

Vanessa Facina

Uma Classe de Métodos de Runge - Kutta de Passo dois para Integração a Passo Variável

**UMA CLASSE DE MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA
DE PASSO DOIS PARA INTEGRAÇÃO
A PASSO VARIÁVEL**

VANESSA FACINA

**Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada
MAP-039**



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

São José do Rio Preto, fevereiro de 1999.

**UMA CLASSE DE MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA
DE PASSO DOIS PARA INTEGRAÇÃO
A PASSO VARIÁVEL**

Vanessa Facina

Orientador: Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins



858/99

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, para a obtenção
do título de mestre em Matemática Aplicada.

São José do Rio Preto, fevereiro de 1999.

Agradecimentos

Ao professor Sebastião Pereira Martins pela paciência, dedicação e orientação durante todo o desenvolvimento deste trabalho, contribuindo de forma essencial para a minha formação.

Aos meus pais e irmãos, por sempre estarem ao meu lado na realização deste trabalho, nestas horas em que mais preciso deles distantes, pela compreensão quando distando-me de forma impregnando aos estudos e pelo apoio financeiro indispensável.

Ao meu noivo e amigo do curso de medicina, João Alexandre, que sempre esteve ao meu lado, apoiando-me nas horas mais difíceis, sem o qual a conclusão deste trabalho não seria possível.

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

Aos colegas de pós-graduação e amigos, pela amizade e incentivo no processo de elaboração deste trabalho.

A CAPES pelo concessão do programa de mestrado em Educação, possibilitando a realização deste trabalho.

A Deus, por estar sempre presente.

A meus pais e irmãos,
ao meu noivo,
por todo o apoio,
dedico.

Agradecimentos

Ao professor Sebastião Pereira Martins pela paciência, dedicação e orientação durante todo o desenvolvimento deste trabalho, contribuindo de forma especial para a minha formação.

Aos meus pais e irmãos, por sempre acreditarem na realização deste trabalho, mesmo nas horas em que meus ideais pareciam mais distantes, pela compreensão quando distanciei-me da família apegando-me aos estudos e pelo apoio financeiro indispensável.

Ao meu noivo e amigo do curso de mestrado, João Alexandre, que sempre esteve ao meu lado, apoiando-me nas horas mais difíceis, sem o qual a conclusão deste trabalho não seria possível.

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

Aos colegas da pós-graduação e amigos, pela amizade e incentivo no período de elaboração deste trabalho.

À CAPES que contribuiu com o programa de mestrado em Matemática Aplicada contribuindo com a realização deste trabalho.

A Deus, por estar sempre presente.



Resumo

O objetivo principal deste trabalho é apresentar algumas classes de métodos de Runge-Kutta de passo dois explícitos. Em especial, a proposta por Jackiewicz e Zennaro, que permite trabalhar com integração a passo variável para resolução numérica de problemas de valor inicial. Para tal classe, desenvolveremos as etapas necessárias para a obtenção das condições de ordem.

Em seguida, serão construídos pares embutidos, constituídos por um método desta classe de ordem $p + 1$ e um de Runge-Kutta com extensão contínua de ordem p . Finalmente os resultados de alguns experimentos numéricos serão apresentados, a partir dos quais desenvolveremos comparações com relação ao esforço computacional, entre esses métodos e os métodos de Runge-Kutta, em particular o método de Fehlberg.



Índice

Introdução	01
------------	----

Métodos de Runge-Kutta

1.1 Introdução	02
1.2 A classe dos métodos de Runge-Kutta	04
1.3 Métodos de Runge-Kutta embutidos	06
1.4 Métodos de Runge-Kutta	07

Abstract

The main objective of this paper is to present some classes of explicit two step Runge-Kutta methods. Especially, that proposed by Jackiewicz and Zennaro, which allows to work with integration with variable step for numeric resolution of initial value problems. For such class, we will develop the necessary stages for obtaining the order conditions.

Also, embedded pairs will be built, constituted by a method of the above mentioned class of order $p + 1$ and one of Runge-Kutta with continuous extension of order p . Finally, the results of some numerical experiments will be presented. Using these results we will develop comparisons with respect to the computational effort, between those methods and the Runge-Kutta methods, in particular the Fehlberg method.

3.2 Estrutura de teste dos parâmetros	17
3.3 A execução dos cálculos de integração e de teste	22
3.4 As condições de ordem para os métodos de Runge-Kutta	25

Uma classe de métodos TSPH com passo de integração variável

4.1 Introdução	29
4.2 Preliminares	30
4.3 A classe dos métodos TSPH	34
4.4 Alguns exemplos de métodos da classe TSPH	37

Índice

Introdução	01
-------------------	----

1 Métodos de Runge-Kutta	
1.1 Introdução	03
1.2 A classe dos métodos de Runge-Kutta.....	04
1.3 Métodos de Runge-Kutta embutidos	06
1.4 Métodos de Runge-Kutta com extensão contínua	07

2 O Controle do erro e do passo dos métodos de Runge-Kutta	
2.1 Introdução	10
2.2 Erro de truncamento local e ordem de consistência.....	11
2.3 Estratégia para o controle do erro de truncamento.....	12
2.4 O controle do tamanho do passo.....	13

3 As condições de ordem para os métodos de Runge-Kutta	
3.1 Introdução	16
3.2 Elementos da teoria dos grafos.....	17
3.3 A associação das diferenciais elementares a árvores.....	22
3.4 As condições de ordem a partir de árvores nos métodos de Runge-Kutta ...	25

4 Uma classe de métodos TSRK com passo de integração variável	
4.1 Introdução	29
4.2 Preliminares	30
4.3 A classe dos métodos.....	31
4.4 Algumas características dessa classe de métodos	32

5 As condições de ordem dos métodos TSRK

5.1	Introdução	35
5.2	Preliminares.....	36
5.3	Obtenção dos pesos $\bar{\psi}^v(t_j)$ e $\bar{\psi}^w(t_j)$	37
5.4	Construção das condições de ordem.....	46

6 Construção do par de métodos RK e TSRK embutidos

6.1	Introdução	54
6.2	O par de métodos embutidos (Runge-Kutta e TSRK).....	55
6.3	Construção do par embutido.....	57
6.4	Construção de um particular par embutido.....	67

7 Avaliação computacional

7.1	Introdução	70
7.2	O método avaliado.....	71
7.3	As estratégias de controle do passo.....	72
7.4	Comparação entre os pares TSRK e RKF45.....	75
7.5	Resolução de problemas com saída densa.....	81

Considerações finais	84
-----------------------------	----

Referências bibliográficas	86
-----------------------------------	----

INTRODUÇÃO

A necessidade de se obter aproximações para a solução de um problema de valor inicial (pvi), cuja solução exata não é determinável analiticamente, tem estimulado a busca de métodos que permitem gerar, com o menor esforço computacional possível, aproximações com a precisão desejada.

O mais antigo método numérico utilizado para tal é o método de Euler, que durante muito tempo foi considerado uma ferramenta útil, mas que hoje se tem como um método computacionalmente muito fácil de ser utilizado, porém de baixa precisão.

Considerando como motivação os métodos de Euler, surgiram em 1895 os métodos de Runge-Kutta, propostos por C. Runge e desenvolvidos por K. Heun (1900) e W. Kutta (1901). Estes métodos constituem-se hoje numa importante e eficiente classe de métodos numéricos, na busca de uma aproximação para a solução exata de um pvi.

Desde então, novos métodos para a resolução numérica de problemas de valor inicial, que apresentam características semelhantes à classe dos métodos de Runge-Kutta têm sido investigados, dentre os quais podemos destacar os denominados métodos de Runge-Kutta de passo dois (TSRK).

Uma formalização interessante dessa classe de métodos foi dada por Byrne e Lambert [04] em 1966 que inicialmente eram denominados de Pseudo Runge-Kutta. Outras contribuições nessa classe de métodos são devidas a Nakashima [12], [13] e [14].

Tais métodos embora sendo de passo dois não pertencem à classe dos métodos lineares de passo múltiplo. No entanto, apresentam uma característica básica dos métodos da classe de Runge-Kutta, pois consideram combinações das derivadas em pontos internos ao passo de integração, estando aí a grande semelhança entre eles.

O objetivo principal deste trabalho é apresentar uma outra classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois, para a resolução de problemas não-stiff, propostos por Jackiewicz e Zennaro [09] em 1992, que permite trabalhar com integração a passo variável.

Organizamos este trabalho em capítulos, sendo que no primeiro capítulo apresentaremos de forma resumida os métodos de Runge-Kutta explícitos e em especial quando se consideram pares embutidos, que permitem estimar de forma eficiente o erro de



truncamento local. Também apresentaremos os denominados métodos de Runge-Kutta com extensão contínua, muito interessantes para a integração de problemas com saída densa.

No capítulo 2, apresentaremos uma estratégia para o controle do erro de truncamento local e ferramentas para controle do tamanho do passo quando, trabalhamos com integração a passo variável.

Vamos construir no capítulo 3, as condições de ordem para a classe dos métodos de Runge-Kutta. Para isso procuramos apresentar alguns conceitos e resultados desenvolvidos por Butcher [02], que associam árvores orientadas com raiz às diferenciais elementares de uma função.

Introduziremos no capítulo 4 a classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois explícitos, proposta por Jackiewicz e Zennaro [09] e no capítulo 5 desenvolveremos os passos necessários para a construção das condições de ordem desses métodos.

