T t_{l+1}^{(1)} + w^T t_{l+1}^{(2)}] \\ &+ O(h^p) = q_{i+1}^{(1)} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} t_i^{(2)} &= f(y(x_{i-1} + ch)) - f(Y_{i-1}) \\ &= f(y(x_i + (c-e)h)) - f(Y_{i-1}) = t_{i+1}^{(1)} \end{aligned}$$

Logo:

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad q_{i+1}^{(2)} &= h d_{i+1}^{(2)} + h A t_i^{(2)} + h B t_{i+1}^{(2)} + h(e-u)v^T t_{i-1}^{(2)} + h(e-u)w^T t_i^{(2)} \\
 &\quad + h \sum_{l=1}^{i-2} \alpha_{22}^{(i-l)} [v^T t_l^{(2)} + w^T t_{l+1}^{(2)}] + O(h^p) \\
 \bullet \quad \hat{q}_{i+1}^{(2)} &= h v^T t_i^{(2)} + h w^T t_{i+1}^{(2)} + h(1-\theta)w^T t_i^{(2)} + h(1-\theta)v^T t_{i-1}^{(2)} \\
 &\quad + h \sum_{l=1}^{i-2} \beta_{22}^{(i-l)} [v^T t_l^{(2)} + w^T t_{l+1}^{(2)}] + O(h^p)
 \end{aligned}$$

5.4 A condição de ordem

A expressão anterior nos permite enunciar o resultado a seguir, que estabelece uma primeira relação de ordem para o método.

Teorema 5.1. *Suponhamos que o método (4.5) é zero estável e que $\hat{d}_l^{(2)} = O(h^p)$, $l = 1, 2, \dots, N$ quando $h \rightarrow 0$. Então:*

$$\hat{q}_{i+1}^{(2)} = O(h^p), \quad h \rightarrow 0$$

se e somente se

$$v^T t_l^{(2)} + w^T t_{l+1}^{(2)} = O(h^p), \quad h \rightarrow 0, \quad l = 1, 2, \dots, i \quad (5.9)$$

Além disso, os erros $q_{i+1}^{(2)}$ dos estágios Y_i são dados por:

$$q_{i+1}^{(2)} = h A t_i^{(2)} + h B t_{i+1}^{(2)} + h d_{i+1}^{(2)} + O(h^p), \quad h \rightarrow 0 \quad (5.10)$$

onde

$$h d_{i+1}^{(2)} = \sum_{\nu=1}^p C_\nu y^{(\nu)}(x_i) h^\nu + O(h^{p+1}).$$

A condição $\hat{d}_l^{(2)} = O(h^p)$ e a equação (5.9) representam a forma geral da condição de ordem para os métodos TSRK (4.5). Segue deste teorema que se o método é zero-estável e satisfaz $\hat{d}_l^{(2)} = O(h^p)$ e (5.9), então o último estágio é convergente com ordem p , isto é:

$$y_{i+1} - y(x_{i+1}) = O(h^p)$$

e os erros $y(x_i + ch) - Y_i$ dos estágios Y_i são dados por (5.10).

No que segue, para simplificar a notação escreveremos t_{i+1} , q_{i+1} e d_{i+1} ao invés de $t_{i+1}^{(2)}$, $q_{i+1}^{(2)}$ e $d_{i+1}^{(2)}$, respectivamente. Então (5.9) e (5.10) tornam-se:

$$v^T t_l + w^T t_{l+1} = O(h^p), \quad h \rightarrow 0, \quad l = 1, 2, \dots, i \quad (5.11)$$

e

$$q_{i+1} = hAt_i + hBt_{i+1} + hd_{i+1} + O(h^p), \quad h \rightarrow 0 \quad (5.12)$$

Visando expressar (5.11) numa forma mais conveniente, primeiro necessitamos escrever t_{i+1} em termos de q_{i+1} . Se $t_{j,i+1}$ e $q_{j,i+1}$ são as j -ésimas componentes de t_{i+1} e q_{i+1} , respectivamente, obtemos:

$$t_{j,i+1} = f(y(x_i + c_j h)) - f(Y_i^j).$$

Aplicando a $f(Y_i)$ o desenvolvimento em série de Taylor em torno do ponto $y(x_i + c_j h)$ temos:

$$\begin{aligned} f(Y_i^j) &= f(y(x_i + c_j h)) + (Y_i^j - y(x_i + c_j h)) D_y^1 f(y(x_i + c_j h)) \\ &\quad + \frac{(Y_i^j - y(x_i + c_j h))^2}{2!} D_y^2 f(y(x_i + c_j h)) \\ &\quad + \frac{(Y_i^j - y(x_i + c_j h))^3}{3!} D_y^3 f(y(x_i + c_j h)) + \dots + O(h^p) \\ \Rightarrow f(Y_i^j) - f(y(x_i + c_j h)) &= \sum_{\nu=1}^{p-1} D_y^\nu f(y(x_i + c_j h)) \frac{(Y_i^j - y(x_i + c_j h))^\nu}{\nu!} \\ &\quad + O(h^p). \end{aligned}$$

Logo:

$$\begin{aligned} t_{j,i+1} &= f(y(x_i + c_j h)) - f(Y_i^j) \\ &= - \sum_{\nu=1}^{p-1} D_y^\nu f(y(x_i + c_j h)) \frac{(Y_i^j - y(x_i + c_j h))^\nu}{\nu!} + O(h^p). \end{aligned}$$

Mas

$$q_{j,i+1}^{(2)} = q_{j,i+1} = y(x_i + c_j h) - Y_i^j$$

assim:

$$\begin{aligned} t_{j,i+1} &= - \sum_{\nu=1}^{p-1} D_y^\nu f(y(x_i + c_j h)) \frac{(-q_{j,i+1})^\nu}{\nu!} + O(h^p) \\ &= \sum_{\nu=1}^{p-1} \frac{(-1)^{\nu+1}}{\nu!} D_y^\nu f(y(x_i + c_j h)) (q_{j,i+1})^\nu + O(h^p). \end{aligned}$$

Sejam as funções $g_\nu(x_i + c_j h)$ definidas como:

$$g_\nu(x_i + c_j h) := \frac{(-1)^{\nu+1}}{\nu!} D_y^\nu f(y(x_i + c_j h))$$

Então, aplicando a elas o desenvolvimento em série de Taylor em torno do ponto x_i obtemos:

$$g_\nu(x_i + c_j h) := \sum_{\mu=0}^{p-1} g_\nu^{(\mu)}(x_i) \frac{c_j^\mu h^\mu}{\mu!} + O(h^p)$$

onde $g_\nu^{(\mu)}$ representa a derivada de ordem μ .

Seja:

$$G_\nu = \begin{bmatrix} g_\nu(x_i + c_1 h) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & g_\nu(x_i + c_2 h) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & g_\nu(x_i + c_m h) \end{bmatrix}$$

Aplicando-se o desenvolvimento em série de Taylor em todas $g_\nu(x_i + c_j h)$ para $j = 1, 2, \dots, m$, na vizinhança de x_i obtemos:

$$\begin{aligned} G_\nu &= \begin{bmatrix} \sum_{\mu=0}^{p-1} \frac{h^\mu}{\mu!} g_\nu^{(\mu)}(x_i) c_1^\mu & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum_{\mu=0}^{p-1} \frac{h^\mu}{\mu!} g_\nu^{(\mu)}(x_i) c_2^\mu & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sum_{\mu=0}^{p-1} \frac{h^\mu}{\mu!} g_\nu^{(\mu)}(x_i) c_m^\mu \end{bmatrix} \\ &= \sum_{\mu=0}^{p-1} \frac{h^\mu}{\mu!} g_\nu^{(\mu)}(x_i) \Gamma_c^\mu + O(h^p) \end{aligned}$$

com Γ_c a matriz diagonal definida por:

$$\Gamma_c = \text{diag}(c_1, c_2, \dots, c_m)$$

Portanto:

$$t_{j,i+1} = \sum_{\nu=1}^{p-1} g_\nu(x_i + c_j h) (q_{j,i+1})^\nu + O(h^p)$$

ou

$$t_{j,i+1} = G_1 q_{i+1} + G_2 (q_{i+1})^2 + G_3 (q_{i+1})^3 + \dots + O(h^p) \quad (5.13)$$

Similarmente como em [2] e [3], podemos argumentar que as funções $t_{i+1} = t_{i+1}(h)$ e $q_{i+1} = q_{i+1}(h)$ são únicas em uma vizinhança de $h = 0$ e possuem a seguinte expansão de Taylor:

$$q_{i+1} = \xi_2(x_i)h^2 + \xi_3(x_i)h^3 + \dots + \xi_{p-1}(x_i)h^{p-1} + O(h^p) \quad (5.14)$$

$$t_{i+1} = \eta_2(x_i)h^2 + \eta_3(x_i)h^3 + \dots + \eta_{p-1}(x_i)h^{p-1} + O(h^p) \quad (5.15)$$

Podemos obter a generalização das funções $\xi_s(x_i)$ e $\eta_s(x_i)$ por recursividade, substituindo respectivamente (5.14) e (5.15) em (5.12) e (5.13). Isto nos conduz ao resultado a seguir.

Teorema 5.2. *As funções $\xi_s(x_i)$ e $\eta_s(x_i)$ satisfazem as relações*

$$\xi_j(x_i) = C_j y^{(j)}(x_i) + B \eta_{j-1}(x_i) + A \sum_{s=0}^{j-3} \frac{(-1)^s}{s!} \eta_{j-s-1}^{(s)}(x_i) \quad (5.16)$$

e

$$\begin{aligned} \eta_j(x_i) = & \sum_{l=0}^{j-2} \frac{1}{l!} \Gamma_c^l \left(g_1^{(l)}(x_i) \xi_{j-l}(x_i) + \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n=j-l}} g_2^{(l)}(x_i) (\xi_m(x_i) \xi_n(x_i)) \right. \\ & \left. + \sum_{\substack{m, n, r \geq 2 \\ m+n+r=j-l}} g_3^{(l)}(x_i) (\xi_m(x_i) \xi_n(x_i) \xi_r(x_i)) + \dots \right) \end{aligned} \quad (5.17)$$

para $j = 2, 3, \dots, p-1$; $i = 0, 1, \dots$; com $\eta_1(x_i) \equiv 0$.

Demonstração Usando (5.12), (5.14) e expressando $\eta_s(x_{i-1})$ em série de Taylor na vizinhança do ponto x_i , obtemos:

$$\sum_{s=2}^j \xi_s(x_i) h^s = h A t_i + h B t_{i+1} + h d_{i+1} + O(h^p), \quad j = 2, 3, \dots, p-1.$$

mas

$$t_{i+1} = \eta_2(x_i) h^2 + \eta_3(x_i) h^3 + \dots + \eta_{p-1}(x_i) h^{p-1} + O(h^p).$$

Logo:

$$\sum_{s=2}^j \xi_s(x_i) h^s = h A \sum_{s=2}^{j-1} \eta_s(x_{i-1}) h^s + h B \sum_{s=2}^{j-1} \eta_s(x_i) h^s + h d_{i+1} + O(h^p)$$

e pelo teorema (5.1) temos:

$$h d_{i+1} = \sum_{s=1}^j C_s y^{(s)}(x_i) h^s + O(h^p).$$

Portanto:

$$\begin{aligned} \sum_{s=2}^j \xi_s(x_i) h^s &= A \sum_{s=2}^{j-1} \eta_s(x_{i-1}) h^{s+1} + B \sum_{s=2}^{j-1} \eta_s(x_i) h^{s+1} \\ &+ \sum_{s=1}^j C_s y^{(s)}(x_i) h^s + O(h^p). \end{aligned}$$

Expandindo $\eta_s(x_{i-1})$ em série de Taylor em torno do ponto x_i obtemos:

$$\eta_s(x_{i-1}) = \eta_s(x_i) - h \eta'_s(x_i) + \frac{h^2}{2!} \eta''_s(x_i) - \frac{h^3}{3!} \eta'''_s(x_i) + \dots$$

Assim:

$$\begin{aligned} \sum_{s=2}^j \xi_s(x_i) h^s &= \sum_{s=1}^j C_s y^{(s)}(x_i) h^s + A \sum_{s=2}^{j-1} \left(\sum_{\nu=0}^{j-s-1} \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \eta_s^{(\nu)}(x_i) h^\nu \right) h^{s+1} + \\ &+ B \sum_{s=2}^{j-1} \eta_s(x_i) h^{s+1} + O(h^{j+1}) \end{aligned}$$

Tomando $\mu = \nu + s + 1$ temos:

$$\begin{aligned} \sum_{s=2}^j \xi_s(x_i) h^s &= \sum_{s=1}^j C_s y^{(s)}(x_i) h^s + A \sum_{s=2}^{j-1} \sum_{\mu=s+1}^j \frac{(-1)^{\mu-s-1}}{(\mu-s-1)!} \eta_s^{(\mu-s-1)}(x_i) h^\mu \\ &+ B \sum_{s=2}^{j-1} \eta_s(x_i) h^{s+1} + O(h^{j+1}) \end{aligned}$$

Comparando as expressões para os termos em h^j obtemos:

$$\begin{aligned} \xi_j(x_i) h^j &= C_j y^{(j)}(x_i) h^j + A \sum_{s=2}^{j-1} \frac{(-1)^{(j-s-1)}}{(j-s-1)!} \eta_s^{(j-s-1)}(x_i) h^j \\ &+ B \eta_{j-1}(x_i) h^j \\ \xi_j(x_i) &= C_j y^{(j)}(x_i) + A \sum_{s=2}^{j-1} \frac{(-1)^{(j-s-1)}}{(j-s-1)!} \eta_s^{(j-s-1)}(x_i) \\ &+ B \eta_{j-1}(x_i) \\ &\stackrel{s=j-s-1}{=} C_j y^{(j)}(x_i) + A \sum_{s=0}^{j-3} \frac{(-1)^s}{s!} \eta_{j-s-1}^{(s)}(x_i) + B \eta_{j-1}(x_i) \end{aligned}$$

Assim, concluímos a validade de $\xi_j(x_i)$ proposta em (5.16). Vamos agora demonstrar a validade de (5.17).

Usando (5.13), (5.14), (5.15) e fazendo $q_{i+1} = s_j(x_i) + O(h^{j+1})$ onde

$$s_j(x_i) = \xi_2(x_i) h^2 + \dots + \xi_j(x_i) h^j$$

concluímos que (5.13) = (5.15), ou seja:

$$\begin{aligned} \sum_{s=2}^j \eta_s(x_i) h^s &= G_1 q_{i+1} + G_2 (q_{i+1})^2 + G_3 (q_{i+1})^3 + \dots + O(h^p) \\ &\stackrel{p=j+1}{=} G_1 s_j(x_i) + G_2 (s_j(x_i))^2 + G_3 (s_j(x_i))^3 + \dots + O(h^{j+1}) \end{aligned}$$

Mas

$$G_\nu = \sum_{\mu=0}^{p-1} \frac{h^\mu}{\mu!} g_\nu^{(\mu)}(x_i) \Gamma_c^\mu + O(h^p)$$



Assim:

$$\begin{aligned}
 \sum_{s=2}^j \eta_s(x_i) h^s &= \left\{ g_1(x_i) + h g_1^{(1)}(x_i) \Gamma_c + \frac{h^2}{2!} g_1^{(2)}(x_i) \Gamma_c^2 + \dots \right\} s_j(x_i) \\
 &+ \left\{ g_2(x_i) + h g_2^{(1)}(x_i) \Gamma_c + \frac{h^2}{2!} g_2^{(2)}(x_i) \Gamma_c^2 + \dots \right\} (s_j(x_i))^2 \\
 &+ \left\{ g_3(x_i) + h g_3^{(1)}(x_i) \Gamma_c + \frac{h^2}{2!} g_3^{(2)}(x_i) \Gamma_c^2 + \dots \right\} (s_j(x_i))^3 + \dots + O(h^{j+1}) \\
 &= \left\{ g_1(x_i) + h g_1^{(1)}(x_i) \Gamma_c + \frac{h^2}{2!} g_1^{(2)}(x_i) \Gamma_c^2 + \dots \right\} \left(\sum_{n=2}^j \xi_n(x_i) h^n \right) \\
 &+ \left\{ g_2(x_i) + h g_2^{(1)}(x_i) \Gamma_c + \frac{h^2}{2!} g_2^{(2)}(x_i) \Gamma_c^2 + \dots \right\} \\
 &\quad \left(\sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n \leq j}} h^{m+n} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i)) \right) \\
 &+ \left\{ g_3(x_i) + h g_3^{(1)}(x_i) \Gamma_c + \frac{h^2}{2!} g_3^{(2)}(x_i) \Gamma_c^2 + \dots \right\} \\
 &\quad \left(\sum_{\substack{m, n, r \geq 2 \\ m+n+r \leq j}} h^{m+n+r} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i) \cdot \xi_r(x_i)) \right) \\
 &+ \dots + O(h^{j+1})
 \end{aligned}$$

Comparando as expressões envolvidas com h^j temos:

$$\begin{aligned}
 \eta_j(x_i) h^j &= g_1(x_i) \xi_j(x_i) h^j + g_1^{(1)}(x_i) \Gamma_c \xi_{j-1}(x_i) h^j + \frac{1}{2!} g_1^{(2)}(x_i) \Gamma_c^2 \xi_{j-2}(x_i) h^j + \dots \\
 &+ \frac{1}{(j-2)!} g_1^{(j-2)}(x_i) \Gamma_c^{j-2} \xi_2(x_i) h^j + g_2(x_i) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n=j}} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i)) h^j \\
 &+ g_2^{(1)}(x_i) \Gamma_c \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n=j-1}} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i)) h^j + \dots \\
 &+ \frac{1}{(j-2)!} g_2^{(j-2)}(x_i) \Gamma_c^{j-2} \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n \leq j}} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i)) h^j \\
 &+ g_3(x_i) \sum_{\substack{m, n, r \geq 2 \\ m+n+r=j}} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i) \cdot \xi_r(x_i)) h^j + \dots \\
 &+ \frac{1}{(j-2)!} g_3^{(j-2)}(x_i) \Gamma_c^{j-2} \sum_{\substack{m, n, r \geq 2 \\ m+n+r=j-1}} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i) \cdot \xi_r(x_i)) h^j \\
 &+ \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \eta_j(x_i) &= \sum_{l=0}^{j-2} \frac{1}{l!} \Gamma_c^l g_1^{(1)}(x_i) \xi_{j-l}(x_i) \\
&+ \sum_{l=0}^{j-2} \frac{1}{l!} \Gamma_c^l \left(g_2^{(l)}(x_i) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n=j-1}} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i)) \right) \\
&+ \sum_{l=0}^{j-2} \frac{1}{l!} \Gamma_c^l \left(g_3^{(l)}(x_i) \sum_{\substack{m, n, r \geq 2 \\ m+n+r=j-1}} (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i) \cdot \xi_r(x_i)) \right) + \dots \\
\Rightarrow \eta_j(x_i) &= \sum_{l=0}^{j-2} \frac{1}{l!} \Gamma_c^l \left\{ g_1^{(1)}(x_i) \xi_{j-l}(x_i) \right. \\
&+ \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n=j-1}} g_2^{(l)}(x_i) (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i)) \\
&+ \left. \sum_{\substack{m, n, r \geq 2 \\ m+n+r=j-1}} g_3^{(l)}(x_i) (\xi_m(x_i) \cdot \xi_n(x_i) \cdot \xi_r(x_i)) + \dots \right\}
\end{aligned}$$

o que nos permite concluir a validade de (5.17) para $\eta_j(x_i)$ e portanto completar a demonstração do teorema 5.2. ■

Segue do teorema 5.1 e da fórmula (5.15) que o método (4.5) tem ordem p se $\hat{C}_q = 0$ para $q = 1, 2, \dots, p$ e se

$$v^T \eta_q(x_{i-1}) + w^T \eta_q(x_i) = 0 \quad (5.18)$$

para $q = 2, 3, \dots, p-1$, onde as funções η_q podem ser generalizadas utilizando o teorema 5.2.