Explorando a idéia dos pares de métodos de Runge-Kutta embutidos, no capítulo 6, apresentaremos novas classes de pares embutidos, propostas por Jackiewicz e Zennaro [09], constituídos por um método de Runge-Kutta contínuo com ordem p e um TSRK com ordem $p + 1$. Também mostraremos como construir estes pares de métodos.

Finalmente, no capítulo 7 apresentaremos algumas avaliações computacionais quando comparamos o par de métodos TSRK apresentado no capítulo 6 e o par RKF45. Também mostraremos a vantagem de se trabalhar com métodos da classe dos TSRK embutidos para a resolução de problemas com saída densa.

A fim de tornarmos mais simples o entendimento do conteúdo exposto, procuramos desenvolver nosso trabalho da forma mais organizada e detalhada possível, usando uma linguagem única para os diversos assuntos estudados.

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

1.1 Introdução

A classe de métodos de Runge-Kutta, tem se caracterizado como uma ferramenta importante e muito utilizada para a resolução numérica de problemas de valor inicial (pvi), neste capítulo introduziremos essa classe de métodos.

Para pvi's não-stiff os métodos de Runge-Kutta explícitos são aplicados com êxito, em especial quando se consideram pares embutidos, que permitem estimar de forma eficiente o erro da aproximação. Tais métodos e os denominados métodos de Runge-Kutta com extensão contínua serão também discutidos neste capítulo.

1.2 A classe dos métodos de Runge-Kutta

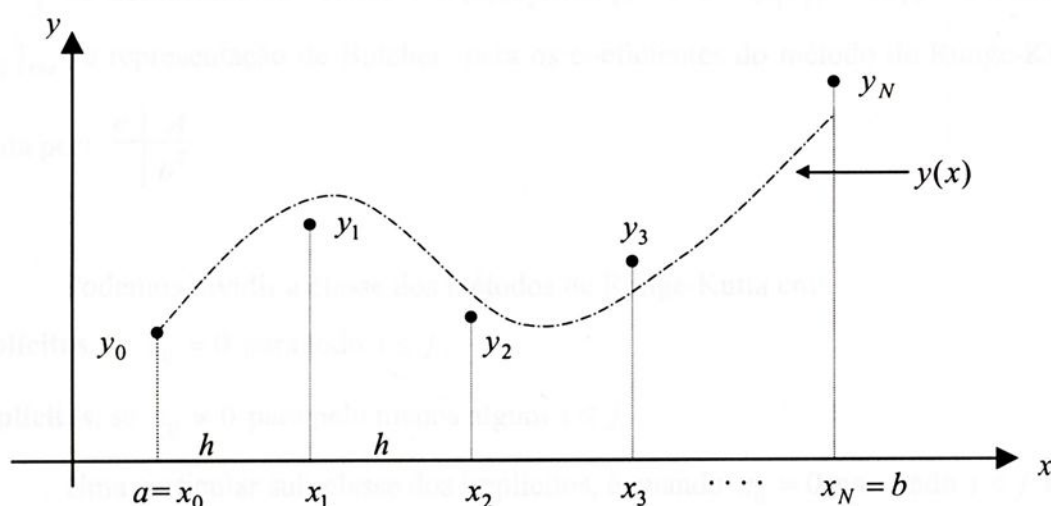
Seja o problema de valor inicial (pvi) dado por:

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0\end{aligned}\tag{1.1}$$

onde $f : [a, b] \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, tal que por hipótese assumimos garantida a existência e unicidade da solução $y(x)$.

Apenas para simplificar as notações, mas sem perda de generalidade para os resultados teóricos que serão apresentados, vamos assumir daqui em diante que $f : [a, b] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Afim de utilizar métodos numéricos para a resolução desses problemas, vamos considerar a discretização do intervalo $[a, b]$ em pontos $x_n = x_0 + nh$ para $n = 1, 2, \dots, N$, onde $x_0 = a$ e o parâmetro h é um número positivo identificado como o tamanho do passo de integração. Denotaremos por y_n à aproximação para a solução exata $y(x_n)$, obtida através de métodos numéricos, por exemplo, os métodos de Runge-Kutta. Vejamos a ilustração:



Definição 1.1: Denomina-se método de **Runge-Kutta** com s estágios o algoritmo numérico, definido por:

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

onde

$$k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (1.2b)$$

com os valores c_i 's assumindo à seguinte condição:

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1(1)s.$$

Os valores constantes a_{ij} , c_i , b_i são denominados coeficientes do método e podem ser representados através da matriz de Butcher, que apresentamos a seguir:

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array}$$

Se definirmos os vetores $c = (c_1, c_2, \dots, c_s)^T$ e $b = (b_1, b_2, \dots, b_s)^T$ e a matriz $A = [a_{ij}]_{s \times s}$, a representação de Butcher para os coeficientes do método de Runge-Kutta será dada por:

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$$

Podemos dividir a classe dos métodos de Runge-Kutta em:

- **explícitos**, se $a_{ij} = 0$ para todo $i \leq j$;
- **implícitos**, se $a_{ij} \neq 0$ para pelo menos algum $i \leq j$.

Uma particular sub-classe dos implícitos, é quando $a_{ij} = 0$ para todo $i < j$ mas existe pelo menos um coeficiente $a_{ii} \neq 0$. Os métodos dessa sub-classe são conhecidos como **semi-implícitos**.

Resumindo, os métodos de Runge-Kutta são:

- explícitos $\Leftrightarrow A$ é estritamente triangular inferior
- semi-implícitos $\Leftrightarrow A$ é triangular inferior
- implícitos $\Leftrightarrow A$ não é triangular.

Daqui em diante, vamos considerar somente a classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos, pois estamos interessados em trabalhar apenas com a resolução de problemas não-stiff.

É importante observar que esses métodos definidos por (1.2) são de passo um, pois será necessária apenas uma condição inicial y_0 para inicializar o processo de integração, ou seja, a cada passo de integração será necessária somente a aproximação calculada no passo anterior.

1.3 Métodos de Runge-Kutta embutidos

Um par de métodos de Runge-Kutta explícitos são ditos embutidos quando tem em comum o vetor c e a matriz A e podem ser representados através da matriz de Butcher da seguinte maneira:

0							
c_2		a_{21}					
c_3		a_{31}	a_{32}				
$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$				
c_s		a_{s1}	a_{s2}	a_{s3}	$\cdots$	$a_{s,s-1}$	
		b_1	b_2	b_3	$\cdots$	b_{s-1}	b_s
		b_1^*	b_2^*	b_3^*	$\cdots$	b_{s-1}^*	b_s^*

(1.3)

ou seja,

c		A
		b^T
		$(b^*)^T$

onde:

- c , A e b^T definem o método de ordem p ;
- c , A e $(b^*)^T$ definem o método de ordem $p+1$.

Dentre os métodos embutidos, um par bastante utilizado é o denominado RKF45 proposto por Fehlberg em [05] e [06], com $s = 6$ estágios e ordens $p = 4$ e $p + 1 = 5$ respectivamente, que tem como coeficientes:

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

(1.4)

Como veremos no capítulo 2, a utilização de métodos embutidos tornou-se uma ferramenta eficiente quando trabalhamos com integração com tamanho do passo variável.

1.4 Métodos de Runge-Kutta com extensão contínua

Na classe dos método de Runge-Kutta torna-se interessante considerar métodos que tem os coeficientes b_i 's, $i = 1(1)s$, expressados em função de um parâmetro. Tais métodos são denominados métodos de Runge-Kutta com extensão contínua e são definidos por:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i(\eta) k_i$$

(1.5a)

onde

$$k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), \quad i = 1, 2, \dots, s$$

(1.5b)

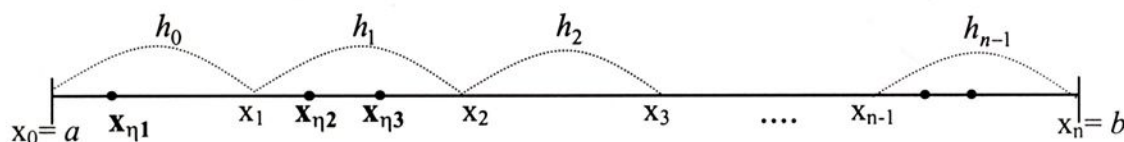
Da mesma forma que nos métodos de Runge-Kutta definidos em (1.2), podemos representar os coeficientes que caracterizam esta classe de métodos através da seguinte matriz de Butcher:

$c_1 = 0$					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$		
c_s	a_{s1}	a_{s2}	$\cdots$	$a_{s,s-1}$	
	$b_1(\eta)$	$b_2(\eta)$	$\cdots$	$b_{s-1}(\eta)$	$b_s(\eta)$

onde a_{ij} , c_i , são constantes, com $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$, $i = 1(1)s$ e $b_i(\eta)$ são os pesos contínuos do método, que dependem de η .

Estes métodos são construídos de forma a permitir calcular aproximações em pontos internos aos dois últimos onde a integração se realizou sem nenhum custo adicional quanto ao número de avaliações da derivada. Zennaro apresenta em [20] uma classe de métodos de Runge-Kutta com extensão contínua. No capítulo 6 deste trabalho utilizaremos métodos com extensão contínua associados a métodos de Runge-Kutta de passo dois.

Ilustrando, suponhamos que vamos resolver numericamente um pvi num certo intervalo $[a, b]$, onde se deseja obter uma aproximação em vários pontos $x_{\eta 1}, x_{\eta 2}, x_{\eta 3}, \dots$ internos ao passo de integração.



Após um passo inicial, de tamanho h_0 obtém-se uma aproximação no ponto x_1 . Caso a aproximação aí obtida tenha alcançado a precisão desejada verifica-se se $x_1 > x_{\eta 1}$. Caso afirmativo calcula-se o valor de η_1 :

$$x_{\eta 1} = x_0 + \eta_1 h_0 \Rightarrow x_{\eta 1} = x_0 + \eta_1 (x_1 - x_0) \Rightarrow \eta_1 = \frac{x_{\eta 1} - x_0}{x_1 - x_0}$$

e em seguida calculam-se:

- os pesos $b_i(\eta_1)$, $i = 1(1)s$
- $y_{\eta 1} = y_0 + h_0 \sum_{i=1}^s b_i(\eta_1) k_i$

Assim, geramos uma aproximação no ponto x_{η_1} desejado sem nenhuma avaliação adicional das derivadas k_i 's, pois estas já haviam sido calculadas para se obter y_1 .

Se outros valores x_{η_i} estiverem entre x_0 e x_1 o processo se repete determinando-se as respectivas aproximações y_{η_i} , caso contrario prossegue-se a integração a partir do ponto x_1 e efetua-se o processo descrito acima para cada ponto x_{η_i} em que se deseja obter uma aproximação.

Essa classe de métodos tem um importante valor prático, como ferramenta para resolver problemas com saída densa, isto é, quando a aproximação para a solução deve ser obtida em vários pontos muito próximos no intervalo de integração.

2.1 Introdução

Uma vez que os métodos de Runge-Kutta são uma ferramenta bastante interessante para a integração de problemas de valor inicial, neste capítulo apresentamos uma revisão dos métodos de Runge-Kutta e discutimos as vantagens e desvantagens de cada um deles. Também apresentamos alguns exemplos de aplicação dos métodos de Runge-Kutta para a solução de problemas de valor inicial.

O CONTROLE DO ERRO E DO PASSO NOS MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

Definição 2.1 – O erro de truncamento local de um método de Runge-Kutta aplicado a um problema de valor inicial $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$, é dado por

$$e_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1} \quad (2.1)$$

onde $y(x_{n+1})$ é a solução exata obtida utilizando-se a solução exata $y(x_n)$ em lugar de y_n .

Se regularmente a aplicação de um método de Runge-Kutta sob a hipótese local $y_n = y(x_n)$ é substituída por y_{n+1} , a aproximação global produzida é que

$$y_{n+1} = y(x_{n+1}) + e_{n+1} \quad (2.2)$$

Logo, o erro de truncamento local é a diferença entre a solução exata e a solução produzida pelo método de Runge-Kutta.

2.1 Introdução

Como vimos no capítulo anterior, a classe dos métodos de Runge-Kutta é uma ferramenta numérica interessante para a integração de problemas de valor inicial. Neste capítulo apresentaremos para essa classe de métodos uma estratégia para o controle do erro de truncamento local e ferramentas para o controle do tamanho do passo quando trabalhamos com integração a passo variável.

2.2 Erro de truncamento local e ordem de consistência

Sob o ponto de vista prático, torna-se importante não apenas gerar a aproximação para a solução exata nos pontos desejados, mas principalmente a possibilidade de se avaliar a qualidade dessa aproximação. Para isso, o conceito que introduzimos a seguir desempenha um papel fundamental.

Definição 2.1 – 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:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \left[y(x_n) + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \right] \quad (2.1)$$

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

Se considerarmos a aplicação de um método de Runge-Kutta sob a hipótese local $y_n = y(x_n)$ e anotarmos por $\tilde{y}_{n+1}$ à aproximação obtida, podemos constatar que:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1}. \quad (2.2)$$

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

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

$$T_{n+1} = U_1 h + U_2 h^2 + U_3 h^3 + \dots + U_{p+1} h^{p+1} + \dots \quad (2.3)$$

onde os U_i 's são constituídos por produtos de expressões que envolvem os coeficientes do método e derivadas parciais da função $f(x, y)$.

Definição 2.2 - Dizemos que o método de Runge-Kutta tem **ordem de consistência** p se sob a hipótese local $y_n = y(x_n)$ obtivermos que $T_{n+1} = O(h^{p+1})$.

Isto é, independente do problema de valor inicial, devemos ter

$$U_1 = U_2 = U_3 = \dots = U_p = 0.$$

No entanto, para que tenhamos $U_i = 0$ para $i = 1(1)p$, é preciso que neles as expressões que envolvem os coeficientes do método sejam nulas. Isto irá gerar as denominadas **condições de ordem**, as quais os coeficientes do método deverão satisfazer para que este tenha ordem de consistência p .

2.3 Estratégia para controle do erro de truncamento

Analisando a expressão (2.2) percebemos que teoricamente estimar o erro de truncamento local é muito simples, mas quando integramos um problema de valor inicial numericamente não podemos estimar o erro da mesma maneira, pois não temos a solução exata.

Consequentemente precisamos de alguma estratégia que nos forneça uma estimativa para o erro de truncamento local sem precisarmos da solução exata do problema. Encontramos na literatura diversas técnicas. Uma delas, bastante eficiente, é a que trabalha com dois métodos de Runge-Kutta.

Basicamente, considera-se um método com s_0 estágios e ordem p , gerando uma aproximação y_{n+1} e outro método com ordem $p+1$ e s_1 estágios ($s_0 < s_1$), gerando uma aproximação y_{n+1}^* .

Assim, o erro de truncamento local de cada um desses dois métodos será respectivamente:

$$T_{n+1} = \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

$$T_{n+1}^* = \varphi^*(x_n, y(x_n))h^{p+2} + O(h^{p+3})$$

Portanto:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^* - y_{n+1} &= T_{n+1} - T_{n+1}^* = \\ &= \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2}) - \varphi^*(x_n, y(x_n))h^{p+2} + O(h^{p+3}) = \\ &= \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2}) \end{aligned}$$

Consequentemente podemos considerar $\|y_{n+1} - y_{n+1}^*\|$ como uma estimativa para a parte principal $\varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1}$ do erro de truncamento local da aproximação gerada através do método de ordem p . Isto é:

$$T_{n+1} \cong \|y_{n+1} - y_{n+1}^*\| \quad (2.4)$$

O único problema dessa técnica é que ela exige a cada passo de integração $s_0 + s_1$ avaliações da função $f(x, y)$ do pvi.

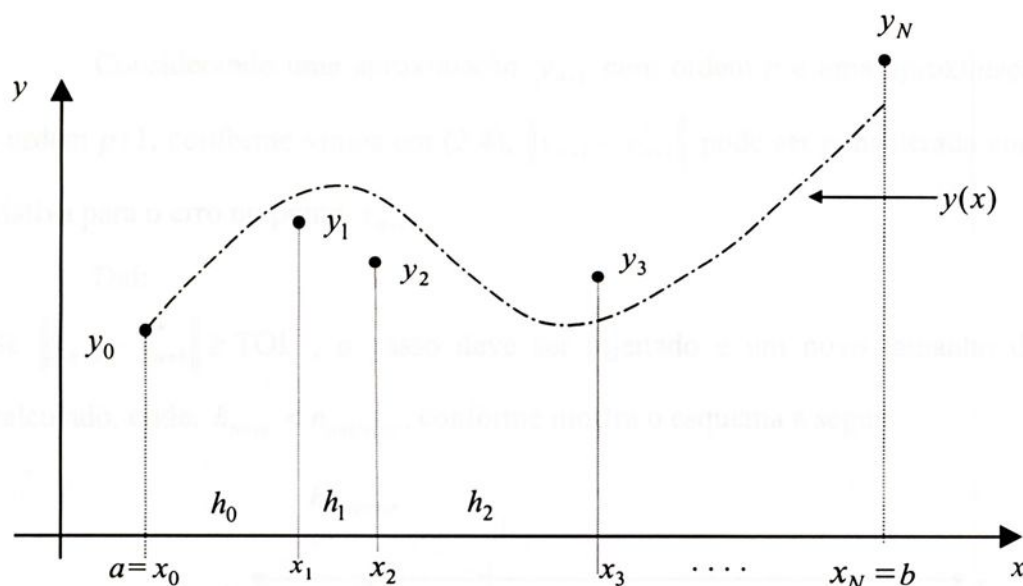
No entanto, se as derivadas calculadas para o método de ordem menor puderem ser utilizadas também para o método de ordem maior, é possível minimizar bastante o esforço computacional, realizando apenas $s_0 + (s_1 - s_0) = s_1$ avaliações a cada passo. Ou seja, o par de métodos considerado for do tipo denominado embutido, que apresentamos no capítulo anterior na seção 1.3.

2.4 O controle do tamanho do passo

Como vimos no parágrafo anterior, utilizando-se pares embutidos podemos a cada passo estimar o erro de truncamento local com um esforço computacional mínimo, logo é possível trabalhar com integração a passo variável, ou seja, integrando num intervalo $[a, b]$ o mesmo vai sendo discretizado à medida que o passo de integração avança. Isto é, podemos considerar a cada integração um tamanho h_n diferente para o passo, o que possibilita trabalhar com um “passo de tamanho ótimo” a cada integração.