A última condição no entanto é de difícil aplicação, visto que envolve valores das funções η_q para dois pontos consecutivos x_{i-1} e x_i . Entretanto, uma forma mais conveniente que (5.18) é dada pelo seguinte teorema.

Teorema 5.3. *O método zero-estável (4.5) tem ordem p se e somente se $\hat{C}_q = 0$, $q = 1, 2, \dots, p$ e*

$$(v^T + w^T) \eta_q(x_i) + v^T \sum_{s=1}^{q-2} \frac{(-1)^s}{s!} \eta_{q-s}^{(s)}(x_i) = 0 \quad (5.19)$$

para $q = 2, 3, \dots, p-1$; $i = 0, 1, \dots$



Demonstração De (5.18), temos que $v^T \eta_q(x_{i-1}) + w^T \eta_q(x_i) = 0$ é equivalente a:

$$\sum_{s=2}^{p-1} h^{s-2} (v^T \eta_s(x_{i-1}) + w^T \eta_s(x_i)) = O(h^{p-2}); \quad h \rightarrow 0.$$

ou

$$v^T \sum_{s=2}^{p-1} h^{s-2} \eta_s(x_{i-1}) + w^T \sum_{s=2}^{p-1} h^{s-2} \eta_s(x_i) = O(h^{p-2})$$

Desenvolvendo $\eta_s(x_{i-1})$ em série de Taylor em torno do ponto x_i , temos:

$$\begin{aligned} & v^T \sum_{s=2}^{p-1} h^{s-2} \left\{ \eta_s(x_i) - h \eta'_s(x_i) + \frac{h^2}{2!} \eta''_s(x_i) - \frac{h^3}{3!} \eta'''_s(x_i) + \dots \right\} \\ & + w^T \sum_{s=2}^{p-1} h^{s-2} \eta_s(x_i) = O(h^{p-2}) \end{aligned}$$

Fazendo $\nu + s - 2 = p - 3$, ou seja $\nu = p - s - 1$, obtemos:

$$\begin{aligned} & v^T \sum_{s=2}^{p-1} h^{s-2} \left(\sum_{\nu=0}^{p-s-1} (-1)^\nu \frac{h^\nu}{\nu!} \eta_s^{(\nu)}(x_i) \right) + w^T \sum_{s=2}^{p-1} h^{s-2} \eta_s(x_i) = O(h^{p-2}) \\ \Rightarrow & v^T \sum_{s=2}^{p-1} \sum_{\nu=0}^{p-s-1} \frac{(-1)^\nu}{\nu!} h^{\nu+s-2} \eta_s^{(\nu)}(x_i) + w^T \sum_{s=2}^{p-1} h^{s-2} \eta_s(x_i) = O(h^{p-2}) \\ \stackrel{\nu=q-s}{\Rightarrow} & v^T \sum_{s=2}^{p-1} \sum_{q=2}^{p-1} \frac{(-1)^{q-s}}{(q-s)!} h^{q-2} \eta_s^{(q-s)}(x_i) + w^T \sum_{q=2}^{p-1} h^{q-2} \eta_s(x_i) = O(h^{p-2}) \\ \Rightarrow & \sum_{q=2}^{p-1} h^{q-2} \left\{ v^T \sum_{s=2}^q \frac{(-1)^{q-s}}{(q-s)!} \eta_s^{(q-s)}(x_i) + w^T \eta_s(x_i) \right\} = O(h^{p-2}) \\ \Rightarrow & \sum_{q=2}^{p-1} h^{q-2} \left\{ (v^T + w^T) \eta_s(x_i) + v^T \sum_{s=2}^{q-1} \frac{(-1)^{q-s}}{(q-s)!} \eta_s^{(q-s)}(x_i) \right\} = O(h^{p-2}) \\ \stackrel{s=q-s}{\Rightarrow} & \sum_{q=2}^{p-1} h^{q-2} \left\{ (v^T + w^T) \eta_s(x_i) + v^T \sum_{s=1}^{q-2} \frac{(-1)^s}{s!} \eta_s^s(x_i) \right\} = O(h^{p-2}) \end{aligned}$$

Daí, fazendo $h \rightarrow 0$ obtemos (5.19). ■



É importante lembrar que desenvolvimento equivalente, porém com maior complexidade notacional, pode ser realizado para a dimensão $q > 1$. Esse desenvolvimento pode ser encontrado em Jackiewicz e Tracogna [16].

Capítulo 6

A construção das condições de ordem até ordem 6

6.1 Introdução

Um resultado importante do capítulo anterior vem a construção das condições de ordem até ordem 6.

6.2 As condições de ordem

As condições de ordem até ordem 6 são dadas por

$$C_0 = 1, \quad q = 1, 2, \dots, 6.$$

$$u^0 = u(x_0, y_0, z_0) = u_0$$

$$u^1 = u^1(x_0, y_0, z_0) = u_1 = 0$$

$$u^2 = u^2(x_0, y_0, z_0) = u_2 = \left(\frac{1}{2} u_1(x_0, y_0, z_0) - \frac{1}{2} u_1(x_0, y_0, z_0) \right) = 0$$

$$u^3 = u^3(x_0, y_0, z_0) = u_3 = \left(u_1(x_0, y_0, z_0) - \frac{1}{2} u_1(x_0, y_0, z_0) - \frac{1}{2} u_1(x_0, y_0, z_0) \right) = 0$$

Capítulo 6

A construção das condições de ordem até ordem 6

6.1 Introdução

Utilizando resultados obtidos no capítulo anterior vamos estabelecer as condições de ordem para os métodos da classe definida em (4.5), até a ordem 6.

6.2 As condições de ordem

Utilizando os teoremas 5.2 e 5.3 temos que o método terá ordem 6 se forem satisfeitas as condições:

$$\hat{C}_q = 0, \quad q = 1, 2, \dots, 6.$$

e

$$(v^T + w^T) \eta_2(x_i) = 0$$

$$(v^T + w^T) \eta_3(x_i) - v^T \eta_2^{(1)}(x_i) = 0$$

$$(v^T + w^T) \eta_4(x_i) - v^T \left(\eta_3^{(1)}(x_i) - \frac{1}{2!} \eta_2^{(2)}(x_i) \right) = 0$$

$$(v^T + w^T) \eta_5(x_i) - v^T \left(\eta_4^{(1)}(x_i) - \frac{1}{2!} \eta_3^{(2)}(x_i) + \frac{1}{3!} \eta_4^{(3)}(x_i) \right) = 0$$



Lembremos que o lado esquerdo das equações anteriores são coeficientes de expressões que contém várias combinações de $g_\nu^{(\mu)} = g_\nu^{(\mu)}(x_i)$ e $y^{(\mu)} = y^{(\mu)}(x_i)$. Assim, as condições de ordem são obtidas assumindo que os coeficientes dessas combinações sejam iguais a zero.

Estas combinações se equivalem às diferenciais elementares na teoria geral dos métodos de Runge-Kutta. Apenas como ilustração apresentamos, a seguir, algumas delas:

- $p = 3$

$$g_1 y''$$

- $p = 4$

$$g_1 y''', g_1^2 y'', g_1^{(1)} y''$$

- $p = 5$

$$g_1 y^{(4)}, g_1 g_1^{(1)} y'', g_1^2 y''', g_1^3 y'', g_1^{(1)} y''', g_1^{(1)} g_1 y'', g_1^{(2)} y'', g_2 (y'')^2$$

- $p = 6$

$$g_1 y^{(5)}, g_1 g_1^{(2)} y'', g_1 g_1^{(1)} y'', g_1^2 y^{(4)}, g_1 g_1^{(1)} g_1 y'', g_1^2 g_1^{(1)} y'', g_1^{(3)} y''', g_1^4 y'', \\ g_1 g_2 (y'')^2, g_1^{(1)} y^{(4)}, (g_1^{(1)})^2 y'', g_1^{(1)} g_1 y''', g_1^{(1)} g_1^2 y'', g_1^{(2)} y''', g_1^{(2)} g_1 y'', g_1^{(3)} y'', \\ g_2 y'' y''', g_2 y'' g_1 y'', g_2^{(1)} (y'')^2$$

Considerando a condição de consistência $c = (A + B)e - u$ e as constantes de erro C_ν e $\hat{C}_\nu$ definidas por (5.4) e (5.5), podemos estabelecer as condições de ordem até $p = 6$.

Isto é:

- para $p = 1$ a única condição é $\hat{C}_1 = 0$, que por (5.4) nos dá:

$$v^T + w^T - \theta = 1$$

- para $p = 2$, além de $\hat{C}_1 = 0$ teremos a condição $\hat{C}_2 = 0$, ou seja:

$$v^T(c - e) + w^T(c - e) + \theta = \frac{1}{2}$$

- para $p = 3$, além de $\hat{C}_1 = 0$ e $\hat{C}_2 = 0$ devem ser verificadas as condições:

$$\hat{C}_3 = 0$$

e

$$(v^T + w^T)\eta_2(x_i) = 0$$

Substituindo $\eta_2(x_i)$ temos:

$$(v^T + w^T) \left\{ \Gamma_c^0 (g_1^{(0)}(x_i) \xi_2(x_i)) \right\} = 0$$

$$\Rightarrow (v^T + w^T) \left\{ g_1(x_i) (C_2 y^{(2)}(x_i) + B\eta_1(x_i)) \right\} = 0$$

$$\Rightarrow (v^T + w^T) C_2 g_1(x_i) y^{(2)}(x_i) = 0$$

Logo, podemos considerar como condições de ordem equivalentes:

$$\begin{cases} \hat{C}_3 = 0 \\ (v^T + w^T)C_2 = 0 \end{cases}$$

- para $p = 4$, além das condições para $p = 1, 2, 3$ teremos que ter:

$$\hat{C}_4 = 0$$

e

$$(v^T + w^T)\eta_3(x_i) - v^T \eta_2^{(1)}(x_i) = 0$$

$$\Rightarrow (v^T + w^T) \left\{ \Gamma_c^0 g_1^{(0)}(x_i) \xi_3(x_i) + \Gamma_c^1 g_1^{(1)}(x_i) \xi_2(x_i) \right\}$$

$$- v^T \left(\Gamma_c^0 g_1^{(0)}(x_i) \xi_2(x_i) \right)' = 0$$

$$\Rightarrow (v^T + w^T) \left\{ g_1(x_i) (C_3 y^{(3)}(x_i) + B\eta_2(x_i) + A\eta_2^{(0)}(x_i)) \right.$$

$$+ \Gamma_c g_1^{(1)}(x_i) (C_2 y^{(2)}(x_i) + B\eta_1(x_i)) \left. \right\} - v^T [g_1(x_i) (C_2 y^{(2)}(x_i)$$

$$+ B\eta_1(x_i))] = 0$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow (v^T + w^T) \left\{ g_1(x_i) C_3 y^{(3)}(x_i) + g_1(x_i) B \Gamma_c^0 g_1^{(0)}(x_i) \xi_2(x_i) \right. \\
&\quad + \left. g_1(x_i) A \Gamma_c^0 g_1^{(0)}(x_i) \xi_2(x_i) + \Gamma_c g_1^{(1)}(x_i) C_2 y^{(2)}(x_i) \right\} \\
&\quad - v^T (g_1(x_i) C_2 y^{(2)}(x_i))' = 0 \\
\\
&\Rightarrow (v^T + w^T) \left\{ g_1(x_i) C_3 y^{(3)}(x_i) + (g_1(x_i))^2 B C_2 y^{(2)}(x_i) \right. \\
&\quad + \left. (g_1(x_i))^2 A C_2 y^{(2)}(x_i) + \Gamma_c g_1^{(1)}(x_i) C_2 y^{(2)}(x_i) \right\} \\
&\quad - v^T \left[g_1^{(1)}(x_i) C_2 y^{(2)}(x_i) + g_1(x_i) C_2 y^{(3)}(x_i) \right] = 0 \\
\\
&\Rightarrow \left\{ (v^T + w^T) C_3 - v^T C_2 \right\} g_1(x_i) y^{(3)}(x_i) + \left\{ (v^T + w^T) (A + B) C_2 \right\} \\
&\quad (g_1(x_i))^2 y^{(2)}(x_i) + \left\{ (v^T + w^T) \Gamma_c C_2 - v^T C_2 \right\} g_1^{(1)}(x_i) y^{(2)}(x_i) = 0
\end{aligned}$$

Assim as condições de ordem são:

$$\begin{cases} \hat{C}_4 = 0 \\ (v^T + w^T) C_3 - v^T C_2 = 0 \\ (v^T + w^T) (A + B) C_2 = 0 \\ (v^T + w^T) \Gamma_c C_2 - v^T C_2 = 0 \end{cases}$$

- para $p = 5$ devem ser satisfeitas as condições para $p = 1, 2, 3, 4$ e ainda as seguintes condições:

$$\begin{cases} \hat{C}_5 = 0 \\ 2(v^T + w^T) C_4 + v^T (C_2 - 2C_3) = 0 \\ (v^T + w^T) ((A + B) \Gamma_c C_2 - A C_2) - v^T (A + B) C_2 = 0 \\ (v^T + w^T) ((A + B) C_3 - A C_2) - v^T (A + B) C_2 = 0 \\ (v^T + w^T) (A + B)^2 C_2 = 0 \\ (v^T + w^T) \Gamma_c C_3 + v^T (C_2 - C_3 - \Gamma_c C_2) = 0 \\ (v^T + w^T) \Gamma_c (A + B) C_2 - v^T (A + B) C_2 = 0 \\ (v^T + w^T) \Gamma_c^2 C_2 + v^T (C_2 - 2\Gamma_c C_2) = 0 \\ (v^T + w^T) C_2^2 = 0 \end{cases}$$

- para $p = 6$ além de todas as condições anteriores, isto é, as condições de ordem para $p = 1, 2, 3, 4, 5$, devem também satisfazer as condições:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{C}_6 = 0 \\ 6(v^T + w^T)C_5 - v^T(C_2 - 3C_3 + 6C_4) = 0 \\ (v^T + w^T)[A(C_2 - 2\Gamma_c C_2) + (A + B)\Gamma_c^2 C_2] \\ \quad + v^T[(A + B)(C_2 - 2\Gamma_c C_2) + 2AC_2] = 0 \\ (v^T + w^T)[A(C_2 - C_3 - \Gamma_c C_2) + (A + B)\Gamma_c C_3] \\ \quad + v^T[(A + B)(C_2 - C_3 - \Gamma_c C_2) + 2AC_2] = 0 \\ (v^T + w^T)[A(C_2 - 2C_3) + (A + B)C_4] \\ \quad + v^T[(A + B)(C_2 - 2C_3) + 2AC_2] = 0 \\ (v^T + w^T)[(A + B)\Gamma_c - A](A + B)C_2 - v^T(A + B)^2 C_2 = 0 \\ (v^T + w^T)[(A + B)((A + B)\Gamma_c C_2 - AC_2) - A(A + B)C_2] \\ \quad - v^T(A + B)^2 C_2 = 0 \\ (v^T + w^T)[(A + B)^2 C_3 - A(A + B)C_2 - (A + B)AC_2] \\ \quad - v^T(A + B)^2 C_2 = 0 \\ (v^T + w^T)(A + B)^3 C_2 = 0 \\ (v^T + w^T)[(A + B)C_2^2 + C_2(A + B)C_2] = 0 \\ 2(v^T + w^T)\Gamma_c C_4 - v^T(C_2 - 2C_3 - \Gamma_c C_2 + 2C_4 + 2\Gamma_c C_3) = 0 \\ (v^T + w^T)(\Gamma_c(A + B)\Gamma_c C_2 - \Gamma_c AC_2) + v^T[(A + B)(C_2 - \Gamma_c C_2) \\ \quad + AC_2 - \Gamma_c(A + B)C_2] = 0 \\ (v^T + w^T)(\Gamma_c(A + B)C_3 - \Gamma_c AC_2) + v^T[(A + B)(C_2 - C_3) \\ \quad + AC_2 - \Gamma_c(A + B)C_2] = 0 \\ (v^T + w^T)\Gamma_c(A + B)^2 C_2 - v^T(A + B)^2 C_2 = 0 \\ (v^T + w^T)\Gamma_c^2 C_3 - v^T(C_2 - 2\Gamma_c C_2 - C_3 + 2\Gamma_c C_3 + \Gamma_c^2 C_2) = 0 \\ (v^T + w^T)\Gamma_c^2(A + B)C_2 + v^T[(A + B)C_2 - 2\Gamma_c(A + B)C_2] = 0 \\ (v^T + w^T)\Gamma_c^3 C_2 - v^T(C_2 - 3\Gamma_c C_2 + 3\Gamma_c^2 C_2) = 0 \\ (v^T + w^T)C_2 C_3 - v^T C_2^2 = 0 \\ (v^T + w^T)(A + B)C_2^2 = 0 \\ (v^T + w^T)\Gamma_c C_2^2 - v^T C_2^2 = 0 \end{array} \right.$$

É importante observar que na prática quando vamos construir métodos TSRK além da ordem do método também consideramos estágios com ordem igual ou inferior. Assim teremos uma redução significativa no número de equações para cada ordem. Por exemplo, se considerarmos métodos de ordem 5 e estágio de ordem 4, teremos que considerar apenas 9 expressões $\hat{C}_i = 0$ para $i = 1, \dots, 5$ e $C_j = 0$ com $j = 1, \dots, 4$, ao invés de 17 como mostrado anteriormente.