Isto é, para $x_0 = a$ e dado um passo inicial de tamanho h_0 , temos que $x_{n+1} = x_n + h_n$ com $h_n = \alpha_{n-1} h_{n-1}$, para $n = 1, 2, \dots$. Conforme a ilustração a seguir:





Os valores α_i 's, serão sempre positivos e maiores ou iguais a 1 para o passo seguinte se a estimativa do erro no ponto for menor ou igual que a precisão desejada. Caso contrário o passo será rejeitado e um novo α_i , agora menor do que 1, será considerado para uma nova integração no ponto. Logo, podemos imaginar a eficácia de se trabalhar com métodos embutidos, quando consideramos o tamanho do passo de integração variável, pois é possível calcular uma estimativa para o erro com um esforço computacional mínimo a cada passo.

Iniciamos a integração considerando um passo inicial de tamanho h_0 , com o qual geramos a aproximação y_1 num ponto $x_1 = x_0 + h_0$. De acordo com a estimativa obtida nesse ponto para o erro de truncamento local consideramos ou não aceito o passo dado com tamanho h_0 .

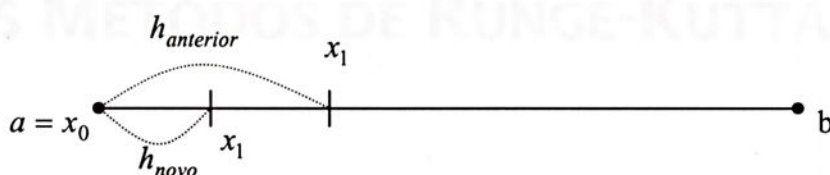
Na hipótese da não aceitação devemos efetuar a escolha de um novo h_0 e repetir o processo, caso contrário a integração prossegue utilizando um novo tamanho de passo h_1 . Esse novo passo deve ser maior ou não que o anterior, dependendo da relação entre a estimativa encontrada para o erro em x_1 e a precisão desejada (TOL) para a aproximação neste ponto.

Deve-se ter como objetivo trabalhar com um passo de "tamanho ótimo" a cada integração, pois assim tentaremos minimizar o esforço computacional de todo o processo, o que é importante para problemas de dimensão elevada. Resumindo, devemos ter uma boa estimativa para o erro de truncamento local e considerar uma estratégia eficiente de avaliação do crescimento ou não do passo dado.

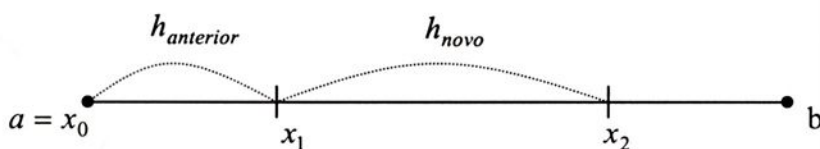
Considerando uma aproximação y_{n+1} com ordem p e uma aproximação y_{n+1}^* com ordem $p+1$, conforme vimos em (2.4), $\|y_{n+1} - y_{n+1}^*\|$ pode ser considerada como uma estimativa para o erro no ponto x_{n+1} .

Dáí:

- Se $\|y_{n+1} - y_{n+1}^*\| \geq \text{TOL}$, o passo deve ser rejeitado e um novo tamanho deve ser calculado, onde, $h_{\text{novo}} < h_{\text{anterior}}$, conforme mostra o esquema a seguir:



- Se $\|y_{n+1} - y_{n+1}^*\| < \text{TOL}$, o passo é aceito e o próximo passo deve ser dado com $h_{\text{novo}} \geq h_{\text{anterior}}$. Isto é:



Shampine e outros [17] e [18] implementaram o par embutido construído por Fehlberg, que apresentamos no capítulo anterior, gerando o código conhecido por RKF45. Nele, o aumento do tamanho do passo é função direta da relação entre a estimativa para o erro dada por $\|y_{n+1} - y_{n+1}^*\|$ e TOL, a precisão desejada pelo usuário.

Na literatura encontramos outras estratégias para o controle do tamanho do passo, uma bastante utilizada é a que considera:

$$\left[\begin{array}{ll} \text{quando o passo é rejeitado} & \rightarrow h_{\text{novo}} = 0.5 \times h_{\text{anterior}} \\ \text{quando o passo é aceito} & \rightarrow h_{\text{novo}} = 2.0 \times h_{\text{anterior}} \end{array} \right.$$

Uma outra estratégia para o controle do tamanho do passo, considerada por nós neste trabalho apenas como ilustração, é dada por:

$$\left[\begin{array}{ll} \text{quando o passo é rejeitado} & \rightarrow h_{\text{novo}} = 0.1 \times h_{\text{anterior}} \\ \text{quando o passo é aceito} & \rightarrow h_{\text{novo}} = 2.0 \times h_{\text{anterior}} \end{array} \right.$$

Essas estratégias serão por nós avaliadas no capítulo 7.

AS CONDIÇÕES DE ORDEM PARA OS MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA



figura 1

Definição 3.1: Dois grafos (V, E) e (V', E') são ditos isomorfos se existe uma bijecção $\phi: V \rightarrow V'$, tal que, para quaisquer $u, v \in V$, u está conectado a v se e somente se $\phi(u)$ está conectado a $\phi(v)$.

Definição 3.2: Um grafo (V, E) é orientado se for constituído por um conjunto V de vértices e um conjunto E de pares ordenados de elementos de V . Os elementos de E são designados por arestas do grafo.

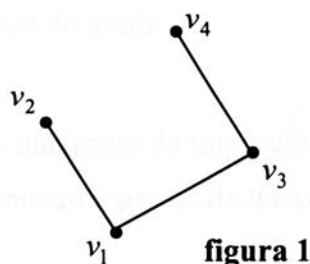
Algumas Observações

3.1 Introdução

Neste capítulo procuramos apresentar alguns conceitos e resultados da teoria dos grafos, em especial os relacionados às árvores orientadas com raiz. A partir deles, será possível mostrar uma associação destas árvores com as diferenciais elementares de uma função, desenvolvida por Butcher [02], e assim construir as condições de ordem para a classe dos métodos de Runge-Kutta.

3.2 Elementos da teoria dos grafos

Um grafo $G=(V,E)$ consiste de um conjunto de elementos finitos $V = \{v_1, v_2, \dots, v_s\}$, denominado conjunto de vértices e de um conjunto $E = \{\{v_1, v_2\}, \dots, \{v_i, v_j\}\}$ formado por pares de elementos distintos de V , chamado de conjunto de arestas. Podemos representar um grafo através de um diagrama, assim, para ilustrar, consideremos o grafo $G=(V,E)$ formado por $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$ e $E = \{\{v_1, v_2\}, \{v_1, v_3\}, \{v_3, v_4\}\}$. Sua representação através de um diagrama pode ser:



Definição 3.1: Dois grafos (V,E) e (V',E') são ditos **isomorfos** se existe uma bijeção $\phi: V \rightarrow V'$, tal que, para quaisquer $x, y \in V$, o par $\{x, y\} \in E$ se e somente se $\{\phi(x), \phi(y)\} \in E'$.

Definição 3.2: Um grafo (V,E) é **orientado** se for constituído por um conjunto V de vértices e um conjunto E de pares ordenados de elementos de V . Os elementos de E são denominados arcos do grafo.

Algumas Observações:

- Seja $\{x, y\}$ um par de vértices de um grafo, podemos dizer que $\{x, y\}$ é um **arco** se, y é sucessor de x e x é o predecessor de y , assim está excluída a possibilidade do arco começar e terminar num mesmo vértice.
- Se os elementos de V estiverem totalmente ordenados, então o grafo orientado estará também **ordenado**, ou seja, se $\{x_1, x_2\}$ é um arco qualquer do grafo então $x_1 < x_2$.

- Um resultado importante para a teoria proposta por Butcher, encontrado na pág. 83 de [02], é que um grafo orientado é **ordenado** se ele não possuir ciclos (sequência de arcos que começa e termina num mesmo vértice).

Definição 3.3: Um grafo orientado é **injetivo** se cada vértice não possui mais do que um predecessor.

Definição 3.4: Dois vértices x_1 e x_2 de um grafo são ditos **conectados a partir de baixo** se existir um caminho de x_1 para x_2 , ou de x_2 para x_1 , ou então de x_0 para x_1 e de x_0 para x_2 , onde x_0 é um outro vértice do grafo.

Definição 3.5: Se dois vértices quaisquer de um grafo orientado são conectados a partir de baixo, dizemos que o grafo é **conexo a partir de baixo**.

Definição 3.6: **Caminho** é uma cadeia (sequência de vértices e arestas do grafo) com vértices e arestas distintas.

Definição 3.7: Dizemos que um grafo G é uma **árvore** se para cada par de vértices deste grafo existe um único caminho entre eles.

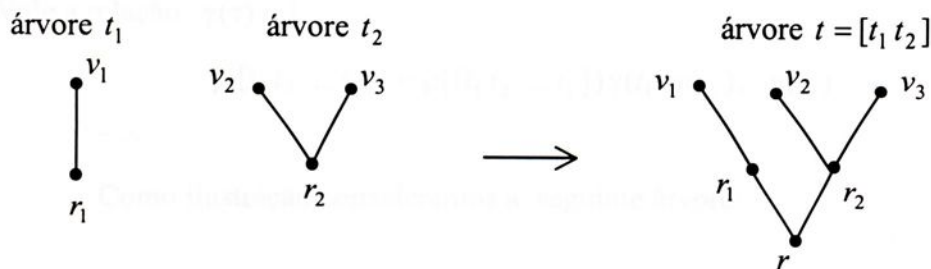
Definição 3.8: Denomina-se **árvore orientada** a todo grafo orientado que é ordenado, injetivo e conexo a partir de baixo. Ainda, o ínfimo do conjunto de todos os vértices denomina-se **raiz da árvore** orientada.

Daqui em diante, denominaremos simplesmente por **árvore** a toda árvore orientada, denotaremos por T ao conjunto de todas as árvores e por τ à árvore com apenas um vértice.

Para a definição de alguns conceitos, consideremos agora árvores de T que serão da forma descrita a seguir.

Sejam $t_1 = (V_1, E_1)$, $t_2 = (V_2, E_2)$, ..., $t_s = (V_s, E_s)$ árvores tais que $V_i \cap V_j = \emptyset$ para $i \neq j$, com $r_1, r_2, \dots, r_s$ suas respectivas raízes. Para $r \notin V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_s$, vamos considerar uma nova árvore $t = (V, E)$ obtida através da

reunião das árvores $t_1, t_2, \dots, t_s$, com r sendo sua raiz. Assim o conjunto de vértices desta nova árvore será $V = \{r\} \cup V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_s$ e o conjunto de arestas será $E = \{\{r, r_1\}, \{r, r_2\}, \dots, \{r, r_s\}\} \cup E_1 \cup E_2 \cup \dots \cup E_s$. Vejamos a ilustração.



Na representação $t = [t_1 t_2 \dots t_s]$ podemos ter árvores repetidas, como por exemplo, $t = [t_1 t_1 t_2 t_2 t_2]$, Butcher reescreve essa árvore como $t = [t_1^2 t_2^3]$.

Alguns Conceitos

- **Ordem** $\rho(t)$: denomina-se ordem o número de vértices de uma árvore t . Logo: $\rho(\tau) = 1$ e se $t = [t_1 t_2 \dots t_s]$ então $\rho(t) = 1 + \rho(t_1) + \dots + \rho(t_s)$
- **Altura** $H(t)$: é definida como sendo 1 mais o número de arcos do maior caminho possível na árvore. Logo $H(\tau) = 1$ e $H([t_1 t_2 \dots t_s]) = 1 + \max_i H(t_i)$
- **Largura** $w(t)$: definimos como largura de uma árvore o seu número de vértices terminais, isto é, os vértices que não possuem sucessor. Podemos definir, por conveniência, largura de τ como sendo 0 ou 1. Denotaremos a largura de τ por $w(\tau)$ quando esta for 0 e no segundo caso denotaremos por $\overline{w}(\tau)$.
Vale a relação: $w([t_1 t_2 \dots t_s]) = w(t_1) + w(t_2) + \dots + w(t_s)$
- **Densidade** $\gamma(t)$: O conceito de densidade é mais abstrato que os de largura e altura da árvore, porém podemos caracterizá-lo como uma medida do não espalhamento da árvore. A densidade pode ser calculada se associarmos aos vértices da árvore t números assim definidos: associamos aos vértices terminais o número 1 e aos demais vértices (a

partir dos terminais) o número $1 + i$, onde i é a soma dos números associados aos vértices que tem o vértice que se está numerando como predecessor nos arcos que os liga. Então, $\gamma(t)$ será o produto dos números inteiros associados aos vértices da árvore t .

Vale a relação: $\gamma(\tau) = 1$

$$\gamma([t_1 t_2 \dots t_s]) = \rho([t_1 t_2 \dots t_s]) \gamma(t_1) \gamma(t_2) \dots \gamma(t_s)$$

Como ilustração consideremos a seguinte árvore:

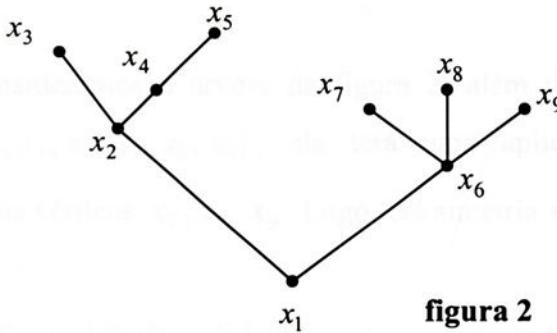


figura 2

Podemos então calcular a densidade associando aos vértices terminais x_3, x_5, x_7, x_8, x_9 o valor 1, ao vértice x_4 o valor $2=1+1$, aos vértices x_2 e x_6 o valor $4=1+3$ e ao vértice x_1 o valor $9=1+8$. Logo, $\gamma(t) = 9 \cdot 4 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 1 \cdot 4 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 = 288$

Observações:

- Se considerarmos uma árvore onde $H(t)=2$, encontramos em seu maior caminho apenas um arco, logo $\gamma(t) = \rho([t_1 t_2 \dots t_s])$. Como ilustração consideremos a árvore abaixo com $H(t)=2$:

$$\gamma(t) = 5 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 = 5 = \rho(t)$$

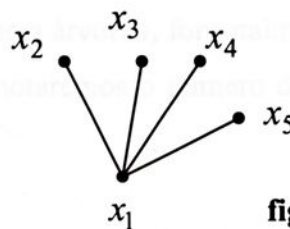


figura 3

- Se tomarmos uma árvore onde $H(t) = \rho(t)$ temos que ela terá um único caminho e portanto $\gamma(t) = \rho(t)!$. Assim, como exemplo, consideremos a árvore:

$$H(t) = 1 + 3 = 4 = \rho(t)$$

$$\gamma(t) = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 24 = 4! = \rho(t)!$$

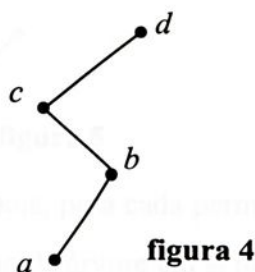


figura 4

Definição 3.9: Denominamos **grupo de simetria** de uma árvore ao grupo de isomorfismos da árvore nela própria. A ordem do grupo será a simetria da árvore, que representamos por σ .

Se consideramos a árvore da figura 2, além da aplicação identidade sobre $V = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9\}$, ela terá uma aplicação isomorfa para cada permutação entre os vértices x_7, x_8, x_9 . Logo terá simetria $\sigma = 3! = 6$

Teorema 3.1 : Se $t = [t_1^{n_1} t_2^{n_2} \dots t_s^{n_s}]$, com $t_1, t_2, \dots, t_s$ todas distintas, então, $\sigma(\tau) = 1$ e $\sigma(t) = n_1! n_2! \dots n_s! \sigma(t_1)^{n_1} \sigma(t_2)^{n_2} \dots \sigma(t_s)^{n_s}$.

Consideremos, a seguir, o número de maneiras em que uma árvore t pode ser rotulada com rótulos distintos. Vamos anotar por $\beta(t)$ a esse número quando a raiz não é rotulada, apenas os demais vértices o são, e anotamos por $\bar{\beta}(t)$ quando todos os vértices são rotulados.

Então vale:

$$\beta(t) = \frac{[\rho(t) - 1]!}{\sigma(t)} \quad \text{e} \quad \bar{\beta}(t) = \frac{\rho(t)!}{\sigma(t)}$$

Se o conjunto V , que define a árvore t , for totalmente ordenado, isto é, se (m, n) é um arco da árvore, então $m < n$, anotaremos o número de maneiras de rotular a árvore por $\alpha(t)$, e vale a relação:

$$\alpha(t) = \frac{\rho(t)!}{\gamma(t)\sigma(t)}$$

Para ilustrar, consideremos a árvore onde $\rho(t) = 5$ e $\gamma(t) = \rho(t)$, dada por:



figura 5

Temos que $\sigma(t) = 4! = 24$, pois, para cada permutação dos vértices da árvore (a menos da raiz), teremos um isomorfismo da árvore em si própria.

Se considerarmos que os elementos de V :

- não estão totalmente ordenados $\Rightarrow \beta(t) = \frac{[\rho(t)-1]!}{\sigma(t)} = \frac{4!}{24} = 1$ e $\bar{\beta}(t) = \frac{\rho(t)!}{\sigma(t)} = r(t) = 5$
- estão totalmente ordenados $\Rightarrow \alpha(t) = \frac{\rho(t)!}{\gamma(t)\sigma(t)} = \frac{5!}{5 \cdot 4!} = 1$

Consideremos uma outra ilustração onde t é a árvore formada por $t_1 = \tau$ e t_2 a árvore com apenas um arco:

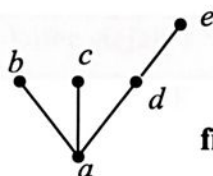


figura 6

Temos que $\rho(t) = 5$, $\gamma(t) = \gamma([t_1^2 t_2]) = \rho([t_1^2 t_2])\gamma(t_1)^2\gamma(t_2) = 5 \cdot 1 \cdot 2 = 10$ e $\sigma(t) = 2$.

Assim $\beta(t) = \frac{4!}{2} = 12$, $\bar{\beta}(t) = \frac{5!}{2} = 60$, e $\alpha(t) = \frac{5!}{10 \cdot 2} = 6$.

3.3 A associação das diferenciais elementares a árvores.

Consideremos um pvi tendo a equação diferencial escrita em sua forma autônoma, isto é:

$$Y'(x) = f(Y(x))$$

$$Y(a) = \eta$$

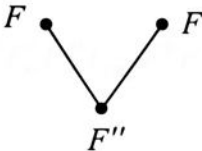
Para a construção dos métodos de Runge-Kutta utilizamos a expansão em série de Taylor de $Y(x)$, que envolve expressões das derivadas de f , denominadas diferenciais elementares.

Tais expressões podem ser convenientemente representadas por vetores F , $F'(F)$, etc.