Considerando $A = 0$ nas equações acima obtemos as condições de ordem equivalentes às obtidas em [13], [14] usando a aproximação de [12].

Estas condições são necessárias e suficientes para o método (4.2) ter ordem p no caso de sistemas com dimensão $q > 1$.

Observe, entretanto, que no caso escalar $q = 1$ elas são somente suficientes mas não necessárias, desde que algumas diferenciais elementares se tornem iguais.

Por exemplo, para $p = 5$, $g_1 g_1^{(1)} y'' = g_1^{(1)} g_1 y''$ e as condições de ordem correspondentes a essas diferenciais elementares podem ser representadas por uma mesma condição. Contudo, no caso $q > 1$, $G_1(G_1^{(1)}(y'')) \neq G_1^{(1)}(G_1(y''))$ e todas as condições de ordem correspondentes às mesmas serão também necessárias.

Assim, temos estabelecidas as condições para se obter métodos de Runge-Kutta de passo dois, da classe em estudo, até a ordem 6.

Construção de métodos TSRK

7.1 Introdução

Neste capítulo, consideramos os métodos TSRK da família $TS(2,2)$ com passo variável, os quais são os métodos de ordem 2 e 3, os quais são os métodos de ordem 2 e 3.

7.2 Algoritmo TSRK com $m=1$

Os métodos TSRK definidos por (2.2), com $m = 1$ tem a forma

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \tau_1 f(t_n, y_n) + \tau_2 f(t_n + \tau_1, y_n + \tau_1 f(t_n, y_n)) \\ y_{n+1} = y_n + \tau_1 f(t_n, y_n) + \tau_2 f(t_n + \tau_1, y_n + \tau_1 f(t_n, y_n)) \end{cases}$$

onde $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6$ são os parâmetros reais.

Quando $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = \tau_4 = \tau_5 = \tau_6 = \tau$, os métodos TSRK são os métodos de ordem 2 e 3, os quais são os métodos de ordem 2 e 3.

Capítulo 7

Construção de métodos TSRK

7.1 Introdução

Neste capítulo construiremos algumas famílias de métodos TSRK com um e dois estágios, ou seja $m = 1$ e 2 a partir das condições de ordem vistas no capítulo anterior.

7.2 Métodos TSRK com $m=1$

Os métodos TSRK definidos por (4.2), com $m = 1$ tem a forma:

$$\begin{array}{c|c|c} u & a & \lambda \\ \hline \theta & v & w \end{array}$$

ou

$$\begin{cases} y_{i+1} = \theta y_{i-1} + (1 - \theta)y_i + h(vf(Y_{i-1}) + wf(Y_i)) \\ Y_i = uy_{i-1} + (1 - u)y_i + h(af(Y_{i-1}) + \lambda f(Y_i)) \end{cases} \quad (7.1)$$

onde u , a , λ , θ , v e w são parâmetros reais.

Considerando as condições de ordem construídas no capítulo anterior e buscando métodos com ordem $p = 3$, com respeito a u , a , θ , v e w , devemos inicialmente resolver o sistema $C_1 = \hat{C}_1 = \hat{C}_2 = \hat{C}_3 = 0$ para obter uma família de métodos a dois parâmetros de ordem 3. Assim:

- $C_1 = 0 \Rightarrow c + u - a - \lambda = 0$
- $p = 1 \Rightarrow \hat{C}_1 = 0 \Rightarrow 1 + \theta - v - w = 0$
- $p = 2 \Rightarrow \hat{C}_2 = 0 \Rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\theta - v(c-1) - wc = 0$
- $p = 3 \Rightarrow \hat{C}_3 = 0 \Rightarrow \frac{1}{3!} - \frac{(-1)^3}{3!}\theta - \frac{v(c-1)^2}{2!} - \frac{wc^2}{2!} = 0$
 $\Rightarrow \frac{1}{6} + \frac{1}{6}\theta - \frac{v(c-1)^2}{2} - \frac{wc^2}{2} = 0$

Ainda, para que o método tenha ordem 3 devemos considerar também a condição:

$$(v+w)C_2 = 0 \Rightarrow (v+w) \left\{ \frac{c^2}{2} - \frac{1}{2}u - a(c-1) - \lambda c \right\} = 0$$

Logo, toda solução do sistema constituído pelas equações anteriores nos fornecerá um método de ordem 3.

Portanto, resolvendo o sistema:

$$\begin{cases} c + u - a - \lambda = 0 \\ 1 + \theta - v - w = 0 \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\theta - v(c-1) - wc = 0 \\ \frac{1}{6} + \frac{1}{6}\theta - \frac{v(c-1)^2}{2} - \frac{wc^2}{2} = 0 \\ (v+w) \left\{ \frac{c^2}{2} - \frac{1}{2}u - a(c-1) - \lambda c \right\} = 0 \end{cases}$$

através do software "Mathematica 4", obtemos os valores das variáveis u , a , θ , v e w com dois parâmetros livres c e λ que nos garantem para o método (7.1) ordem 3. São elas:

$$\begin{aligned} u &= \frac{2c - c^2 - 2\lambda}{2c - 1}, & a &= \frac{c + c^2 - \lambda - 2c\lambda}{2c - 1}, \\ \theta &= \frac{5 - 12c + 6c^2}{1 - 6c^2}, & v &= \frac{2(1 - 3c^2)}{1 - 6c^2}, \\ w &= \frac{2(2 - 6c + 3c^2)}{1 - 6c^2}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

ou seja,

$\frac{2c - c^2 - 2\lambda}{2c - 1}$	$\frac{c + c^2 - \lambda - 2c\lambda}{2c - 1}$	λ
$\frac{5 - 12c + 6c^2}{1 - 6c^2}$	$\frac{2(1 - 3c^2)}{1 - 6c^2}$	$\frac{2(2 - 6c + 3c^2)}{1 - 6c^2}$

Podemos verificar também que para essa família de métodos seu estágio tem ordem 2. De fato:

$$\begin{aligned}
 C_2 &= \frac{c^2}{2} - \frac{(-1)^2}{2}u - a(c-1) - \lambda c \\
 &= \frac{c^2}{2} - \frac{1}{2} \left\{ \frac{-c^2 + 2c - 2\lambda}{2c - 1} \right\} - \left\{ \frac{c^2 + c - \lambda - 2c\lambda}{2c - 1} \right\} (c-1) - \lambda c \\
 &= \frac{1}{2(2c-1)} \{ 2c^3 - c^2 + c^2 - 2c + 2\lambda - 2c^3 + 2c^2 - 2c^2 + 2c + 2\lambda c \\
 &\quad - 2\lambda + 4\lambda c^2 - 4\lambda c - 2(2c-1)\lambda c \} = 0
 \end{aligned}$$

Agora, vamos construir métodos TSRK com ordem 2 e estágio também com ordem 2. Para isso, temos que resolver ao sistema:

- $C_1 = 0 \Rightarrow u + c - a - \lambda = 0$
- $\hat{C}_1 = 0 \Rightarrow \theta + 1 - v - w = 0$
- $\hat{C}_2 = 0 \Rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\theta - v(c-1) - wc = 0$
- $C_2 = 0 \Rightarrow \frac{c^2}{2} - \frac{1}{2}u - a(c-1) - \lambda c = 0$

Resolvendo o sistema acima através do software "Mathematica 4" encontramos a seguinte família de métodos TSRK a 3 parâmetros, com ordem 2 e estágio também com ordem 2:

$$\begin{aligned}
 u &= \frac{2c - c^2 - 2\lambda}{2c - 1}, & a &= \frac{c + c^2 - \lambda - 2c\lambda}{2c - 1}, \\
 v &= \frac{-1 + \theta + 2c + 2c\theta}{2}, & w &= \frac{3 - 2c + \theta - 2c\theta}{2}.
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Assim, temos duas famílias de métodos TSRK para $m = 1$, uma com ordem 3 e estágio de ordem 2 e a outra com ordem 2 e estágio de mesma ordem.

7.3 Métodos TSRK com $m = 2$

Consideremos métodos TSRK com dois estágios da forma:

$$\begin{array}{c|cc|cc} u_1 & a_{11} & a_{12} & \lambda & 0 \\ u_2 & a_{21} & a_{22} & b_{21} & \lambda \\ \hline \theta & v_1 & v_2 & w_1 & w_2 \end{array}$$

ou

$$\begin{cases} y_{i+1} = \theta y_{i-1} + (1 - \theta)y_i + h(v_1 f(Y_{i-1}^1) + v_2 f(Y_{i-1}^2) + w_1 f(Y_i^1) + w_2 f(Y_i^2)) \\ Y_i^1 = u_1 y_{i-1} + (1 - u_1)y_i + h(a_{11} f(Y_{i-1}^1) + \lambda f(Y_i^1) + a_{12} f(Y_{i-1}^2)) \\ Y_i^2 = u_2 y_{i-1} + (1 - u_2)y_i + h(a_{21} f(Y_{i-1}^1) + b_{21} f(Y_i^1) + a_{22} f(Y_{i-1}^2) + \lambda f(Y_i^2)) \end{cases} \quad (7.4)$$

Assumiremos $u_1 = u_2 = 0$ e $\theta = 0$, isto é:

$$\begin{array}{c|cc|cc} 0 & a_{11} & a_{12} & \lambda & 0 \\ 0 & a_{21} & a_{22} & b_{21} & \lambda \\ \hline 0 & v_1 & v_2 & w_1 & w_2 \end{array}$$

Logo, (7.4) se reduz a:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(v_1 f(Y_{i-1}^1) + v_2 f(Y_{i-1}^2) + w_1 f(Y_i^1) + w_2 f(Y_i^2)) \\ Y_i^1 = y_i + h(a_{11} f(Y_{i-1}^1) + \lambda f(Y_i^1) + a_{12} f(Y_{i-1}^2)) \\ Y_i^2 = y_i + h(a_{21} f(Y_{i-1}^1) + b_{21} f(Y_i^1) + a_{22} f(Y_{i-1}^2) + \lambda f(Y_i^2)) \end{cases} \quad (7.5)$$

Procuraremos obter métodos com estágios de ordem no mínimo 3, o que significa que devem ser verificadas as condições:

$$C_i = 0, \quad \forall i = 1, 2, 3. \quad (7.6)$$

Assumindo (7.6), o método (7.5) terá ordem 4 se e somente se

$$\hat{C}_i = 0, \quad \forall i = 1, 2, 3, 4. \quad (7.7)$$

Consideremos primeiro métodos do tipo 1, isto é, métodos com $\lambda = 0$. Logo (7.4) se reduz a:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(v_1 f(Y_{i-1}^1) + v_2 f(Y_{i-1}^2) + w_1 f(Y_i^1) + w_2 f(Y_i^2)) \\ Y_i^1 = y_i + h(a_{11} f(Y_{i-1}^1) + a_{12} f(Y_{i-1}^2)) \\ Y_i^2 = y_i + h(a_{21} f(Y_{i-1}^1) + b_{21} f(Y_i^1) + a_{22} f(Y_{i-1}^2)) \end{cases}$$

Resolvendo (7.6) e (7.7) obtemos:

- $C_1 = 0 \Rightarrow c - Ae - Be = 0$
 $\Rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \left(\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
 $\Rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + a_{12} \\ a_{21} + a_{22} + b_{21} \end{pmatrix}$
- $C_2 = 0 \Rightarrow \frac{1}{2}c^2 - Ac + Ae - Bc = 0$
 $\Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2}c_1^2 - a_{11}c_1 - a_{12}c_2 + a_{11} + a_{12} \\ \frac{1}{2}c_2^2 - a_{21}c_1 - a_{22}c_2 + a_{21} + a_{22} - b_{21}c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
- $C_3 = 0 \Rightarrow \frac{1}{3!}c^3 - \frac{1}{2}A(c - e)^2 - \frac{1}{2}Bc^2 = 0$
 $\Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{6}c_1^3 - \frac{1}{2}a_{11}(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}a_{12}(c_2^2 - 2c_2 + 1) \\ \frac{1}{6}c_2^3 - \frac{1}{2}a_{21}(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}a_{22}(c_2^2 - 2c_2 + 1) - \frac{1}{2}b_{21}c_1^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
- $\hat{C}_1 = 0 \Rightarrow 1 - (v_1 \ v_2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - (w_1 \ w_2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$
 $\Rightarrow 1 - v_1 - v_2 - w_1 - w_2 = 0$
- $\hat{C}_2 = 0 \Rightarrow \frac{1}{2} - (v_1 \ v_2) \begin{pmatrix} c_1 - 1 \\ c_2 - 1 \end{pmatrix} - (w_1 \ w_2) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$
 $\Rightarrow \frac{1}{2} - c_1(v_1 + w_1) - c_2(v_2 + w_2) + v_1 + v_2 = 0$
- $\hat{C}_3 = 0 \Rightarrow \frac{1}{6} - \frac{1}{2}(v_1 \ v_2) \begin{pmatrix} c_1 - 1 \\ c_2 - 1 \end{pmatrix}^2 - \frac{1}{2}(w_1 \ w_2) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}^2 = 0$
 $\Rightarrow \frac{1}{6} - \frac{1}{2}v_1(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}v_2(c_2^2 - 2c_2 + 1) - \frac{1}{2}w_1c_1^2 - \frac{1}{2}w_2c_2^2 = 0$
- $\hat{C}_4 = 0 \Rightarrow \frac{1}{24} - \frac{1}{6}(v_1 \ v_2) \begin{pmatrix} c_1 - 1 \\ c_2 - 1 \end{pmatrix}^3 - \frac{1}{6}(w_1 \ w_2) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}^3 = 0$
 $\Rightarrow \frac{1}{24} - \frac{1}{6}v_1(c_1 - 1)^3 - \frac{1}{6}v_2(c_2 - 1)^3 - \frac{1}{6}w_1c_1^3 - \frac{1}{6}w_2c_2^3 = 0$

Assim temos o seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 - a_{11} - a_{12} = 0 \\ c_2 - a_{21} - a_{22} - b_{21} = 0 \\ \frac{1}{2}c_1^2 - a_{11}c_1 - a_{12}c_2 + a_{11} + a_{12} = 0 \\ \frac{1}{2}c_2^2 - a_{21}c_1 - a_{22}c_2 + a_{21} + a_{22} - b_{21}c_1 = 0 \\ \frac{1}{6}c_1^3 - \frac{1}{2}a_{11}(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}a_{12}(c_2^2 - 2c_2 + 1) = 0 \\ \frac{1}{6}c_2^3 - \frac{1}{2}a_{21}(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}a_{22}(c_2^2 - 2c_2 + 1) - \frac{1}{2}b_{21}c_1^2 = 0 \\ 1 - v_1 - v_2 - w_1 - w_2 = 0 \\ \frac{1}{2} - c_1(v_1 + w_1) - c_2(v_2 + w_2) + v_1 + v_2 = 0 \\ \frac{1}{6} - \frac{1}{2}v_1(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}v_2(c_2^2 - 2c_2 + 1) - \frac{1}{2}w_1c_1^2 - \frac{1}{2}w_2c_2^2 = 0 \\ \frac{1}{24} - \frac{1}{6}v_1(c_1 - 1)^3 - \frac{1}{6}v_2(c_2 - 1)^3 - \frac{1}{6}w_1c_1^3 - \frac{1}{6}w_2c_2^3 = 0 \end{array} \right.$$

Tomando $c_1 = 0$ e considerando c_2 como um parâmetro livre, resolvemos o sistema acima com ajuda do software "Mathematica 4" e encontramos uma família de métodos com os seguintes coeficientes:

$$\begin{array}{ll} c_1 = 0 & a_{11} = 0 \\ a_{12} = 0 & a_{21} = \frac{c_2(3 - c_2)}{6} \\ a_{22} = \frac{c_2(3 + 2c_2)}{6(c_2 - 1)} & b_{21} = \frac{c_2(-6 + c_2^2)}{6(-1 + c_2)} \\ v_1 = \frac{-7 + 14c_2 - 6c_2^2}{12c_2(1 + c_2)} & v_2 = \frac{7 - 10c_2}{12c_2(1 - c_2)} \\ w_1 = \frac{17 - 38c_2 + 18c_2^2}{12c_2(c_2 - 1)} & w_2 = \frac{17 - 10c_2}{12c_2(1 + c_2)} \end{array} \quad (7.8)$$

Já, tomando c_1 como parâmetro livre obtivemos outra família de métodos, cujos coeficientes são:



$$\begin{aligned}
c_2 &= \frac{c_1^2 - 6}{3(c_1 - 2)} \\
a_{11} &= \frac{c_1^3}{4(3 - 3c_1 + c_1^2)} \\
a_{12} &= \frac{3c_1(-2 + c_1)^2}{4(3 - 3c_1 + c_1^2)} \\
a_{21} &= \frac{(6 - c_1)^2(72 - 162c_1 + 156c_1^2 - 63c_1^3 + 8c_1^4)}{108(-2 + c_1)^2(3 - 3c_1 + c_1^2)} \\
a_{22} &= \frac{(c_1^2 - 6)(180 - 486 + 498c_1^2 - 225c_1^3 + 38c_1^4)}{36c_1(c_1 - 2)(2c_1 - 3)(3 - 3c_1 + c_1^2)} \\
b_{21} &= \frac{2(c_1^2 - 6)(c_1^2 - 3c_1 + 3)(2c_1^2 - 12c_1 + 15)}{27c_1(c_1 - 2)^2(2c_1 - 3)} \\
v_1 &= \frac{12 - 24c_1 - c_1^2 + 44c_1^3 - 26c_1^4 + 4c_1^5}{8(3 - 3c_1 + c_1^2)(12 - 9c_1 + 2c_1^2)} \\
v_2 &= \frac{(c_1 - 2)(18 - 39c_1 - 16c_1^2 + 42c_1^3 - 12c_1^4)}{8c_1(3 - 2c_1)(3 - 3c_1 + c_1^2)} \\
w_1 &= \frac{36 - 48c_1 - 31c_1^2 + 68c_1^3 - 30c_1^4 + 4c_1^5}{8c_1(3 - 2c_1)(3 - 3c_1 + c_1^2)} \\
w_2 &= \frac{(2 - c_1)(42 - 135c_1 + 160c_1^2 - 78c_1^3 + 12c_1^4)}{8(3 - 3c_1 + c_1^2)(12 - 9c_1 + 2c_1^2)}
\end{aligned} \tag{7.9}$$

Assim, temos duas famílias de TSRK de ordem 4 e com estágios de ordem 3, considerando $\lambda = 0$, isto é, métodos do tipo 1.