Por exemplo:

- $Y''(x) = (f(Y(x)))' = f'(Y(x))(f(Y(x)))$, que pode ser representada por $Y'' = F'(F)$;
- $Y'''(x) = F''(F,F) + F'(F'(F))$ onde $F''(F,F) = f''(Y(x))(f(Y(x))Y'(x))$ e $F'(F'(F)) = f'(Y(x))(f'(Y(x))(Y'(x)))$

Através de uma forma bastante simples podemos associar a cada um desses vetores, que representam as diferenciais elementares de $f(Y(x))$, árvores conforme proposto por Butcher [02].

N ° de vértices	Diferenciais Elementares	Árvores
1	F	$F \bullet$
2	$F'(F)$	
3	$F''(F,F)$	
3	$F'(F'(F))$	

Definição 3.10: Dada uma árvore $T: A \rightarrow A$, a diferencial elementar $F^{(n)}$ é dada por:

Observe que Butcher associa o operador $F^{(n)}$ a um vértice tal que n arcos existam a partir dele, aos quais serão associados os n operadores sobre os quais $F^{(n)}$ atua. Em particular, $F^{(0)} = F$ corresponderá a vértices terminais.

Assim, para ilustrar podemos associar a diferencial elementar $F^{(2)}(F^{(2)}(F, F^{(1)}(F)), F^{(3)}(F, F, F))$ que ocorrerá em $Y^{(9)}(x)$ à árvore:

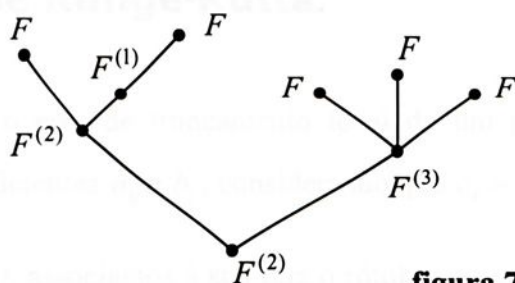


figura 7

Podemos também escrever esses vetores utilizando a notação das derivadas parciais. Assim, $F_{j_1 j_2 \dots j_n}^i = f_{j_1 j_2 \dots j_n}^i(Y(x))$ representa a derivada parcial de ordem n da i -ésima componente de F . Por exemplo:

$$(F)^i = F^i$$

$$(F'(F))^i = F_j^i F^j$$

$$(F''(F, F))^i = F_{jk}^i F^j F^k$$

$$(F'(F'(F)))^i = F_j^i F_k^j F^k$$

Logo, essa associação dos vetores pode ser feita através da regra: associamos o rótulo i à raiz da árvore e os demais aos outros vértices, tal que os índices inferiores de F sejam sucessores do índice superior de F em arcos da árvore.

Assim, associamos a diferencial elementar $F_{jn}^i F_{kl}^j F^k F_m^l F^m F_{opq}^n F^o F^p F^q$ à árvore:

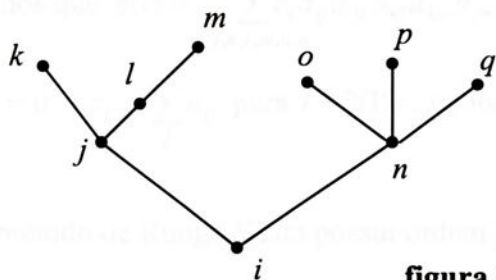


figura 8

Definição 3.10: Dada uma função $f: X \rightarrow X$, a diferencial elementar $F(t): X \rightarrow X$, correspondente à árvore com raiz t , é definida por:

$F(\tau)(Y) = f(Y)$, onde τ é uma árvore com um único vértice, e por:

$F(t)(Y) = f^{(s)}(Y)(F(t_1)(Y), F(t_2)(Y), \dots, F(t_s)(Y))$, onde $t = [t_1 t_2 \dots t_s]$ para todo $Y \in X$.

3.4 As condições de ordem a partir de árvores nos métodos de Runge-Kutta.

Sabemos que o erro de truncamento local de um método de Runge-Kutta explícito depende dos coeficientes a_{ij} e b_i , considerando que $c_i = \sum_j a_{ij}$.

Dada a árvore t , associamos à sua raiz o rótulo i e aos demais vértices, rótulos $j, k, \dots$. Formamos então os produtos $b_i \cdot a_{jk}$, onde o produto é efetuado sobre todos os pares de vértices (j, k) , tal que a árvore t possui um arco ligando j com k . Construídos esses produtos, efetuamos a soma dos mesmos sobre $i, j, k, \dots$, de 1 até o número s de estágios do método, lembrando que, para $j \leq k$, $a_{jk} = 0$.

Assim, construímos um polinômio nos coeficientes a_{ij} e b_i , que anotaremos por $\phi(t)$. Para ilustrar, consideremos a árvore t ,

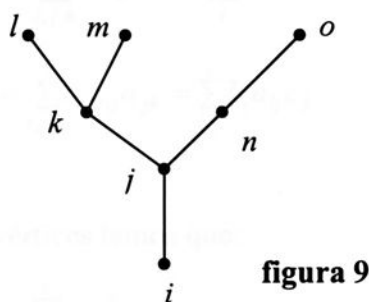


figura 9

$$\text{Logo, temos que } \phi(t) = \sum_{i,j,k,l,m,n,o} b_i a_{ij} a_{jk} a_{kl} a_{km} a_{jn} a_{no}$$

$$\text{Como } c_1 = 0 \text{ e } c_i = \sum_j a_{ij} \text{ para } i = 2(1)s, \text{ temos que: } \phi(t) = \sum_{i,j,k,n} b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 a_{jn} c_n$$

Teorema 3.2: Um método de Runge-Kutta possui ordem p se e somente se:

$$\phi(t) = \frac{1}{\gamma(t)}$$

para toda árvore t cujo número máximo de vértice é p .

Este teorema nos permite caracterizar, através da teoria dos grafos, as condições para que um método de Runge-Kutta explícito com s estágios tenha ordem p , isto é, suas condições de ordem.

De um modo geral, para construirmos as condições para um método com ordem p e s estágios basta aplicarmos o teorema 3.2 a todas as possíveis árvores com $1, 2, \dots, p$ vértices. Isto é, para cada uma delas construir $\phi(t)$ e determinar $\gamma(t)$. Como ilustração consideremos as condições para um método com ordem 4:

1) Para as árvores com um único vértice temos que :

$$\bullet_i \quad \gamma(t) = 1 \text{ e } \phi(t) = \sum_{i=1}^s b_i$$

2) Para a árvore formada por dois vértices:

$$\begin{array}{c} j \\ | \\ i \end{array} \quad \gamma(t) = 2 \text{ e } \phi(t) = \sum_{i,j} b_i a_{ij} = \sum_i b_i c_i$$

3) Para as árvores com 3 vértices temos que:

$$\begin{array}{c} j \quad k \\ \diagdown \quad \diagup \\ i \end{array} \quad \gamma(t) = 3 \text{ e } \phi(t) = \sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{ik} = \sum_i b_i c_i^2$$

$$\begin{array}{c} k \\ | \\ j \\ / \\ i \end{array} \quad \gamma(t) = 6 \text{ e } \phi(t) = \sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} = \sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j$$

4) Para as árvores formadas por 4 vértices temos que:

$$\begin{array}{c} k \quad j \quad l \\ \diagdown \quad | \quad \diagup \\ i \end{array} \quad \gamma(t) = 4 \text{ e } \phi(t) = \sum_i b_i c_i^3$$

$$\begin{array}{c} l \\ | \\ j \quad k \\ \diagdown \quad \diagup \\ i \end{array} \quad \gamma(t) = 8 \text{ e } \phi(t) = \sum_{i,k} b_i c_i a_{ik} c_k$$

$$\begin{array}{c} k \quad l \\ \diagdown \quad \diagup \\ j \\ | \\ i \end{array} \quad \gamma(t) = 12 \text{ e } \phi(t) = \sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j^2$$

$$\begin{array}{c} l \\ | \\ k \\ / \quad \backslash \\ j \quad i \end{array} \quad \gamma(t) = 24 \text{ e } \phi(t) = \sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} c_k$$

Se considerarmos as possíveis classes de árvores com raízes e cinco vértices a elas associando os respectivos polinômios $\phi(t)$ e a função densidade $\gamma(t)$, geramos as condições de ordem restantes, para a determinação dos métodos de Runge-Kutta com ordem 5. Raciocínio análogo nos leva às condições de ordem para métodos de ordem superior a cinco.

Assim, as condições de ordem que um método de Runge-Kutta deve satisfazer para $p=1,2,\dots,5$ estão listadas a seguir.

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

É importante observar que existe um resultado que relaciona o número mínimo de estágios para que se atinja uma certa ordem máxima p , conforme Lambert [10] e [11] ele é dado por:

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	$13 \leq s \leq 17$

4.1 Introdução

Uma classe de métodos de Runge-Kutta de passo único (TSRK) explícitos, propostos por Jackiewicz e Zangwill em [10], são conhecidos também como integração a passo variável por comparação com os métodos clássicos. Os métodos descritos são definidos de forma muito semelhante à dos de Runge-Kutta, com a diferença de que os TSRK necessitam de que os coeficientes sejam dados para que o processo de integração possa ser iniciado, isto é, não de passo zero.