Consideremos agora métodos do tipo 2, isto é, métodos com $\lambda \neq 0$. Resolvendo (7.6) e (7.7) através de procedimento análogo aos considerados no caso $\lambda = 0$ encontramos o seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 - a_{11} - a_{12} - \lambda = 0 \\ c_2 - a_{21} - a_{22} - b_{21} - \lambda = 0 \\ \frac{1}{2}c_1^2 - a_{11}c_1 - a_{12}c_2 + a_{11} + a_{12} - \lambda c_1 = 0 \\ \frac{1}{2}c_2^2 - a_{21}c_1 - a_{22}c_2 + a_{21} + a_{22} - b_{21}c_1 - \lambda c_2 = 0 \\ \frac{1}{6}c_1^3 - \frac{1}{2}a_{11}(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}a_{12}(c_2^2 - 2c_2 + 1) - \frac{1}{2}\lambda c_1^2 = 0 \\ \frac{1}{6}c_2^3 - \frac{1}{2}a_{21}(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}a_{22}(c_2^2 - 2c_2 + 1) - \frac{1}{2}b_{21}c_1^2 - \frac{1}{2}\lambda c_2^2 = 0 \\ 1 - v_1 - v_2 - w_1 - w_2 = 0 \\ \frac{1}{2} - c_1(v_1 + w_1) - c_2(v_2 + w_2) + v_1 + v_2 = 0 \\ \frac{1}{6} - \frac{1}{2}v_1(c_1^2 - 2c_1 + 1) - \frac{1}{2}v_2(c_2^2 - 2c_2 + 1) - \frac{1}{2}w_1c_1^2 - \frac{1}{2}w_2c_2^2 = 0 \\ \frac{1}{24} - \frac{1}{6}v_1(c_1 - 1)^3 - \frac{1}{6}v_2(c_2 - 1)^3 - \frac{1}{6}w_1c_1^3 - \frac{1}{6}w_2c_2^3 = 0 \end{array} \right.$$

Resolvemos este sistema considerando os parâmetros livres c_1 e λ , encontrando uma família de métodos do tipo 2 com os seguintes coeficientes:

$$\begin{aligned} b_{21} = & (2(-18c_1^8 + 2c_1^9 + c_1^6(27 - 396\lambda) + 54(5 - 12\lambda)\lambda^3 + 9c_1^7(5 + 6\lambda) \\ & + 162c_1\lambda^2(-5 + 12\lambda) - 162c_1^2(-5 + 9\lambda + 8\lambda^2) + 27c_1^5(-11 + 38\lambda + 8\lambda^2) \\ & - 27c_1^4(-18 + 35\lambda + 46\lambda^2) + 54c_1^3(-5 - 6\lambda + 47\lambda^2 + 4\lambda^3))) / \\ & (27c_1^2(-3 + 2c_1)(-2c_1 + c_1^2 + 2\lambda)^2); \end{aligned}$$

$$a_{11} = \frac{c_1^3(c_1 - 4\lambda)}{4(3c_1 - 3c_1^2 + c_1^3 - 3\lambda)};$$

$$a_{12} = \frac{3(-2c_1 + c_1^2 + 2\lambda)^2}{4(3c_1 - 3c_1^2 + c_1^3 - 3\lambda)};$$

$$\begin{aligned} a_{21} = & (63c_1^8 - 8c_1^9 - 108c_1^7(1 + 2\lambda) - 1296c_1\lambda^2(-1 + 3\lambda) + 432(-1 + 3\lambda)\lambda^3 \\ & + 216c_1^6(-1 + 6\lambda) + 324c_1^2\lambda(-4 + 9\lambda + 8\lambda^2) - 108c_1^5(-8 + 23\lambda + 8\lambda^2) + \end{aligned}$$

$$+ 108c_1^4(-9 + 14\lambda + 32\lambda^2) - 216c_1^3(-2 - 3\lambda + 23\lambda^2 + 4\lambda^3)) / \\ (108(3c_1 - 3c_1^2 + c_1^3 - 3\lambda)(-2c_1 + c_1^2 + 2\lambda)^2);$$

$$a_{22} = (38c_1^9 + 216(5 - 12\lambda)\lambda^3 - 9c_1^8(25 + 8\lambda) + 648c_1\lambda^2(-5 + 12\lambda) \\ + 18c_1^7(15 + 56\lambda) - 1620c_1^2\lambda(-2 + 3\lambda + 4\lambda^2) - 18c_1^6(-48 + 237\lambda + 8\lambda^2) \\ + 108c_1^5(-26 + 67\lambda + 22\lambda^2) - 108c_1^4(-27 + 32\lambda + 84\lambda^2) \\ + 216c_1^3(-5 - 15\lambda + 59\lambda^2 + 8\lambda^3)) / \\ (36c_1^2(-3 + 2c_1)(3c_1 - 3c_1^2 + c_1^3 - 3\lambda)(-2c_1 + c_1^2 + 2\lambda));$$

$$w_1 = (30c_1^6 - 4c_1^7 + 72c_1\lambda - 36\lambda^2 - 4c_1^5(17 + 12\lambda) + c_1^4(31 + 216\lambda) \\ - 16c_1^3(-3 + 13\lambda + 9\lambda^2) + 12c_1^2(-3 - 4\lambda + 18\lambda^2)) / \\ (8c_1^2(-3 + 2c_1)(3c_1 - 3c_1^2 + c_1^3 - 3\lambda)) \quad (7.10)$$

$$w_2 = (102c_1^6 - 12c_1^7 + 84\lambda^2 - 24c_1\lambda(7 + 12\lambda) - 4c_1^5(79 + 24\lambda) \\ + c_1^4(455 + 480\lambda) - 8c_1^3(39 + 103\lambda + 18\lambda^2) + 12c_1^2(7 + 50\lambda + 30\lambda^2)) / \\ (8(12c_1 - 9c_1^2 + 2c_1^3 - 12\lambda)(3c_1 - 3c_1^2 + c_1^3 - 3\lambda));$$

$$v_1 = (-26c_1^6 + 4c_1^7 - 24c_1\lambda + 12\lambda^2 + c_1^5(44 + 48\lambda) - c_1^4(1 + 168\lambda) \\ - 12c_1^2(-1 - 2\lambda + 6\lambda^2) + 8c_1^3(-3 + 8\lambda + 18\lambda^2)) / \\ (8(12c_1 - 9c_1^2 + 2c_1^3 - 12\lambda)(3c_1 - 3c_1^2 + c_1^3 - 3\lambda));$$

$$v_2 = (-66c_1^6 + 12c_1^7 + c_1^4(7 - 336\lambda) - 72c_1\lambda + 36\lambda^2 + 4c_1^5(25 + 24\lambda) \\ + c_1^2(36 + 96\lambda - 216\lambda^2) + 8c_1^3(-12 + 31\lambda + 18\lambda^2)) / \\ (8c_1^2(-3 + 2c_1)(3c_1 - 3c_1^2 + c_1^3 - 3\lambda));$$

$$c_2 = \frac{c_1^3 + 6c_1(-1 + \lambda) + 6\lambda}{3(-2c_1 + c_1^2 + 2\lambda)}$$

A família encontrada tem ordem 4 e estágios com ordem 3, mas agora com $\lambda \neq 0$, isto é, são métodos do tipo 2.

É importante observar que utilizando as condições de ordem corretas e seguindo o raciocínio considerado neste capítulo podemos gerar diferentes famílias de métodos TSRK, definidas por (4.3) como métodos lineares gerais.



Capítulo 8

A estabilidade dos métodos TSRK

8.1 Introdução

Neste capítulo vamos apresentar os desenvolvimentos necessários para a construção do polinômio de estabilidade dos métodos TSRK, conforme proposto em [4], e encontrar os correspondentes polinômios para as famílias de métodos construídas no capítulo anterior. Também mostraremos alguns exemplos de métodos dessa classe que são A-estáveis e A_0 -estáveis.

8.2 Construção do polinômio de estabilidade

Considerando o método TSRK definido em (4.2) como um método linear geral, vamos construir seu polinômio de estabilidade.

Para isto vamos reescrever o método (4.2) de forma conveniente, acrescentando identidades apropriadas Y_{i-1}^j para $j = 1, 2, \dots, m$ e para y_i , da seguinte forma:



$$\begin{aligned}
Y_{i-1}^1 &= Y_{i-1}^1 \\
&\vdots \\
Y_{i-1}^m &= Y_{i-1}^m \\
Y_i^1 &= u_1 y_{i-1} + (1 - u_1) y_i + h[a_{11} f(Y_{i-1}^1) + \dots + a_{1m} f(Y_{i-1}^m)] \\
&\quad + h[b_{11} f(Y_i^1) + \dots + b_{1m} f(Y_i^m)] \\
&\vdots \\
Y_i^m &= u_m y_{i-1} + (1 - u_m) y_i + h[a_{m1} f(Y_{i-1}^1) + \dots + a_{mm} f(Y_{i-1}^m)] \\
&\quad + h[b_{m1} f(Y_i^1) + \dots + b_{mm} f(Y_i^m)] \\
Y_i^1 &= u_1 y_{i-1} + (1 - u_1) y_i + h[a_{11} f(Y_{i-1}^1) + \dots + a_{1m} f(Y_{i-1}^m)] \\
&\quad + h[b_{11} f(Y_i^1) + \dots + b_{1m} f(Y_i^m)] \\
&\vdots \\
Y_i^m &= u_m y_{i-1} + (1 - u_m) y_i + h[a_{m1} f(Y_{i-1}^1) + \dots + a_{mm} f(Y_{i-1}^m)] \\
&\quad + h[b_{m1} f(Y_i^1) + \dots + b_{mm} f(Y_i^m)] \\
y_i &= y_i \\
y_{i+1} &= \theta y_{i-1} + (1 - \theta) y_i + h[v_1 f(Y_{i-1}^1) + \dots + v_m f(Y_{i-1}^m)] \\
&\quad + h[w_1 f(Y_i^1) + \dots + w_m f(Y_i^m)]
\end{aligned}$$

Escrevendo separadamente na forma matricial as $2m$ primeiras dessas equações e as $m + 2$ últimas temos:

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} Y_{i-1}^1 \\ \vdots \\ Y_{i-1}^m \\ Y_i^1 \\ \vdots \\ Y_i^m \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & u_1 & 1 - u_1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & u_m & 1 - u_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_{i-1}^1 \\ Y_{i-1}^2 \\ \vdots \\ Y_{i-1}^m \\ y_{i-1} \\ y_i \end{bmatrix} \\
&+ h \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{11} & \dots & a_{1m} & b_{11} & \dots & b_{1m} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mm} & b_{m1} & \dots & b_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(Y_{i-1}^1) \\ \vdots \\ f(Y_{i-1}^m) \\ f(Y_i^1) \\ \vdots \\ f(Y_i^m) \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} Y_i^1 \\ \vdots \\ Y_i^m \\ y_i \\ y_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & u_1 & 1 - u_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & u_m & 1 - u_m \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & \theta & 1 - \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_{i-1}^1 \\ \vdots \\ Y_{i-1}^m \\ y_{i-1} \\ y_i \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1m} & b_{11} & \dots & b_{1m} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mm} & b_{m1} & \dots & b_{mm} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ v_1 & \dots & v_m & w_1 & \dots & w_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(Y_{i-1}^1) \\ \vdots \\ f(Y_{i-1}^m) \\ f(Y_i^1) \\ \vdots \\ f(Y_i^m) \end{bmatrix}$$

Logo, definindo:

$$\begin{aligned} Y &= [Y_{i-1}^1 \dots Y_{i-1}^m \ Y_i^1 \dots Y_i^m]^T \\ f(Y) &= [f(Y_{i-1}^1) \dots f(Y_{i-1}^m) \ f(Y_i^1) \dots f(Y_i^m)]^T \\ y^{[i]} &= [Y_{i-1}^1 \dots Y_{i-1}^m \ y_{i-1} \ y_i]^T \\ e &= [1 \ 1 \dots 1]^T \in \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

podemos representar o método (4.2) como:

$$Y = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & u & e - u \end{bmatrix} y^{[i]} + h \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ A & B \end{bmatrix} f(Y) \quad (8.1)$$

$$y^{[i+1]} = \begin{bmatrix} 0 & u & e - u \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & \theta & 1 - \theta \end{bmatrix} y^{[i]} + h \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & 0 \\ v^T & w^T \end{bmatrix} f(Y)$$

Sejam as matrizes $A_1 \in \mathbb{R}^{(2m) \times (2m)}$, $A_2 \in \mathbb{R}^{(m+2) \times (2m)}$, $B_1 \in \mathbb{R}^{(2m) \times (m+2)}$ e $B_2 \in \mathbb{R}^{(m+2) \times (m+2)}$ da forma:

$$\begin{aligned} A_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ A & B \end{bmatrix}, & A_2 &= \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & 0 \\ v^T & w^T \end{bmatrix}, \\ B_1 &= \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & u & e - u \end{bmatrix}, & B_2 &= \begin{bmatrix} 0 & u & e - u \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & \theta & 1 - \theta \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

com $e = [1 \ 1 \dots 1]^T \in \mathbb{R}^m$. Então, o método (4.2) pode ser escrito como um método linear geral da forma:

$$\begin{bmatrix} Y \\ y^{[i+1]} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 & B_1 \\ A_2 & B_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} hf(Y) \\ y^{[i]} \end{bmatrix} \quad (8.2)$$

com $i = 1, 2, \dots, N - 1$.

Afim de construirmos o polinômio de estabilidade, devemos considerar a aplicação do método na forma (8.2) à equação teste:

$$y' = \xi y, \quad x \geq 0 \quad (8.3)$$

com $\xi \in \mathbb{C}$ em (8.3).

Daí obtemos:

$$\begin{cases} Y = A_1 h f(Y) + B_1 y^{[i]} \\ y^{[i+1]} = A_2 h f(Y) + B_2 y^{[i]} \end{cases} \xrightarrow{f(Y) = \xi Y} \begin{cases} Y = A_1 h \xi Y + B_1 y^{[i]} \\ y^{[i+1]} = A_2 h \xi Y + B_2 y^{[i]} \end{cases}$$

$$\xrightarrow{z = \xi h} \begin{cases} (I - z A_1) Y = B_1 y^{[i]} \\ y^{[i+1]} = A_2 z Y + B_2 y^{[i]} \end{cases} \quad (8.4)$$

Mas

$$(I - z A_1) = \begin{bmatrix} I & 0 \\ -z A & I - z B \end{bmatrix}$$

Logo, existe $(I - z A_1)^{-1}$ pois $\det(I - z A_1) = I(I - z B) \neq 0$.

Então, do primeiro sistema de (8.4) podemos obter:

$$Y = (I - z A_1)^{-1} B_1 y^{[i]}$$

que substituindo no segundo sistema, nos fornece:

$$y^{[i+1]} = A_2 z (I - z A_1)^{-1} B_1 y^{[i]} + B_2 y^{[i]}$$

Logo, podemos escrever:

$$y^{[i+1]} = M(z) y^{[i]}, \quad \text{com } i = 1, 2, \dots, N - 1, \quad (8.5)$$

onde $M(z) = B_2 + z A_2 (I - z A_1)^{-1} B_1$.

Ainda, temos que:

$$(I - z A_1)^{-1} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ -z A & I - z B \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ z(I - z B)^{-1} A & (I - z B)^{-1} \end{bmatrix}$$

e portanto:

$$\begin{aligned}
 A_2 (I - zA_1)^{-1} B_1 &= \\
 &= \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & 0 \\ v^T & w^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 \\ z(I - zB)^{-1}A & (I - zB)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & u & e - u \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & 0 \\ v^T & w^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ z(I - zB)^{-1}A & (I - zB)^{-1}u & (I - zB)^{-1}(e - u) \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & 0 \\ v^T & w^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A + zB(I - zB)^{-1}A & B(I - zB)^{-1}u & B(I - zB)^{-1}(e - u) \\ 0 & 0 & 0 \\ v^T + zw^T(I - zB)^{-1}A & w^T(I - zB)^{-1}u & w^T(I - zB)^{-1}(e - u) \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Assim:

$$\begin{aligned}
 M(z) &= B_2 + zA_2(I - zA_1)^{-1}B_1 \\
 &= \begin{bmatrix} z(A + zBS(z)A) & (I + zBS(z))u & (I + zBS(z))(e - u) \\ 0 & 0 & 1 \\ z(v^T + zw^TS(z)A) & \theta + zw^TS(z)u & (1 - \theta) + zw^TS(z)(e - u) \end{bmatrix} \quad (8.6)
 \end{aligned}$$

com $S(z) = (I - zB)^{-1}$.

É interessante observar que para métodos TSRK do tipo 2 o cálculo de $M(z)$ pode ser simplificado introduzindo-se a transformação $\tilde{z} = \frac{z}{1-\lambda z}$. Isto nos leva a:

$$M(z, \tilde{z}) = \begin{bmatrix} z(A + \tilde{z}B\tilde{S}(\tilde{z})A) & (I + \tilde{z}B\tilde{S}(\tilde{z}))u & (I + \tilde{z}B\tilde{S}(\tilde{z}))(e - u) \\ 0 & 0 & 1 \\ z(v^T + \tilde{z}w^T\tilde{S}(\tilde{z})A) & \theta + \tilde{z}w^T\tilde{S}(\tilde{z})u & (1 - \theta) + \tilde{z}w^T\tilde{S}(\tilde{z})(e - u) \end{bmatrix} \quad (8.7)$$

com $\tilde{S}(\tilde{z}) = (I - \tilde{z}\tilde{B})^{-1}$ e $\tilde{B} = B - \lambda I$.

Portanto, se desejamos investigar as propriedades de estabilidade de (8.2) com respeito a (8.3) basta considerarmos a função racional:

$$\rho(\eta, z) = \det(\eta I - M(z)) \quad (8.8)$$

que será a função de estabilidade do método linear geral (8.2).

Para métodos do tipo 2 torna-se mais conveniente trabalharmos com o polinômio

$$\rho(\eta, z) = (1 - \lambda z)^s \tilde{\rho}(\eta, z, \tilde{z}) \quad (8.9)$$

onde $\tilde{\rho}(\eta, z, \tilde{z})$ é definido por

$$\tilde{\rho}(\eta, z, \tilde{z}) = \det(\eta I - M(z, \tilde{z})).$$

Obviamente, as duas definições de $\rho(\eta, z)$ dadas por (8.8) e (8.9) coincidem para métodos TSRK do tipo 1 ($\lambda = 0$).

8.3 Polinômios de estabilidade para $m=1$

Primeiramente, vamos considerar a família de métodos dada por (7.2). Afim de analisarmos a estabilidade dos métodos dessa família, observe que $B = \lambda$ e portanto podemos considerá-la como uma matriz de custo do tipo 2.

Assim, por (8.9) temos que seu polinômio de estabilidade é dado por:

$$\rho(\eta, z) = (1 - \lambda z) \tilde{\rho}(\eta, z, \tilde{z}) = (1 - \lambda z) \det(\eta I - M(z, \tilde{z}))$$

onde

$$M(z, \tilde{z}) = \begin{bmatrix} z(a + \tilde{z}\lambda\tilde{S}(\tilde{z})a) & (1 + \tilde{z}\lambda\tilde{S}(\tilde{z}))u & (1 + \tilde{z}\lambda\tilde{S}(\tilde{z}))(1 - u) \\ 0 & 0 & 1 \\ z(v + \tilde{z}w\tilde{S}(\tilde{z})a) & \theta + \tilde{z}w\tilde{S}(\tilde{z})u & (1 - \theta) + \tilde{z}w\tilde{S}(\tilde{z})(1 - u) \end{bmatrix}.$$

Mas $\tilde{B} = B - \lambda I = \lambda - \lambda = 0$, portanto $\tilde{S}(\tilde{z}) = (I - \tilde{z}\tilde{B})^{-1} = (I - 0)^{-1} = 1$.

Logo:

$$M(z, \tilde{z}) = \begin{bmatrix} z(a + \tilde{z}\lambda a) & (1 + \tilde{z}\lambda)u & (1 + \tilde{z}\lambda)(1 - u) \\ 0 & 0 & 1 \\ z(v + \tilde{z}wa) & \theta + \tilde{z}wu & (1 - \theta) + \tilde{z}w(1 - u) \end{bmatrix}$$

Portanto:

$$\begin{aligned} \rho(\eta, z) &= \\ &= (1 - \lambda z) \det \left(\begin{bmatrix} \eta & 0 & 0 \\ 0 & \eta & 0 \\ 0 & 0 & \eta \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} z(a + \tilde{z}\lambda a) & (1 + \tilde{z}\lambda)u & (1 + \tilde{z}\lambda)(1 - u) \\ 0 & 0 & 1 \\ z(v + \tilde{z}wa) & \theta + \tilde{z}wu & (1 - \theta) + \tilde{z}w(1 - u) \end{bmatrix} \right) \\ &= (1 - \lambda z) \det \begin{bmatrix} \eta - z(a + \tilde{z}\lambda a) & -(1 + \tilde{z}\lambda)u & -(1 + \tilde{z}\lambda)(1 - u) \\ 0 & \eta & -1 \\ -z(v + \tilde{z}wa) & -(\theta + \tilde{z}wu) & \eta - ((1 - \theta) + \tilde{z}w(1 - u)) \end{bmatrix} \\ &= (1 - \lambda z) \{ (\eta - z(a + \tilde{z}\lambda a))\eta(\eta - ((1 - \theta) + \tilde{z}w(1 - u))) \\ &\quad - (1 + \tilde{z}\lambda)u(z(v + \tilde{z}wa)) - z(v + \tilde{z}wa)\eta(1 + \tilde{z}\lambda)(1 - u) - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - (\theta + \tilde{z}wu)(\eta - z(a + \tilde{z}\lambda a))\} \\
& = (1 - \lambda z)\{\eta^3 - (1 - \theta + \tilde{z}w - \tilde{z}wu + az + z\tilde{z}\lambda a)\eta^2 + (za - za\theta + za\tilde{z}w \\
& - za\tilde{z}wu + z\tilde{z}\lambda a - z\tilde{z}\lambda a\theta + z\tilde{z}\lambda a\tilde{z}w - z\tilde{z}\lambda a\tilde{z}wu - zv + zvu - zv\tilde{z}\lambda \\
& + zv\tilde{z}\lambda u - z\tilde{z}wa + z\tilde{z}wau - z\tilde{z}wa\tilde{z}\lambda + z\tilde{z}wa\tilde{z}\lambda u - \theta - \tilde{z}wu)\eta + (-uzv \\
& - uz\tilde{z}wa - \tilde{z}\lambda uzv - \tilde{z}\lambda uz\tilde{z}wa + \theta za + \theta z\tilde{z}\lambda a + \tilde{z}wuza + \tilde{z}wuz\tilde{z}\lambda a)\}
\end{aligned}$$

Considerando $\tilde{z} = \frac{z}{1 - \lambda z}$ obtemos:

$$\begin{aligned}
\rho(\eta, z) &= (1 - \lambda z) \eta^3 - [1 - \theta + (-\lambda + \lambda\theta + w - wu + a)z] \eta^2 \\
&+ [-\theta + (a - a\theta - v + vu + \theta\lambda - wu)z] \eta - (-\theta a + uv)z \\
&= (1 - \lambda z) \eta^3 - \rho_2(z)\eta^2 + \rho_1(z)\eta - \rho_0(z)
\end{aligned} \tag{8.10}$$

com

$$\begin{aligned}
\rho_2(z) &= 1 - \theta + (-\lambda + \lambda\theta + w - wu + a)z \\
\rho_1(z) &= -\theta + (a - a\theta - v + vu + \theta\lambda - wu)z \\
\rho_0(z) &= (-\theta a + uv)z
\end{aligned} \tag{8.11}$$

Substituindo em (8.11) a expressão das variáveis u , a , θ , v e w de (7.2), encontramos:

$$\begin{aligned}
\rho_2(z) &= \frac{4 - 12c + 12c^2 - (4 - 5c - 9c^2 - 3\lambda + 18c^2\lambda)z}{(6c^2 - 1)} \\
\rho_1(z) &= \frac{5 - 12c + 6c^2 + (2 - 8c + 12c^2 + 3\lambda - 18c^2\lambda)z}{(6c^2 - 1)} \\
\rho_0(z) &= \frac{(3c^2 - c + \lambda - 6c^2\lambda)z}{(6c^2 - 1)}
\end{aligned} \tag{8.12}$$

Consideremos primeiro o caso $\lambda = 0$, o qual corresponde a métodos TSRK explícitos. Então, o polinômio de estabilidade será:



$$\rho(\eta, z) = \eta^3 - \rho_2(z)\eta^2 + \rho_1(z)\eta - \rho_0(z)$$

com

$$\begin{aligned}\rho_2(z) &= \frac{4 - 12c + 12c^2 - (4 - 5c - 9c^2)z}{(6c^2 - 1)} \\ \rho_1(z) &= \frac{5 - 12c + 6c^2 + (2 - 8c + 12c^2)z}{(6c^2 - 1)} \\ \rho_0(z) &= \frac{(3c^2 - c)z}{(6c^2 - 1)}\end{aligned}\quad (8.13)$$

Uma vez encontrado o polinômio de estabilidade podemos pensar na determinação de seu intervalo de estabilidade absoluta. Para isso, vamos utilizar o critério de Routh-Hurwitz. Calculando o polinômio de estabilidade (8.13) no ponto $\frac{1+\eta}{1-\eta}$, temos:

$$\begin{aligned}\rho\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}, z\right) &= \left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right)^3 - \left(\frac{4 - 12c + 12c^2 - (4 - 5c - 9c^2)z}{(6c^2 - 1)}\right) \left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right)^2 \\ &\quad + \left(\frac{5 - 12c + 6c^2 + (2 - 8c + 12c^2)z}{(6c^2 - 1)}\right) \left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right) - \left(\frac{(3c^2 - c)z}{(6c^2 - 1)}\right) \\ &= \frac{1}{(1-\eta)^3(6c^2 - 1)} \{ (6c^2 - 1)(1+\eta)^3 - (4 - 12c + 12c^2) \\ &\quad (1+\eta)^2(1-\eta) + (4 - 5c - 9c^2)z(1+\eta)^2(1-\eta) \\ &\quad + (5 - 12c + 6c^2)(1+\eta)(1-\eta)^2 \\ &\quad + (2 - 8c + 12c^2)z(1+\eta)(1-\eta)^2 - (3c^2 - c)z(1-\eta)^3 \}\end{aligned}$$

Logo, seu polinômio de Schur é da forma:

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}, z\right) &= (1-\eta)^3 \rho\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}, z\right) \\ &= \frac{1}{(6c^2 - 1)} \{ 6c^2 + 18c^2\eta + 18c^2\eta^2 + 6c^2\eta^3 - 1 - 3\eta - 3\eta^2 \\ &\quad - \eta^3 + 4\eta^3 + 4\eta^2 - 4\eta - 4 - 12c\eta^3 - 12c\eta^2 + 12c\eta + 12c \\ &\quad + 12c^2\eta^3 + 12c^2\eta^2 - 12c^2\eta - 12c^2 - (4 - 5c - 9c^2)z\eta^3 \\ &\quad - (4 - 5c - 9c^2)z\eta^2 + (4 - 5c - 9c^2)z\eta + (4 - 5c - 9c^2)z \\ &\quad + (5 - 12c + 6c^2)\eta^3 + (-5 + 12c - 6c^2)\eta^2 + (-5 + 12c - 6c^2)\eta\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (5 - 12c + 6c^2) + (2 - 8c + 12c^2)z\eta^3 + (-2 + 8c - 12c^2)z\eta^2 \\
& + (-2 + 8c - 12c^2)z\eta + (2 - 8c + 12c^2)z + (3c^2 - c)z\eta^3 \\
& + 3(-3c^2 + c)z\eta^2 + 3(3c^2 - c)z\eta + (-3c^2 + c)z \}
\end{aligned}$$

Assim, temos:

$$\tilde{p}\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}, z\right) = a_0\eta^3 + a_1\eta^2 + a_2\eta + a_3$$

onde a_i para $i = 0, \dots, 3$ são os coeficientes de Schur, dados por:

$$\begin{aligned}
a_0 &= \frac{24c^2 - 24c + 8 + (24c^2 - 4c - 2)z}{(6c^2 - 1)} \\
a_1 &= \frac{24c^2 - 4 - (12c^2 - 16c + 6)z}{(6c^2 - 1)} \\
a_2 &= \frac{24c - 12 - (12c^2 - 2)z}{(6c^2 - 1)} \\
a_3 &= \frac{-(12c - 6)z}{(6c^2 - 1)}
\end{aligned}$$

Usando as condições necessárias e suficientes para a estabilidade absoluta dada pelo critério de Routh-Hurwitz, temos que para se determinar o intervalo de estabilidade absoluta devemos ter os $a_i > 0$ para $i = 0, \dots, 3$ e $a_1a_2 - a_3a_0 > 0$.

Mas:

- $a_0 > 0 \Rightarrow \frac{24c^2 - 24c + 8 + (24c^2 - 4c - 2)z}{6c^2 - 1} > 0 \Rightarrow z > \frac{(-24c^2 + 24c - 8)}{24c^2 - 4c - 2}$
 $\Rightarrow z > \frac{4(3c^2 - 3c + 1)}{-12c^2 + 2c + 1}$
- $a_1 > 0 \Rightarrow \frac{24c^2 - 4 - (12c^2 - 16c + 6)z}{6c^2 - 1} \Rightarrow z < -\frac{-24c^2 + 4}{12c^2 - 16c + 6}$
 $\Rightarrow z < \frac{12c^2 - 2}{6c^2 - 8c + 3}$
- $a_2 > 0 \Rightarrow \frac{24c^2 - 12 - (12c^2 - 2)z}{6c^2 - 1} > 0 \Rightarrow z < -\frac{-24c + 12}{12c^2 - 2}$
 $\Rightarrow z < \frac{12c - 6}{6c^2 - 1}$
- $a_3 > 0 \Rightarrow \frac{-(12c - 6)z}{6c^2 - 1} > 0 \Rightarrow z < 0$

Daí, considerando as limitações encontradas para z e a desigualdade $a_1 a_2 > a_3 a_0$ chegamos ao intervalo de estabilidade do método (7.2) com $\lambda = 0$, dado por:

$$\left[\frac{4(3c^2 - 3c + 1)}{-12c^2 + 2c + 1}, 0 \right] \quad (8.14)$$

Observe que para $c = \frac{1}{2}$ e $c \rightarrow \infty$ o intervalo de estabilidade absoluta atinge seu tamanho máximo $[-1, 0]$. Entretanto, para estes valores de c temos que θ , definido por (7.2) assume o valor $\theta = -1$, o que viola a condição de zero estabilidade do método TSRK. Portanto, apesar de chegarmos ao intervalo de tamanho máximo, são valores de c que tornam o método sem valor prático.

Já, a opção $c = 1$ nos leva ao método:

$$\begin{array}{c|c|c} 1 & 2 & 0 \\ \hline \frac{1}{5} & \frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{array}$$

que tem como intervalo de estabilidade absoluta $[-\frac{4}{3}, 0]$.

Considendo agora o caso implícito, isto é, $\lambda \neq 0$, vamos investigar as propriedades de estabilidade do método. Por conveniência vamos escrever o método em termos de θ e λ ao invés de c e λ . Mas:

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{6c^2 - 12c + 5}{1 - 6c^2} & \Rightarrow & \theta - 6c^2\theta - 6c^2 + 12c - 5 = 0 \\ \Rightarrow 6c^2(\theta + 1) - 12c + (5 - \theta) &= 0 & \Rightarrow & c = \frac{12 \pm \sqrt{144 - 4(6\theta + 6)(5 - \theta)}}{12(\theta + 1)} \\ \Rightarrow c = \frac{12 \pm \sqrt{24(\theta^2 - 4\theta + 1)}}{12(\theta + 1)} & \Rightarrow & c = \frac{6 \pm \sqrt{6(\theta^2 - 4\theta + 1)}}{6(\theta + 1)} \end{aligned}$$

com $\theta \neq -1$.

Conforme Jackiewicz e Tracogna [16], assumindo $-1 < \theta \leq 1 - \frac{\sqrt{3}}{2}$, vamos obter métodos dessa família com coeficientes reais.