UMA CLASSE DE MÉTODOS TSRK COM PASSO DE INTEGRAÇÃO VARIÁVEL

4.1 Introdução

Uma classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois (TSRK) explícitos, propostos por Jackiewicz e Zennaro em [09], que permitem trabalhar com integração a passo variável será considerada neste capítulo. Os métodos dessa classe são definidos de forma muito semelhante à dos de Runge-Kutta, com a diferença de que os TSRK necessitam de duas condições iniciais para que o processo de integração possa ser iniciado, isto é, são de passo dois.

4.2 Preliminares

Os métodos TSRK (Two Step Runge-Kutta), embora sendo de passo dois não pertencem à classe dos métodos lineares de passo múltiplo. No entanto, apresentam uma característica básica dos métodos da classe de Runge-Kutta, pois consideram combinações das derivadas em pontos internos ao passo de integração, estando aí a grande semelhança entre eles.

Os primeiros métodos TSRK, foram propostos por Byrne [03], e os primeiros estudos de tais métodos são devidos a Rosen [15]. Uma formalização interessante dessa classe de métodos foi dada por Byrne e Lambert [04] em 1966. Inicialmente, estes métodos eram denominados Pseudo Runge-Kutta.

A classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois explícitos com s -estágios proposta por Byrne e Lambert [04], é definida por:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s (v_i k_i^{n-1} + w_i k_i^n) \quad (4.1a)$$

onde

$$k_i^{n-1} = f(x_{n-1} + c_i h, y_{n-1} + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^{n-1}) \quad (4.1b)$$

$$k_i^n = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^n)$$

com os valores c_i 's assumindo à seguinte condição:

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1(1)s.$$

Esses métodos são caracterizados pelos coeficientes, c_i , a_{ij} , v_i e w_i .

Em 1982, Nakashima [12] propôs uma outra classe de métodos TSRK que possui $s-1$ estágios, e é dada pelo seguinte algoritmo:

$$y_{n+1} = r_1 y_{n-1} + r_2 y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad (4.2a)$$

onde

$$k_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1})$$

$$k_2 = f(x_n, y_n) \quad (4.2b)$$

$$k_i = f(x_n + c_i h, y_n + a_i(y_n - y_{n-1}) + h \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij} k_j)$$

$$\text{com } c_i = a_i + \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij}, \quad 0 < c_i \leq 1 \text{ e } i=3(1)s.$$

Os valores c_i , a_i , a_{ij} , b_i , r_1 e r_2 são os coeficientes do método.

No entanto, os métodos definidos por (4.1) e (4.2), quando considerados isoladamente, permitem somente trabalhar com o tamanho do passo de integração fixo.

A seguir introduziremos uma outra classe de métodos TSRK que permitem integrar pvi's considerando o passo de integração variável, o que os torna uma importante ferramenta computacional.

4.3 A classe dos métodos

Conforme proposto por Jackiewicz e Zennaro [09], em 1992, podemos considerar a classe de métodos de Runge-Kutta de passo dois explícitos com s estágios e passo de integração variável, definida do seguinte modo:

$$y_{n+1} = (1 - \xi\theta)y_n + \xi\theta y_{n-1} + h_{n-1} \sum_{i=1}^s (v_i k_i^{n-1} + \xi w_i k_i^n) \quad (4.3a)$$

onde

$$k_i^{n-1} = f(x_{n-1} + c_i h_{n-1}, y_{n-1} + h_{n-1} \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^{n-1}) \quad (4.3b)$$

$$k_i^n = f(x_n + c_i h_n, y_n + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^n)$$

para $i = 1(1)s$, $n = 0, 1, \dots, N$ com $\xi = h_n / h_{n-1}$ onde $h_n = x_{n+1} - x_n$.

Podemos representar os coeficientes que caracterizam esta classe de métodos numa forma matricial, semelhante à representação proposta por Butcher para os métodos de Runge-Kutta:

$c_1 = 0$					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$		
c_s	a_{s1}	a_{s2}	$\dots$	$a_{s,s-1}$	
θ	$v_1(\xi)$	$v_2(\xi)$	$\dots$	$v_{s-1}(\xi)$	$v_s(\xi)$
	$w_1(\xi)$	$w_2(\xi)$	$\dots$	$w_{s-1}(\xi)$	$w_s(\xi)$

onde θ, c_i e a_{ij} são constantes, com $c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}$ e observando que os pesos v_i e w_i dependem de $\xi = h_n / h_{n-1}$.

Se 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 $A = [a_{ij}]_{s \times s}$, a representação matricial para os coeficientes do método (4.3) será dada por:

c	A
θ	v^T
	w^T

4.4 Algumas características dessa classe de métodos

Os métodos da classe (4.3) são de passo dois, pois além da condição inicial y_0 necessitam também de outra condição y_1 para inicializar o processo de integração. Logo, podemos tomar como y_0 a condição inicial do problema e a segunda condição necessária para se iniciar a integração pode ser obtida através de um método auto-iniciável, por exemplo um método de Runge-Kutta com ordem apropriada.

Podemos observar que o método (4.3) é construído de tal forma que a cada passo são exigidas s novas avaliações da derivada da função f e não $2s$ como o algoritmo deixa transparecer. Isto é consequência do fato de que o método aproveita valores já calculados no passo anterior. Vejamos a ilustração.

Consideremos o problema de valor inicial (1.1), o qual resolveremos numericamente com o passo de integração variável de tamanho $h_n = x_{n+1} - x_n$, $n = 0, 1, \dots, N$ num certo intervalo $[a, b]$, onde $a = x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_N$, $x_N \geq b$, através do método (4.3) explícito com $s = 2$ estágios dado por:

$$y_{n+1} = y_n + h_{n-1}(v_1 k_1^{n-1} + v_2 k_2^{n-1}) + h_n(w_1 k_1^n + w_2 k_2^n)$$

onde

$$k_1^{n-1} = f(x_{n-1}, y_{n-1})$$

$$k_2^{n-1} = f(x_{n-1} + c_2 h_{n-1}, y_{n-1} + h_{n-1} a_{21} k_1^{n-1})$$

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

$$k_2^n = f(x_n + c_2 h_n, y_n + h_n a_{21} k_1^n)$$

1º passo : Através de um método auto iniciável qualquer com ordem apropriada obtemos a condição inicial necessária y_1 . Como ilustração, se considerarmos um método de Runge-Kutta com $s = 2$ estágios, conforme definido na seção 1.2, temos:

$$y_1 = y_0 + h_0(b_1 k_1 + b_2 k_2)$$

onde

$$k_1 = f(x_0, y_0)$$

$$k_2 = f(x_0 + c_2 h_0, y_0 + h_0 a_{21} k_1)$$

2º passo : Cálculo da aproximação y_2 , já utilizando o método (4.3):

$$y_2 = y_1 + h_0(v_1 k_1^0 + v_2 k_2^0) + h_1(w_1 k_1^1 + w_2 k_2^1)$$

onde

$$k_1^0 = f(x_0, y_0)$$

$$k_2^0 = f(x_0 + c_2 h_0, y_0 + h_0 a_{21} k_1^0)$$

$$k_1^1 = f(x_1, y_1)$$

$$k_2^1 = f(x_1 + c_2 h_1, y_1 + h_1 a_{21} k_1^1)$$

} já calculados no passo anterior

3º passo : Cálculo da aproximação y_3 :

$$y_3 = y_2 + h_1(v_1k_1^1 + v_2k_2^1) + h_1(w_1k_1^2 + w_2k_2^2)$$

onde

$$\left. \begin{aligned} k_1^1 &= f(x_1, y_1) \\ k_2^1 &= f(x_1 + c_2h_1, y_1 + h_1a_{21}k_1^1) \\ k_1^2 &= f(x_2, y_2) \\ k_2^2 &= f(x_2 + c_2h_2, y_2 + h_2a_{21}k_1^2) \end{aligned} \right\} \text{ já calculados no passo anterior}$$

E assim prosseguimos até o ponto final desejado.

Cabe aqui registrar que quando consideramos $\theta = 0$ e $\nu = 0$, o método TSRK definido em (4.3) se reduzirá a um método de Runge-Kutta dado por:

$$y_{n+1} = y_n + h_n \sum_{i=1}^s w_i k_i^n$$

onde

$$k_i^n = f(x_n + c_i h_n, y_n + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^n), \quad i = 1(1)s$$

com representação de Butcher dada por :

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & w^T \end{array}$$

No capítulo 6, vamos introduzir uma técnica que permite estimar de forma eficiente o erro de truncamento local através da utilização de métodos da classe TSRK proposta por Jackiewicz e Zennaro [09], descritos neste capítulo. Assim, para problemas não-stiff podemos trabalhar com um “tamanho de passo ótimo” a cada passo de integração buscando eficiência e competitividade.

AS CONDIÇÕES DE ORDEM DOS MÉTODOS TSRK

5.1 Introdução

Como vimos no capítulo 3, podemos associar as diferenciais elementares de uma função a árvores e através delas determinar as condições de ordem para os métodos de Runge-Kutta. Neste capítulo mostraremos que a mesma associação pode ser considerada para a classe dos métodos TSRK com integração a passo variável, construindo para tais métodos com ordem até 5 as condições de ordem.

5.2 Preliminares

Considerando conceitos e notações sobre árvores, introduzidos no capítulo 3, vamos apresentar alguns resultados, em especial o teorema que formulamos a seguir devido a Jackiewicz e Zennaro [09]. A partir desse resultado apresentaremos condições que nos permitem gerar os métodos TSRK definidos em (4.3).