Substituindo a expressão encontrada para c no polinômio de estabilidade dado por (8.10) e (8.12), temos:

$$\begin{aligned} \rho(\eta, z) &= (1 - \lambda z)\eta^3 - (1 - \theta + \frac{1}{12}(23 + 5\theta - 36\lambda)z)\eta^2 \\ &+ (-\theta + \frac{1}{3}(4 - 2\theta - 9\lambda)z)\eta - \frac{1}{12}(5 - \theta - 12\lambda)z. \end{aligned} \quad (8.15)$$

Consideremos agora a classe de TSRK de ordem 2 e com estágio também de ordem 2, dada por (7.3). Substituindo os valores das variáveis u , a , v e w na expressão do polinômio de estabilidade dado por (8.11), temos:

$$\begin{aligned}
 \bullet \rho_0(z) &= (uv - \theta a)z \\
 &= \left\{ \left(\frac{2c - c^2 - 2\lambda}{2c - 1} \right) \left(\frac{2c + \theta + 2c\theta - 1}{2} \right) - \theta \left(\frac{c + c^2 - \lambda - 2c\lambda}{2c - 1} \right) \right\} z \\
 &= \left\{ \frac{-2c^3 - 2c^3\theta + \theta c^2 + 5c^2 - 4c\lambda + 2\lambda - 2c}{2(2c - 1)} \right\} z \\
 &= \left(\frac{2c - c^2 - 2\lambda - c^2\theta}{2} \right) z \\
 \\
 \bullet \rho_1(z) &= -\theta + (a - a\theta - v + vu + \theta\lambda - wu)z \\
 &= -\theta + \left\{ \frac{c + c^2 - \lambda - 2c\lambda}{2c - 1} - \left(\frac{c + c^2 - \lambda - 2c\lambda}{2c - 1} \right) \theta \right. \\
 &\quad - \left(\frac{-1 + \theta + 2c + 2c\theta}{2} \right) + \left(\frac{-1 + \theta + 2c + 2c\theta}{2} \right) \left(\frac{2c - c^2 - 2\lambda}{2c - 1} \right) \\
 &\quad \left. + \theta\lambda - \left(\frac{3 - 2c + \theta - 2c\theta}{2} \right) \left(\frac{2c - c^2 - 2\lambda}{2c - 1} \right) \right\} z \\
 &= -\theta + \left\{ \frac{-1 - 2c + 10c^2 + 2c^2\theta - 4c^3 - 4c^3\theta - 12c\lambda - 2c\theta + \theta + 6\lambda}{2(2c - 1)} \right\} z \\
 &= -\theta + \left(\frac{1 + 4c - 2c^2 - 6\lambda - \theta - 2c^2\theta}{2} \right) z \\
 \\
 \bullet \rho_2(z) &= 1 - \theta + (-\lambda + \lambda\theta + w - wu + a)z \\
 &= 1 - \theta + \left\{ -\lambda + \lambda\theta + \left(\frac{3 - 2c + \theta - 2c\theta}{2} \right) - \left(\frac{3 - 2c + \theta - 2c\theta}{2} \right) \right. \\
 &\quad \left. \left(\frac{2c - c^2 - 2\lambda}{2c - 1} \right) + \frac{c + c^2 - \lambda - 2c\lambda}{2c - 1} \right\} z \\
 &= 1 - \theta + \left\{ \frac{-2c^3\theta - 2c^3 + 5c^2 + c^2\theta + 2c\theta - \theta - 12c\lambda + 6\lambda + 4c - 3}{2(2c - 1)} \right\} z \\
 &= 1 - \theta + \left(\frac{3 + 2c - c^2 - 6\lambda + \theta - c^2\theta}{2} \right) z
 \end{aligned}$$

Assim, o polinômio de estabilidade dessa classe de métodos é da forma:

$$\rho(\eta, z) = (1 - \lambda z)\eta^3 - \rho_2(z)\eta^2 + \rho_1(z)\eta - \rho_0(z),$$

com

$$\begin{aligned}
 \rho_0(z) &= \left(\frac{2c - c^2 - 2\lambda - c^2\theta}{2} \right) z \\
 \rho_1(z) &= -\theta + \left(\frac{1 + 4c - 2c^2 - 6\lambda - \theta - 2c^2\theta}{2} \right) z \\
 \rho_2(z) &= 1 - \theta + \left(\frac{3 + 2c - c^2 - 6\lambda + \theta - c^2\theta}{2} \right) z
 \end{aligned} \tag{8.16}$$

8.4 Polinômios de estabilidade para $m=2$

Vamos determinar a forma geral do polinômio de estabilidade para métodos TSRK do tipo 1 com $m = 2$. Com ajuda do software "Matemática 4" e sabendo que $M(z)$ é dada por (8.6) encontramos:

$$M(z) = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & t_1 & y_1 \\ p_{21} & p_{22} & t_2 & y_2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ f_1 & f_2 & q & r \end{pmatrix}$$

onde:

$$\begin{aligned}
 p_{11} &= a_{11}z; & p_{12} &= a_{12}z; \\
 p_{21} &= a_{21}z + a_{11}b_{21}z^2; & p_{22} &= a_{22}z + b_{21}a_{12}z^2; \\
 t_1 &= u_1; & t_2 &= b_{21}u_1z + u_2; \\
 y_1 &= 1 - u_1; & y_2 &= b_{21}(1 - u_1)z + 1 - u_2; \\
 f_1 &= v_1z + (w_1a_{11} + w_2a_{21})z^2 + w_2b_{21}a_{11}z^3; \\
 f_2 &= v_2z + (w_1a_{12} + w_2a_{22})z^2 + b_{21}a_{12}w_2z^3; \\
 q &= \theta + (w_1u_1 + w_2u_2)z + b_{21}w_2u_1z^2; \\
 r &= (1 - \theta) + (w_1(1 - u_1) + w_2(1 - u_2))z + b_{21}w_2(1 - u_1)z^2.
 \end{aligned}$$

Logo, resolvendo (8.8) obtemos a forma geral o polinômio de estabilidade, que substituindo as variáveis de cada uma das famílias de métodos dadas por (7.8) e (7.9) nos dá o respectivo polinômio de estabilidade.

Considerando as variáveis do método (7.8) temos:

$$\begin{aligned}
\rho(\eta, z) = & \eta^4 + \left\{ \frac{-72(-1 + c_2^2) - (36 - 144c_2 + 168c_2^2 + 24c_2^3)}{-72(1 - c_2)(1 + c_2)} z \right. \\
& + \left. \frac{(102 - 17c_2^2 - 60c_2 + 10c_2^3)}{-72(1 - c_2)(1 + c_2)} z^2 \right\} \eta^3 \\
& + \left\{ \frac{(54 - 72c_2 + 48c_2^2 + 12c_2^3)}{-36(1 - c_2)(1 + c_2)} z + \frac{(21 - 48c_2 + 47c_2^2 + 8c_2^3)}{-36(1 - c_2)(1 + c_2)} z^2 \right\} \eta^2 \\
& + \left\{ -\frac{c_2(12 - 17c_2 - 2c_2^2)}{72(1 - c_2)(1 + c_2)} z^2 \right\} \eta
\end{aligned}$$

Seja:

$$\mu = \frac{c_2(12 - 17c_2 - 2c_2^2)}{72(1 - c_2)(1 + c_2)}, \quad (8.17)$$

Assim, o polinômio de estabilidade anterior se reduz a:

$$\begin{aligned}
\rho(\eta, z) = & \left[\eta^3 - \left(1 + \frac{24\mu - 1}{2} z + \frac{17 - 60\mu}{12} z^2 \right) \eta^2 \right. \\
& + \left. \left(\frac{3(8\mu - 1)}{2} z + \frac{96\mu - 7}{12} z^2 \right) \eta - \mu z^2 \right] \eta
\end{aligned} \quad (8.18)$$

De maneira análoga, para métodos cujos coeficientes são dados por (7.9), encontramos:

$$\begin{aligned}
\rho(\eta, z) = & \eta^4 + \\
& + \left\{ -1 + \frac{(9072 - 27864c_1 + 37044c_1^2 - 26406c_1^3 + 10224c_1^4 - 1872c_1^5 + 96c_1^6)}{-108c_1(2 - c_1)(2c_1 - 3)(12 - 9c_1 + 2c_1^2)} z \right. \\
& + \left. \frac{-3780 + 2214c_1 + 2574c_1^2 - 1917c_1^3 - 84c_1^4 + 258c_1^5 - 40c_1^6}{-108c_1(2 - c_1)(2c_1 - 3)(12 - 9c_1 + 2c_1^2)} z^2 \right\} \eta^3 \\
& + \left\{ \frac{-9072 + 20088c_1 - 22140c_1^2 + 15714c_1^3 - 6768c_1^4 + 1440c_1^5 - 96c_1^6}{-108c_1(2 - c_1)(2c_1 - 3)(12 - 9c_1 + 2c_1^2)} z \right. \\
& + \left. \frac{-6048 + 16632c_1 - 20970c_1^2 + 14931c_1^3 - 5952c_1^4 + 1140c_1^5 - 64c_1^6}{-108c_1(2 - c_1)(2c_1 - 3)(12 - 9c_1 + 2c_1^2)} z^2 \right\} \eta^2 \\
& + \left\{ \frac{(3 - 3c_1 + c_1^2)(126 - 315c_1 + 261c_1^2 - 75c_1^3 + 4c_1^4)}{-54c_1(2 - c_1)(2c_1 - 3)(12 - 9c_1 + 2c_1^2)} z^2 \right\} \eta
\end{aligned}$$

Da mesma forma, se tomarmos:

$$\mu = \frac{(3 - 3c_1 + c_1^2)(126 - 315c_1 + 261c_1^2 - 75c_1^3 + 4c_1^4)}{54c_1(2 - c_1)(2c_1 - 3)(12 - 9c_1 + 2c_1^2)}, \quad (8.19)$$

obtemos o mesmo polinômio dado por (8.18).

Conforme Jackiewicz e Tracogna [16], para $\mu = 0.13$ vamos obter o intervalo de estabilidade absoluta de tamanho máximo.

Vamos então, como ilustração considerar esse valor de μ . Então temos:

$$\rho(\eta, z) = \eta^4 + (-1 - 1.06z - 0.766667z^2)\eta^3 + (0.06z + 0.456667z^2)\eta^2 - 0.13z^2\eta \quad (8.20)$$

Logo, o correspondente polinômio de Schur é:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\eta, z) \approx & (2 + 1.12z + 1.35333z^2)\eta^4 + (6 + 2.12z + 1.27333z^2)\eta^3 \\ & + (6 - 0.12z - 0.913333z^2)\eta^2 + (2 - 2.12 - 1.27333z^2)\eta - z - 0.44z^2 \end{aligned}$$

Sabendo, pelo critério de Routh-Hurwitz, que todos os coeficientes do polinômio de Schur tem que ser estritamente positivos, ou seja:

$$a_0 \approx 2 + 1.12z + 1.35333z^2 > 0 \Rightarrow -2.27273 < z < 0$$

$$a_1 \approx 6 + 2.12z + 1.27333z^2 > 0 \Rightarrow -2.33701 < z < 0.67209$$

$$a_2 \approx 6 - 0.12z - 0.913333z^2 > 0 \Rightarrow -2.62961 < z < 2.49822$$

$$a_3 \approx 2 - 2.12z - 1.27333z^2 > 0$$

$$\Rightarrow -0.83246 - 2.00476i < z < -0.83246 + 2.00476i$$

$$a_4 \approx -z - 0.44z^2 > 0 \Rightarrow -0.413793 - 1.14307i < z < -0.413793 + 1.14307i$$

e ainda a desigualdade $a_1a_2a_3 - a_0a_3^2 - a_4a_1^2 > 0$. Logo considerando apenas os intervalos reais e fazendo as intersecções concluímos que o intervalo de estabilidade para (8.20) é aproximadamente $(-2.27273, 0)$.

Agora, consideremos a família de métodos dada por (7.8) e μ dado por (8.17). Resolvendo a expressão dada por μ obtemos duas raízes complexas para as quais temos $c_2 \approx 0.669444 \pm 0.677508i$ e uma raiz real para a qual $c_2 \approx -5.1588878$. Como estamos interessados apenas nas raízes reais, substituímos o valor de $c_2 \approx -5.1588878$ e lembrando que $c_1 = 0$, nas variáveis dadas por (7.8), de onde obtemos o seguinte método tipo 1:

0	0	0	0	0
0	-7.01513	-1.0216	2.87785	0
0	-0.927937	-0.153665	1.8152	0.266403

Considerando a família de métodos dada por (7.9) e $\mu = 0.13$ e resolvendo a expressão dada por μ em (8.19) obtemos quatro raízes complexas conjugadas, para as quais c_1 assume os valores $c_1 \approx 0.36722 \pm 1.31548i$, $c_1 \approx 1.62861 \pm 0.299213i$ e duas raízes reais para as quais $c_1 \approx 2.15183$ e $c_1 \approx 8.58651$. Estamos interessados apenas nas raízes reais, então substituindo esses dois valores de c_1 nas variáveis dadas por (7.9) obtemos dois outros métodos tipo 1:

$$\begin{array}{c|cc|cc} 0 & 2.12016 & 0.031664 & 0 & 0 \\ 0 & -4.89497 & -0.989938 & 2.87785 & 0 \\ \hline 0 & 1.19223 & -0.122001 & -0.304963 & 0.234739 \end{array}$$

para $c_1 \approx 2.15182556$ e $c_2 \approx -3.00706$.

E ainda,

$$\begin{array}{c|cc|cc} 0 & 3.10518 & 5.48132 & 0 & 0 \\ 0 & -3.90995 & 4.45972 & 2.87785 & 0 \\ \hline 0 & 2.17725 & 5.32766 & -1.28998 & -5.21492 \end{array}$$

para $c_1 \approx 8.5865062$ e $c_2 \approx 3.42762$.

Para estes três particulares métodos TSRK o polinômio de estabilidade é dado por (8.20).

Agora, para encontrarmos métodos TSRK tipo 3, consideramos $b_{21} = 0$, onde a expressão geral de b_{21} é dada por (7.8). Assim, resolvendo a equação $b_{21} = 0$ em c_2 encontramos três raízes reais para as quais c_2 é 0, $-\sqrt{6}$ e $\sqrt{6}$. Mas $c_2 = 0$ não pode ser considerada pois anula o denominador de algumas das expressões envolvidas em variáveis do método dado por (7.8).

Logo, substituindo cada um dos outros dois valores de c_2 nas variáveis dadas por (7.8) obtemos dois métodos do tipo 3.

$$\begin{array}{c|cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-2 \pm \sqrt{6}}{2} & \frac{2 \pm \sqrt{6}}{2} & 0 & 0 \\ \hline 0 & \frac{-342 \pm 127\sqrt{6}}{360} & \frac{18 \pm 53\sqrt{6}}{360} & \frac{522 \mp 103\sqrt{6}}{360} & \frac{162 \mp 77\sqrt{6}}{360} \end{array}$$

para $c_1 = 0$ e $c_2 \approx \pm\sqrt{6}$.

Para estes valores de c_2 encontramos na expressão de (8.17) $\mu = \frac{17}{60}$ e o seguinte polinômio de estabilidade para o método acima:

$$\rho(\eta, z) = \eta^4 - \left(1 + \frac{29}{10}z\right)\eta^3 + \left(\frac{19}{10}z + \frac{101}{60}z^2\right)\eta^2 - \frac{17}{60}z^2\eta \quad (8.21)$$

Tomemos agora $b_{21} = 0$ com b_{21} dado pela expressão em (7.9). Resolvendo esta expressão em c_1 encontramos duas raízes complexas conjugadas para as quais $c_1 = \frac{1}{2}(3 \pm \sqrt{3}i)$ e quatro raízes reais $c_1 = \pm\sqrt{6}$ e $c_1 = \frac{1}{2}(6 \pm \sqrt{6})$. Assim, podemos obter quatro métodos do tipo 3.

Logo tomando as duas raízes $c_1 = \pm\sqrt{6}$ e substituindo nas variáveis dada por (7.9) temos:

$$\begin{array}{c|cc|cc} 0 & \frac{2 \pm \sqrt{6}}{2} & \frac{-2 \pm \sqrt{6}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \frac{-18 \pm 53\sqrt{6}}{360} & \frac{-342 \pm 127\sqrt{6}}{360} & \frac{162 \mp 77\sqrt{6}}{360} & \frac{522 \mp 103\sqrt{6}}{360} \end{array}$$

para $c_2 = 0$.

Agora considerando as outras duas raízes $c_1 = \frac{1}{2}(6 \pm \sqrt{6})$ e substituindo também nas variáveis dadas por (7.9) obtemos:

$$\begin{array}{c|cc|cc} 0 & \frac{16 \pm \sqrt{6}}{8} & \frac{8 \pm \sqrt{6}}{8} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{8 \mp 3\sqrt{6}}{8} & \frac{16 \mp \sqrt{6}}{8} & 0 & 0 \\ \hline 0 & \frac{189 \mp 41\sqrt{6}}{180} & \frac{189 \pm 41\sqrt{6}}{180} & \frac{-99 \pm 29\sqrt{6}}{180} & \frac{-99 \mp 29\sqrt{6}}{180} \end{array}$$

para $c_2 = \frac{1}{2}(6 \mp \sqrt{6})$.

Para os quatro valores de c_1 encontramos também na expressão de (8.19) $\mu = \frac{17}{60}$ e portanto o mesmo polinômio de estabilidade dado por (8.21) para todos os quatro métodos.

Vamos agora encontrar o intervalo de estabilidade absoluta para o polinômio (8.21). Seu polinômio de Schur será:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\eta, z) \approx & \frac{1}{30} \{ (60 + 144z + 59z^2)\eta^4 + (180 + 174z - 17z^2)\eta^3 \\ & + (180 - 114z - 101z^2)\eta^2 + (60 - 174z + 17z^2)\eta + (-30z + 42z^2) \} \end{aligned}$$

Utilizando o critério de Routh-Hurwitz temos:

$$a_0 \approx \frac{1}{30}(60 + 144z + 59z^2) > 0 \Rightarrow z < 0 \quad e \quad z > \frac{5}{7}$$

$$a_1 \approx \frac{1}{30}(180 + 174z - 17z^2) > 0 \Rightarrow z < \frac{87 - \sqrt{6549}}{17} \quad e \quad z > \frac{87 + \sqrt{6549}}{17}$$

$$\begin{aligned}
 a_2 &\approx \frac{1}{30}(180 - 114z - 101z^2) > 0 \Rightarrow \frac{3(-19 - \sqrt{2381})}{101} < z < \frac{3(-19 + \sqrt{2381})}{101} \\
 a_3 &\approx \frac{1}{30}(60 - 174z + 17z^2) > 0 \Rightarrow \frac{3(29 - \sqrt{1181})}{17} < z < \frac{3(29 + \sqrt{1181})}{17} \\
 a_4 &\approx \frac{1}{30}(-30z + 42z^2) > 0 \Rightarrow \frac{2(-36 - \sqrt{411})}{59} < z < \frac{2(-36 + \sqrt{411})}{59}
 \end{aligned}$$

e a desigualdade $a_1 a_2 a_3 - a_0 a_3^2 - a_4 a_1^2 > 0$.

Assim fazendo as intersecções concluímos que o intervalo de estabilidade para (8.21) é $\left(\frac{2(-36 + \sqrt{411})}{59}, 0\right) \approx (-0.53311407, 0)$.

Consideremos agora métodos do tipo 2, isto é, métodos com $\lambda \neq 0$. E então encontremos a forma geral para o polinômio de estabilidade utilizando agora a expressão $M(z, \tilde{z})$ dada por (8.7):

$$M(z, \tilde{z}) = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & t_1 & y_1 \\ p_{21} & p_{22} & t_2 & y_2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ f_1 & f_2 & q & r \end{pmatrix}$$

onde:

$$\begin{aligned}
 p_{11} &= \left(a_{11} + \frac{a_{11}\lambda z}{1 - \lambda z}\right)z; \\
 p_{12} &= \left(a_{12} + \frac{a_{12}\lambda z}{1 - \lambda z}\right)z; \\
 p_{21} &= \left(a_{21} + \frac{(a_{21}\lambda + a_{11}(b_{21} + b_{21}\lambda z(1 - \lambda z)^{-1}))z}{1 - \lambda z}\right)z; \\
 p_{22} &= \left(a_{22} + \frac{(a_{22}\lambda + a_{12}(b_{21} + b_{21}\lambda z(1 - \lambda z)^{-1}))z}{1 - \lambda z}\right)z; \\
 t_1 &= u_1 \left(1 + \frac{\lambda z}{1 - \lambda z}\right); \\
 t_2 &= u_2 \left(1 + \frac{\lambda z}{1 - \lambda z}\right) + \frac{u_1(b_{21} + b_{21}\lambda z(1 - \lambda z)^{-1})z}{1 - \lambda z}; \\
 y_1 &= (1 - u_1) \left(1 + \frac{\lambda z}{1 - \lambda z}\right); \\
 y_2 &= (1 - u_2) \left(1 + \frac{\lambda z}{1 - \lambda z}\right) + \frac{(1 - u_1)(b_{21} + b_{21}\lambda z(1 - \lambda z)^{-1})z}{1 - \lambda z}; \\
 f_1 &= \left(v_1 + \frac{(a_{21}w_2 + a_{11}(w_1 + b_{21}zw_2(1 - \lambda z)^{-1}))z}{1 - \lambda z}\right)z;
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_2 &= \left(v_2 + \frac{(a_{22}w_2 + a_{12}(w_1 + b_{21}zw_2(1 - \lambda z)^{-1}))z}{1 - \lambda z} \right) z; \\
 q &= \theta + \frac{(u_2w_2 + u_1(w_1 + b_{21}zw_2(1 - \lambda z)^{-1}))z}{1 - \lambda z}; \\
 r &= (1 - \theta) + \frac{((1 - u_2)w_2 + (1 - u_1)(w_1 + b_{21}zw_2(1 - \lambda z)^{-1}))z}{1 - \lambda z}.
 \end{aligned}$$

Resolvendo (8.9) obtemos a forma geral para o polinômio de estabilidade dos métodos TSRK com dois estágios e do tipo 2, que substituindo as variáveis dadas em (7.10) obtemos o seguinte polinômio de estabilidade para esta família de métodos:

$$\rho(\eta, z) = [(1 - \lambda z)^2 \eta^3 - \rho_2(z) \eta^2 + \rho_1(z) \eta - \rho_0(z)] \eta$$

com

$$\rho_2(z) = 1 + \frac{24\mu - 1 + 16\lambda - 24\lambda^2}{2} z + \frac{17 - 60\mu - 96\lambda + 96\lambda^2}{12} z^2 \quad (8.22)$$

$$\rho_1(z) = \frac{24\mu - 3 + 20\lambda - 24\lambda^2}{2} z + \frac{96\mu - 7 + 48\lambda - 60\lambda^2}{12} z^2$$

$$\rho_0(z) = \mu z^2$$

onde:

$$\begin{aligned}
 \mu &= -(756c_1^3 - 2646c_1^4 + 996c_1^7 - 174c_1^8 + 8c_1^9 - 2268c_1^2\lambda + 2700c_1^3\lambda \\
 &+ 5652c_1^4\lambda - 3240c_1^7\lambda + 432c_1^8\lambda + 5130c_1^2\lambda^2 - 19728c_1^3\lambda^2 + 11232c_1^4\lambda^2 \\
 &+ 3456c_1^7\lambda^2 - 432c_1^8\lambda^2 + 10368c_1^2\lambda^3 + 11232c_1^3\lambda^3 - 20088c_1^4\lambda^3 \quad (8.23) \\
 &- 7776c_1^2\lambda^4 + 5184c_1^3\lambda^4 - 324c_1\lambda^2(-7 + 24\lambda) + 108\lambda^3(-7 + 24\lambda) \\
 &- 6c_1^6(441 - 1592\lambda + 1638\lambda^2 + 144\lambda^3) + 36c_1^5(103 - 357\lambda \\
 &+ 222\lambda^2 + 216\lambda^3)) / \\
 &(108c_1^2(-3 + 2c_1)(12c_1 - 9c_1^2 + 2c_1^3 - 12\lambda)(-2c_1 + c_1^2 + 2\lambda))
 \end{aligned}$$

8.5 Métodos TSRK A-estáveis e A₀-estáveis

Finalmente, como motivação para novos estudos, vamos apresentar alguns resultados relacionados com A-estabilidade e A₀-estabilidade dos métodos TSRK.

Tentaremos primeiro encontrar métodos de ordem 3 e estágio de ordem 2 que sejam A-estáveis. Temos que ter $\lambda > 0$, e segue do princípio do máximo que o método é A-estável se e somente se $\rho_3(\eta, y)$ é um polinômio de Schur com respeito a η , $\forall y \in \mathbb{R}$ onde $\rho_3(\eta, y) := \rho(\eta, iy)$.



Sejam:

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}_3(\eta, y) &= \eta^3 \rho_3 \left(\frac{1}{\eta}, -y \right); \\
 \rho_2(\eta, y) &= \frac{(\hat{\rho}_3(0, y) \rho_3(\eta, y) - \rho_3(0, y) \hat{\rho}_3(\eta, y))}{\eta}; \\
 \hat{\rho}_2(\eta, y) &= \eta^2 \rho_2 \left(\frac{1}{\eta}, -y \right); \\
 \rho_1(\eta, y) &= \frac{(\hat{\rho}_2(0, y) \rho_2(\eta, y) - \rho_2(0, y) \hat{\rho}_2(\eta, y))}{\eta}; \\
 \hat{\rho}_1(\eta, y) &= \eta \rho_1 \left(\frac{1}{\eta}, -y \right); \\
 \rho_0(y) &= \frac{(\hat{\rho}_1(0, y) \rho_1(\eta, y) - \rho_1(0, y) \hat{\rho}_1(\eta, y))}{\eta};
 \end{aligned} \tag{8.24}$$

Segue do teorema de Schur que $\rho_3(\eta, y)$ tem todas as raízes η no disco unitário $\forall y \in \mathbb{R}$ se e somente se:

$$\rho_0(y) > 0;$$

$$|\hat{\rho}_3(0, y)| - |\rho_3(0, y)| > 0$$

e

$$|\hat{\rho}_2(0, y)| - |\rho_2(0, y)| > 0$$

para todo $y \in \mathbb{R}$.

A obtenção dos polinômios de estabilidade, definidos por (8.24) é possível considerando-se (8.15) e com ajuda do software "Matemática 4". Aqui, como ilustração, mostraremos somente o último desses polinômios, o $\rho_0(y)$:

$$\begin{aligned}
 \rho_0(y) &= \frac{1}{12} y^4 \{ (1 + \theta)(-1 + \theta^2)(-9 + \theta + 24\lambda) \} - \frac{1}{432} y^6 \{ (1 + \theta)(-(-5 + \theta)^2 \\
 &\quad (-27 + (-14 + \theta)\theta) - 6(-5 + \theta)(-125 + \theta(-101 + \theta + \theta^2))\lambda \\
 &\quad - 288(1 + \theta)(-23 + (-4 + \theta)\theta)\lambda^2 - 3456(1 + \theta)^2\lambda^3 \} \\
 &\quad - \frac{1}{248832} y^8 \{ (-5 + \theta)(1 + \theta)(-11 + \theta + 24\lambda)(-5 + \theta + 24\lambda) \\
 &\quad (-15 - 2\theta + \theta^2 + 24(1 + \theta)\lambda)^2 \}
 \end{aligned} \tag{8.25}$$

As raízes de $\rho_0(y)$ são:

$$\begin{aligned}
 r_1 &= 0 \quad \text{com multiplicidade 4;} \\
 r_{2,3} &= \pm \frac{12}{\sqrt{(-5 + \theta)(-5 + \theta + 24\lambda)}}; \\
 r_{4,5} &= \pm \frac{12\sqrt{-(-1 + \theta^2)(-9 + \theta + 24\lambda)}}{\sqrt{(-11 + \theta + 24\lambda)(-15 + \theta^2 + 24\lambda + \theta(-2 + 24\lambda))^2}}.
 \end{aligned}$$

Assim para $\rho_0(y) > 0$, devem ser satisfeitas as seguintes inequações:

$$24\lambda + \theta - 9 < 0$$

$$24\lambda + \theta - 5 > 0$$

$$24\lambda + \theta - 11 > 0$$

Mas estas desigualdades não se verificam simultaneamente para qualquer λ e θ . Portanto, não existem métodos TSRK A-estáveis com ordem 3 e estágios de ordem 2.

Como ilustração, apresentaremos alguns métodos de ordem 4 e estágio com ordem 3, que segundo Jackiewicz e Tracogna [16] são A-estáveis. Consideremos então, a família de métodos dada por (7.10) e seu polinômio de estabilidade (8.22) e nelas tomemos por exemplo, $\lambda = 3/4$ e $\mu = 0$, onde μ é dado pela expressão (8.23). Resolvendo com respeito a c_1 observamos que não era possível a sua resolução diretamente, por isso, utilizando o método numérico de Newton para o seguinte polinômio:

$$\begin{aligned}
 128x^9 - 1488x^8 + 8160x^7 - 21996x^6 + 29520x^5 - 9018x^4 - 30996x^3 + 49572x^2 \\
 - 32076x + 8019 = 0
 \end{aligned}$$

obtemos seis raízes complexas $x \approx 0.839967 \pm 0.764777i$, $x \approx 1.09936 \pm 0.935325i$ e $x \approx 3.4696 \pm 3.22237i$ e ainda três raízes reais $x \approx -1.15993$, $x \approx 0.716383$ e $x \approx 1.250698$.

Consideremos apenas as raízes reais, lembrando que estas são os valores para c_1 . Assim, podemos encontrar três métodos tipo 2 de ordem 4 e estágios de ordem 3 que são A-estáveis.

Logo temos:

0	-0.14329	-1.76664	0.75	0	(8.26)
0	-0.51532	-2.63932	2.70983	0.75	
0	-0.180181	-1.85243	1.43511	1.5975	

para $c_1 \approx -1.159929$ e $c_2 \approx 0.301969$.

0	0.164905	-0.198522	0.75	0
0	-0.210337	-1.07121	2.70983	0.75
0	0.128015	-0.284316	1.12692	0.0293846

para $c_1 \approx 0.716383$ e $c_2 \approx 2.17828$.

0	0.693205	-0.192506	0.75	0
0	0.317963	-1.06519	2.70983	0.75
0	0.656314	-0.278301	0.598618	0.0233688

para $c_1 \approx 1.2506982$ e $c_2 \approx 2.7126$.

Como vimos anteriormente não é possível encontrar métodos TSRK A-estáveis com ordem 3 e estágios de ordem 2 mas podemos encontrar para essa classe métodos A₀-estáveis.

Para este fim precisamos verificar que o polinômio $\rho_3(\eta, x)$ é um polinômio de Schur com respeito a η , $\forall x$ real e negativo, onde $\rho_3(\eta, x) := \rho(\eta, x)$.

Sejam:

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}_3(\eta, x) &= \eta^3 \rho_3\left(\frac{1}{\eta}, x\right); \\
 \rho_2(\eta, x) &= \frac{(\hat{\rho}_3(0, x)\rho_3(\eta, x) - \rho_3(0, x)\hat{\rho}_3(\eta, x))}{\eta}; \\
 \hat{\rho}_2(\eta, x) &= \eta^2 \rho_2\left(\frac{1}{\eta}, x\right); \\
 \rho_1(\eta, x) &= \frac{(\hat{\rho}_2(0, x)\rho_2(\eta, x) - \rho_2(0, x)\hat{\rho}_2(\eta, x))}{\eta}; \\
 \hat{\rho}_1(\eta, x) &= \eta \rho_1\left(\frac{1}{\eta}, x\right); \\
 \rho_0(x) &= \frac{(\hat{\rho}_1(0, x)\rho_1(\eta, x) - \rho_1(0, x)\hat{\rho}_1(\eta, x))}{\eta};
 \end{aligned} \tag{8.27}$$

Segue do teorema de Schur que $\rho_3(\eta, x)$ tem todas as raízes η no disco unitário para $x < 0$ se e somente se:

$$\rho_0(x) > 0;$$

$$|\hat{\rho}_3(0, x)| - |\rho_3(0, x)| > 0$$

e

$$|\hat{\rho}_2(0, x)| - |\rho_2(0, x)| > 0.$$

Por exemplo, tomemos o polinômio de estabilidade dado em (8.15) e com ajuda do software "Matemática 4" podemos encontrar os polinômios definidos por (8.27). Ilustraremos somente o último desses polinômios, o $\rho_0(x)$:

$$\begin{aligned}\rho_0(x) = & -\frac{1}{248832}(x(12 + x(-5 + \theta))(1 + \theta)6(-1 + \theta) + x(-11 + \theta + 24\lambda)) \\ & (-12 + x(-5 + \theta + 24\lambda))(24(1 + \theta) + 2x(-11 + \theta(2 + \theta))) \\ & - x^2(-15 - 2\theta + \theta^2 + 24(1 + \theta)\lambda))^2\end{aligned}$$

As raízes de $\rho_0(x)$ são:

$$\begin{aligned}r_1 &= 0 ; \\ r_2 &= -\frac{12}{-5 + \theta} ; \\ r_3 &= -\frac{6 - 6\theta}{11 - \theta - 24\lambda} ; \\ r_4 &= -\frac{12}{5 - \theta - 24\lambda} \\ r_{4,5} &= -\frac{-11 + \theta(2 + \theta) \pm \sqrt{\Delta}}{+15 + 2\theta - \theta^2 - 24(1 + \theta)\lambda} \quad \text{com multiplicidade 2.}\end{aligned}$$

onde $\Delta = -239 - 454\theta - 42\theta^2 + 28\theta^3 + \theta^4 + 576(1 + \theta)^2\lambda$

Pode ser verificado que para $-1 < \theta \leq 1$, com exceção da raiz nula pois queremos $\rho_0(x) > 0$, todas estas raízes são reais e positivas se e somente se:

$$\begin{aligned}f_1(\lambda, \theta) &= 11 - \theta - 24\lambda < 0 \\ f_2(\lambda, \theta) &= 5 - \theta - 24\lambda < 0 \\ f_3(\lambda, \theta) &= +15 + 2\theta - \theta^2 - 24(1 + \theta)\lambda > 0 \\ \Delta &= -239 - 454\theta - 42\theta^2 + 28\theta^3 + \theta^4 + 576(1 + \theta)^2\lambda > 0\end{aligned} \quad (8.28)$$

Podemos então plotar as curvas $f_i(\lambda, \theta) = 0$, $i = 1, 2, 3$, $\Delta(\lambda, \theta) = 0$ e $\theta = 1 - \frac{\sqrt{3}}{2}$. Assim podemos observar que os métodos são A₀-estáveis para (λ, θ) encontrados na região escura da figura 8.1.

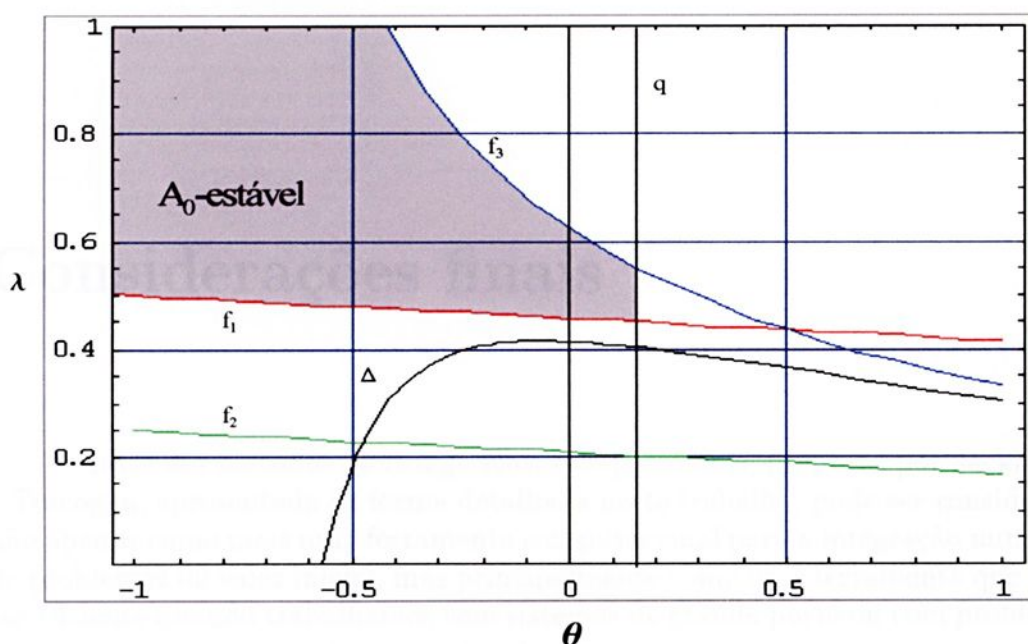


figura 8.1 - Métodos A₀-estáveis de ordem 3 e estágio de ordem 2.

Se considerarmos $\lambda = \frac{1}{2}$ e resolvermos $\theta = 0$ com θ dado em (7.2) encontramos duas raízes $c = \frac{1}{6}(6 \pm \sqrt{6})$. Logo substituindo estes valores nas variáveis dadas em (7.2) obtemos dois métodos A₀-estáveis de ordem 3 e estágios de ordem 2:

$\frac{-3 \pm \sqrt{6}}{6}$	$\frac{\pm \sqrt{6}}{3}$	$\frac{1}{2}$	(8.29)
0	$\frac{3 \pm \sqrt{6}}{6}$	$\frac{3 \mp \sqrt{6}}{6}$	

E substituindo estes valores em (8.12) encontramos o seguinte polinômio de estabilidade:

$$\rho(\eta, z) = \left(1 - \frac{1}{2} z\right) \eta^3 - \left(1 + \frac{5}{12} z\right) \eta^2 + \frac{1}{12} z - \frac{1}{6} \eta z$$

Considerações finais

A classe dos métodos de Runge-Kutta de passo dois, proposta por Jackiewicz e Tracogna, apresentada de forma detalhada neste trabalho, pode ser considerada não apenas como mais uma ferramenta computacional para a integração numérica de problemas de valor inicial, mas principalmente como uma ferramenta que pode ser eficiente quando trabalhamos com sistemas de grande porte ou com problemas que apresentam características especiais.

Quando pensamos em compará-la com outras classes de métodos devemos, de imediato considerar a classe dos métodos de Runge-Kutta.

Assim, apresentamos a seguir alguns resultados ilustrativos para problemas de valor inicial não stiff ou fracamente stiff, considerados em [5] e [11].

Para cada um desses problemas, integrando num determinado intervalo e considerando $h = 10^{-2}$, construímos uma tabela, a qual apresenta o erro absoluto, considerando o método TSRK1 dado em (8.29) e o método de Runge-Kutta de ordem 3.

Os exemplos que serão aqui apresentados não tem a pretensão de criar condições para que se possa tirar conclusões que permitam valorizar a eficiência dessa classe de métodos. Mas permitem destacar como uma condição de eficiência, quando consideramos seu esforço computacional, o baixo número de avaliações da derivada a cada integração.

Temos métodos TSRK com ordem 3 e estágio com ordem 2 que exigem apenas uma avaliação da derivada por passo de integração (por exemplo o TSRK1), e métodos de ordem 4 e 5 e estágios com ordem 3 e 4 exigindo apenas duas avaliações. Lembrando que um método de Runge-Kutta explícito de ordem 3 exige 3 avaliações, um de ordem 4 exige 4 avaliações e um de ordem 5 exige pelo menos 6 avaliações, podemos concluir que sob esse aspecto o ganho em esforço computacional pode ser considerável, dependendo da dimensão do sistema e do tamanho do intervalo de integração.

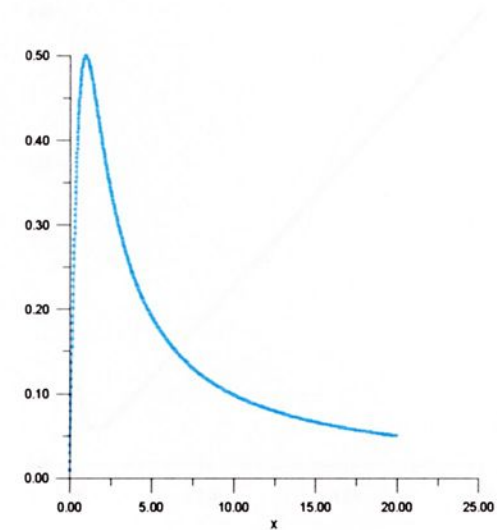


Ilustração 1 - Consideramos o pvi:

$$\begin{cases} y' = \frac{1}{1+x^2} - 2y^2 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

(8.30)

cuja solução exata é $y(x) = \frac{x}{1+x^2}$ e tem a forma:



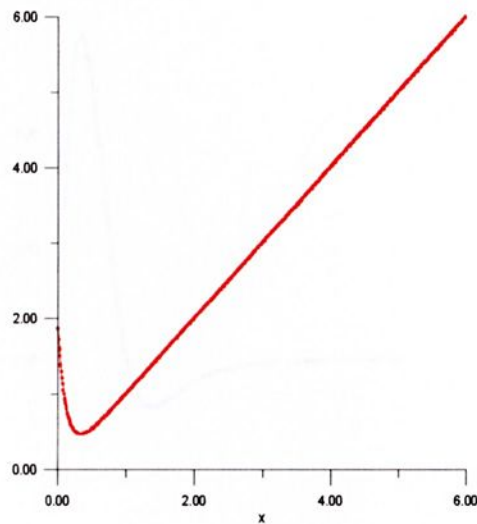
Considerando o intervalo de integração $[0, 20]$, temos a seguinte tabela para o erro absoluto:

x	TSRK1	RK3
0.2	6.56197E-8	1.78344E-8
0.4	1.32951E-7	5.61608E-8
0.6	8.49443E-8	8.49363E-8
0.8	1.16357E-8	9.09474E-8
1.0	7.92067E-8	8.03125E-8
2.0	5.41425E-8	1.70114E-8
4.0	3.64422E-9	4.03019E-10
6.0	1.92681E-10	1.47293E-10
8.0	1.04490E-10	1.08290E-10
10.0	1.01623E-10	6.52702E-11
15.0	4.26706E-11	2.06885E-11
20.0	1.8762E-11	8.32927E-12

Ilustração 2 - Consideramos o pvi:

$$\begin{cases} y' = -8(y - x) + 1 \\ y(0) = 2 \end{cases} \tag{8.31}$$

cuja solução exata é $y(x) = x + 2e^{-8x}$ e tem a forma:



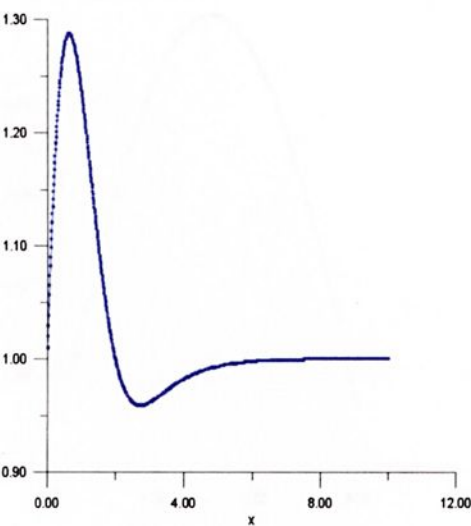
Dado o intervalo de integração $[0, 10]$, temos:

x	TSRK1	RK3
0.2	4.00543E-5	1.46947E-5
0.4	1.69843E-5	5.93352E-6
0.6	5.22564E-6	1.79690E-6
0.8	1.41780E-6	4.83709E-7
1.0	3.59497E-7	1.22072E-7
2.0	2.43498E-10	8.18936E-11
3.0	1.22935E-13	4.12044E-14
4.0	5.55111E-17	1.77809E-17
5.0	3.03577E-18	2.60208E-18
10.0	8.67362E-19	0

Ilustração 3 - Consideramos o pvi:

$$\begin{cases} y' = x(1 - y) + (1 - x)e^{-x} \\ y(0) = 1 \end{cases} \tag{8.32}$$

cuja solução exata é $y(x) = e^{-(x^2/2)} - e^{-x} + 1$ e tem a forma:



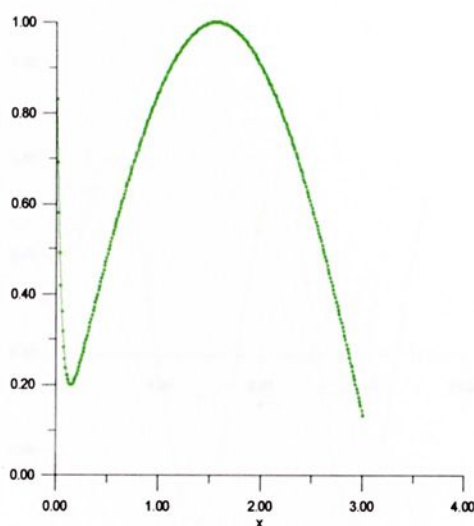
Seja o intervalo de integração $[0, 10]$, obtemos a seguinte tabela de erros:

x	TSRK1	RK3
0.2	1.44348E-9	1.57603E-8
0.4	5.57818E-9	2.90706E-8
0.6	2.30329E-8	3.89098E-8
0.8	4.82867E-8	4.42324E-8
1.0	7.49949E-8	4.43208E-8
2.0	5.58862E-8	5.38284E-9
3.0	1.84120E-8	1.18569E-8
4.0	2.81545E-9	1.32440E-9
5.0	7.67436E-10	1.71065E-9
6.0	3.46984E-10	7.68522E-10
7.0	1.24296E-10	3.22505E-10
8.0	4.46377E-11	1.33451E-10
9.0	1.61271E-11	5.46302E-11
10.0	5.84981E-12	2.21621E-11

Ilustração 4 - Consideramos o pvi:

$$\begin{cases} y' = -20y + 20 \sin x + \cos x \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (8.33)$$

cuja solução exata é $y(x) = \sin x + e^{-20x}$ e tem a forma:



Considerando o intervalo $[0, 3]$, obtemos a seguinte tabela:

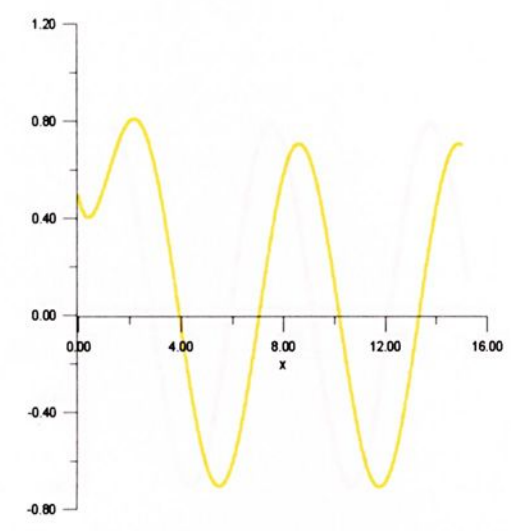
x	TSRK1	RK3
0.2	7.83991E-5	2.85169E-5
0.4	3.12352E-6	7.36909E-7
0.6	1.81959E-7	4.48340E-7
0.8	8.62062E-8	6.22724E-7
1.0	6.73519E-8	7.44854E-7
1.5	1.52345E-8	9.10919E-7
2.0	4.05648E-8	8.53943E-7
2.5	8.64324E-8	5.87892E-7
3.0	1.11138E-7	1.77905E-7

Ilustração 5 - Consideramos o pvi:

$$\begin{cases} y' = \sin(x) - y \\ y(0) = 0.5 \end{cases}$$

(8.34)

cuja solução exata é $y(x) = \frac{1}{2} (\sin(x) - \cos(x)) + e^{(-x)}$ e tem a forma:



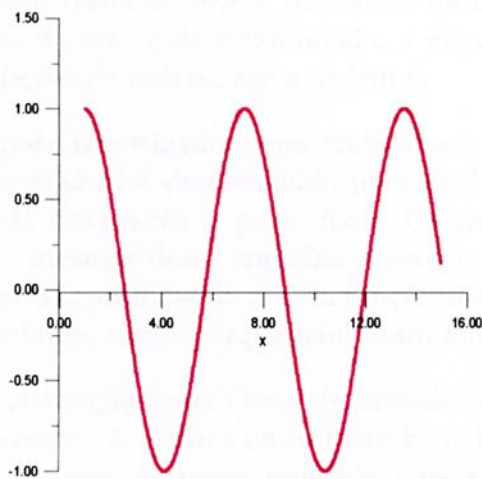
Tomando como intervalo de integração $[0, 15]$ obtemos:

x	TSRK1	RK3
1.0	9.18842E-8	1.91205E-8
2.0	8.87373E-8	1.20957E-10
3.0	3.30921E-8	1.54966E-8
4.0	2.96972E-8	1.10496E-8
5.0	5.19905E-8	7.15014E-9
6.0	1.99282E-8	2.06657E-8
7.0	3.34941E-8	1.60853E-8
8.0	5.74702E-8	2.87449E-9
9.0	2.91891E-8	1.90127E-8
10.0	2.56835E-8	1.75945E-8
12.0	3.56979E-8	1.76420E-8
14.0	5.54612E-8	2.93221E-9
15.0	4.16514E-8	1.58681E-8

Ilustração 6 - Consideramos o pvi:

$$\begin{cases} y' = -5y + \frac{1}{x}e^{-5x} + 5 \cos (x - 1) - \sin (x - 1) \\ y(1) = 1 \end{cases} \tag{8.35}$$

cuja solução exata é $y(x) = \cos (x - 1) + e^{-5x} \ln x$ e tem a forma:



Considerando o intervalo $[1, 10]$, temos a seguinte tabela de erro absoluto:

x	TSRK1	RK3
1.2	2.80425E-8	1.38082E-7
1.4	3.52913E-8	1.79419E-7
1.6	4.70398E-8	1.83244E-7
1.8	6.26300E-8	1.69192E-7
2.0	7.84957E-8	1.44554E-7
4.0	4.00897E-8	1.97299E-7
6.0	1.11288E-7	1.81672E-8
8.0	5.25341E-8	1.82178E-7
10.0	6.75639E-8	1.69793E-7

Embora para os exemplos apresentados observamos a plena equivalência do método TSRK1 com um método de Runge-Kutta de ordem 3, essas ilustrações não permitem concluir de forma generalizada quanto à eficiência dos TSRK, quando analisamos o seu erro absoluto e comparamos com outros métodos de mesma ordem, por exemplo os métodos de Runge-Kutta. Mas servem para que possamos considerar tais métodos para a integração de problemas de valor inicial não stiff ou mediantemente stiff, pois, conforme pode ser observado nos dois primeiros exemplos, à medida que avançamos com a integração o método se mostrou estável quanto ao acúmulo de erro.

Alertamos que nosso trabalho teve a pretensão de introduzir essa classe de métodos e os conceitos de erro e de estabilidade, a ela relacionados, bem como construir as suas condições de ordem, até a ordem 6.

Muito pode ser ainda investigado e construído nessa direção. Por exemplo, todo o trabalho apresentado foi desenvolvido para problemas de dimensão 1 e considera a hipótese de integração a passo fixo. Os resultados para dimensão maior do que 1 são os mesmos deste trabalho, mas sua obtenção torna-se bem mais elaborada e complexa, principalmente em função das dificuldades de notação e desenvolvimento algébrico, razão porque não foram apresentados.

Por outro lado, a utilização dessa classe de métodos com passo variável pode ser algo bastante motivador. A técnica de Nordsieck em [23] e [26], utilizada com sucesso para métodos lineares de passo múltiplo e para métodos multi-estágios diagonalmente implícitos, poderia também ser aqui considerada e provavelmente com bons resultados. Essa possibilidade parece-nos óbvia pois, como mostramos em nosso trabalho, os métodos TSRK podem ser facilmente transformados em métodos lineares gerais ou em A-métodos.

A implementação de forma eficiente dos métodos de Runge-Kutta de passo dois proposta por Jackiewicz e Tracogna, considerando técnicas de mudança de passo e até de ordem pode ser objeto de futuras investigações bem sucedidas, gerando uma ferramenta computacional que possa ser competitiva.

Também pode ser considerada a busca das condições de ordem para métodos dessa classe com ordem superior a 6. O caminho para isso é apenas mais árduo mas a idéia é a mesma utilizada para as ordens inferiores.



Referências Bibliográficas

- [1] Albrecht, P. - Numerical treatment of O.D.E.s: The theory of A-methods, *Numer. Math.*, **47** (1985), pp. 59-87.
- [2] Albrecht, P. - A new theoretical approach to Runge-Kutta methods, *SIAM J. Numer. Anal.*, **24** (1987), pp. 391-406.
- [3] Albrecht, P. - Consequences of a linear approach to Runge-Kutta methods, *manuscrito*.
- [4] Bartoszewski, Z. e Jackiewicz, Z. - Construction of two-step Runge-Kutta methods of high order for ordinary differential equations, *Numerical Algorithms*, **18** (1998), pp. 51-70.
- [5] Burden, R. L. e Faires, J. D. - *Numerical Analysis*, 6ª edição, PWS Publishing Company, Boston, 1993.
- [6] Butcher, J. C. - A modified multistep method for the numerical integration of ordinary differential equations, *J. Assoc. Comp. Math.*, **12** (1966), pp. 124-135.
- [7] Butcher, J. C. - *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations. Runge-Kutta and General Linear Methods*, John Wiley, New York, 1987.
- [8] Butcher, J. C. - Diagonally implicit multi-stage integration methods, *Appl. Numer. Math.*, **11** (1993), pp. 347-363.
- [9] Byrne, G. D. e Lambert, R. J. - Pseudo Runge-Kutta methods involving two-points, *Journal of the A.C.M.*, **13** (1966), n° 1, pp. 114-123.
- [10] Byrne, G. D. - Parametrus for Pseudo Runge-Kutta methods, *Communication A.C.M.*, **10**, n° 2 (1967), pp. 102-104.
- [11] Cunha, M. C. C. - *Métodos numéricos*, 2ª edição rev. ampl., Campinas-SP, editora da Unicamp, 2000.



- [12] Hairer, E. e Wanner, G. - Multistep-multistage-multiderivative methods for ordinary differential equations, *Computing*, **11** (1973), pp. 114-123.
- [13] Jackiewicz, Z., Renaut, R., e Feldstein, A. - Two-step Runge-Kutta methods, *SIAM J. Numer. Anal.*, **28** (1991), pp. 1165-1182.
- [14] Jackiewicz, Z., Renaut, R. e Zennaro, M. - Explicit Two-step Runge-Kutta methods for ordinary differential equation, *Appl. Math.*, **40** (1995), pp. 433-456.
- [15] Jackiewicz, Z. e Tracogna, S. - Variable stepsize continuous two-step Runge-Kutta methods for ordinary differential equations, *submetido*.
- [16] Jackiewicz, Z. e Tracogna, S. - A general class of two-step Runge-Kutta methods for ordinary differential equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **32**, nº 5 (1995), pp. 1390-1427.
- [17] Jackiewicz, Z. e Zennaro, M. - Variable stepsize explicit two-step Runge-Kutta methods, *Math. Comp.*, **59** (1992), pp. 421-438.
- [18] Lambert, J. D. - *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*, John Wiley & Sons, Chichester, New York, 1973.
- [19] Lambert, J. D. - *Numerical methods for ordinary differential systems*, John Wiley & Sons, Chichester, New York, 1991.
- [20] Nakashima, M. - On Pseudo Runge-Kutta methods with 2 and 3 stages, *Publ. RIMS*, Kyoto University, **18** (1982), pp. 895-909.
- [21] Nakashima, M. - On Pseudo Runge-Kutta methods of order 6, *Proc. Japan Academy*, **58** (1982), pp. 66-68.
- [22] Nakashima, M. - Pseudo Runge-Kutta methods processes, *Publ. RIMS*, Kyoto University, **23** (1987), pp. 568-611.
- [23] A. Nordsieck - On numerical integration of ordinary differential equations, *Math. Comp.*, **16** (1962), pp. 22-49.
- [24] Renaut, R. - Two-step Runge-Kutta methods and hyperbolic partial differential equations, *Math. Comp.*, **55** (1990), pp. 563-579.
- [25] Rosean, J. S. - Multistep Runge-Kutta methods, *NASA TND* - 400, 1968.
- [26] Tracogna, S. - Implementation of two-step Runge-Kutta methods for ordinary differential equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **76** (1996), pp. 113-136.