Teorema 5.1: Para a árvore τ a condição de ordem correspondente é dada por:

$$(v^T + \xi w^T)u = \xi + \xi\theta \quad (5.1a)$$

e para a árvore $t = [t_1, t_2, \dots, t_s]$ a condição de ordem será:

$$v^T \prod_{j=1}^s \left(A\bar{\psi}^v(t_j) + \frac{(-1)^{\rho(t_j)} u}{\gamma(t_j)} \right) + \xi^{\rho(t)} w^T \prod_{j=1}^s (A\bar{\psi}^w(t_j)) = \frac{\xi^{\rho(t)} - (-1)^{\rho(t)} \xi\theta}{\gamma(t)} \quad (5.1b)$$

onde $\bar{\psi}^v(t_j)$ e $\bar{\psi}^w(t_j)$ são os respectivos pesos para v e w e as árvores $t_j, j = 1, 2, \dots, s$.

Como veremos ainda neste capítulo, o vetor u deverá ser considerado como o vetor unitário para a obtenção das condições de ordem.

As relações estabelecidas neste teorema são obtidas considerando-se que os métodos TSRK com integração a passo variável constituem um caso especial dos métodos lineares gerais, propostos por Butcher [02].

Este teorema pode ser usado repetidamente para se estabelecer as condições correspondentes a árvores de qualquer ordem.

Para árvores onde a densidade é dada por $\gamma(t) = \rho(t)$ (também chamadas de árvores primárias de ordem $\rho(t) = \rho$) as condições, chamadas condições de ordem primárias, podem ser obtidas através das relações do corolário a seguir, proposto por Jackiewicz e Zennaro [09], cuja demonstração apresentaremos.

Corolário 5.1: Se $t = [\tau^{\rho-1}]$, então a densidade $\gamma(t) = \rho$. Ainda, considerando o teorema 5.1 e a relação $Au = c$ temos que a condição de ordem correspondente a esta árvore será dada por:

$$v^T (c - u)^{\rho-1} + \xi^{\rho} w^T c^{\rho-1} = \frac{\xi^{\rho} - (-1)^{\rho} \xi\theta}{\rho} \quad (5.2a)$$

ou por:
$$(v^T + \xi^\rho w^T)c^{\rho-1} + v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} = \frac{\xi^\rho - (-1)^\rho \xi \theta}{\rho} \quad (5.2b)$$

Demonstração: Temos que $t = [\tau^{\rho-1}]$, logo $t_j = \tau \Rightarrow \begin{cases} \gamma(\tau) = 1 \\ \rho(\tau) = 1 \end{cases}$. Substituindo em (5.1b):

$$\begin{aligned} v^T \left(A\bar{\psi}^v(\tau) + \frac{(-1)^{\rho(\tau)} u}{\gamma(\tau)} \right)^{\rho-1} + \xi^\rho w^T (A\bar{\psi}^w(\tau))^{\rho-1} &= \frac{\xi^\rho - (-1)^\rho \xi \theta}{\rho} \Rightarrow \\ \Rightarrow v^T (A\bar{\psi}^v(\tau) + u)^{\rho-1} + \xi^\rho w^T (A\bar{\psi}^w(\tau))^{\rho-1} &= \frac{\xi^\rho - (-1)^\rho \xi \theta}{\rho} \end{aligned}$$

Considerando que $\bar{\psi}^v(\tau) = \bar{\psi}^w(\tau) = u$ e a relação $Au = c$ obtemos:

$$v^T (c - u)^{\rho-1} + \xi^\rho w^T c^{\rho-1} = \frac{\xi^\rho - (-1)^\rho \xi \theta}{\rho}$$

Pela relação do binômio de Newton podemos escrever que:

$$(c - u)^{\rho-1} = \sum_{r=0}^{\rho-1} \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} \cdot (-u)^r$$

Assim:

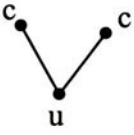
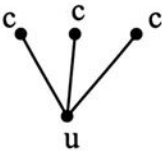
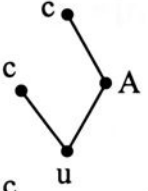
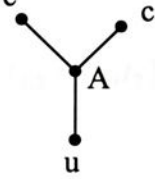
$$\begin{aligned} v^T (c - u)^{\rho-1} + \xi^\rho w^T c^{\rho-1} &= v^T c^{\rho-1} + v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} (-1)^r + \xi^\rho w^T c^{\rho-1} = \frac{\xi^\rho - (-1)^\rho \xi \theta}{\rho} \Rightarrow \\ (v^T + \xi^\rho w^T)c^{\rho-1} + v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} &= \frac{\xi^\rho - (-1)^\rho \xi \theta}{\rho} \quad \blacksquare \end{aligned}$$

É importante observar que as condições de ordem primárias não dependem dos pesos $\bar{\psi}^v(t_j)$ e $\bar{\psi}^w(t_j)$.

5.3 Obtenção dos pesos $\bar{\psi}^v(t_j)$ e $\bar{\psi}^w(t_j)$

Como vimos no teorema 5.1, as condições de ordem do método TSRK com integração a passo variável, envolvem além de valores conhecidos, como a matriz A e os vetores c , v e w , os pesos $\bar{\psi}^v(t_j)$ e $\bar{\psi}^w(t_j)$. Assim, para gerarmos as condições precisamos inicialmente obter valores para estes pesos.

Primeiramente consideramos todas as árvores que se fizerem necessárias $t_1, t_2, t_3, \dots$, com ordem $\rho(t_j) = 1, 2, 3 \dots$ respectivamente, rotuladas de tal forma que os vértices terminais são representados pelo vetor c do método, a raiz pelo vetor unitário u e os vértices intermediários pela matriz A . Assim, tomamos para $\overline{\Psi}^w(t_j)$, $j = 1, 2, 3 \dots 8$ os seguintes valores:

t_j		$\rho(t_j)$	$\gamma(t_j)$	$\overline{\Psi}^w(t_j)$
t_1		1	1	u
t_2		2	2	c
t_3		3	3	c^2
t_4		3	6	Ac
t_5		4	4	c^3
t_6		4	8	$c \cdot Ac$
t_7		4	12	Ac^2
t_8		4	24	A^2c

Definimos agora um novo conjunto que denotamos por T_r e que será o conjunto constituído por todas as árvores de ordem r . Então $T = \bigcup_{r=1}^{\infty} T_r$. Observe que o conjunto T_r tem n_r elementos, denotados por $t_{r,1}, t_{r,2}, \dots, t_{r,n_r}$, que são árvores formadas pelas árvores t_j definidas anteriormente. Ou seja, para a árvore de ordem um ($r=1$) o conjunto será $T_1 = \{t_{1,1}\}$ que tem apenas um elemento ($n_1 = 1$). Para as árvores de ordem dois, temos que $T_2 = \{t_{2,1}\}$ com $n_2 = 1$, e assim segue para todas as árvores com ordem superior.

Como ilustração vamos mostrar os conjuntos T_r para $r=1,2,\dots,5$ e suas respectivas árvores:

$$\square \quad T_1 = \{t_{1,1}\}$$

$$t_{1,1} = \tau \quad \bullet$$

$$\square \quad T_2 = \{t_{2,1}\}$$

$$t_{2,1} = [t_1] \quad \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array}$$

$$\square \quad T_3 = \{t_{3,1}, t_{3,2}\}$$

$$t_{3,1} = [t_1^2] \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}$$

$$t_{3,2} = [t_2] \quad \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \end{array}$$

$$\square \quad T_4 = \{t_{4,1}, t_{4,2}, t_{4,3}, t_{4,4}\}$$

$$t_{4,1} = [t_1^3] \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad | \quad \diagup \\ \bullet \end{array}$$

$$t_{4,2} = [t_1, t_2] \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \\ | \\ \bullet \end{array}$$

$$t_{4,3} = [t_3] \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \\ | \\ \bullet \end{array}$$

$$t_{4,4} = [t_4] \quad \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \end{array}$$

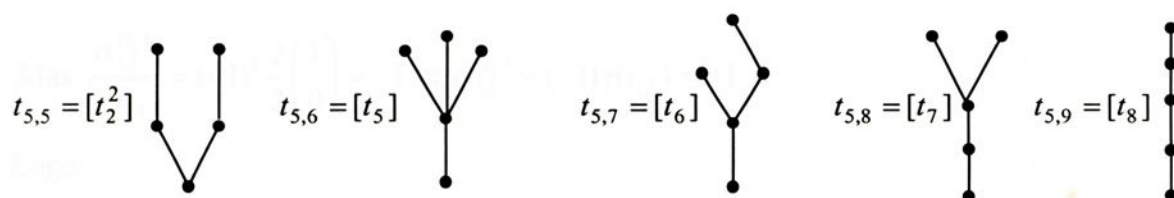
$$\square \quad T_5 = \{t_{5,1}, t_{5,2}, t_{5,3}, t_{5,4}, t_{5,5}, t_{5,6}, t_{5,7}, t_{5,8}, t_{5,9}\}$$

$$t_{5,1} = [t_1^4] \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad | \quad | \quad \diagup \\ \bullet \end{array}$$

$$t_{5,2} = [t_1^2, t_2] \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad | \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \\ | \\ \bullet \end{array}$$

$$t_{5,3} = [t_1, t_3] \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad | \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \\ | \\ \bullet \end{array}$$

$$t_{5,4} = [t_1, t_4] \quad \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad | \quad | \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \\ | \\ \bullet \end{array}$$



Usando esta notação podemos estabelecer uma relação entre os pesos $\bar{\psi}^v(t_j)$ e $\bar{\psi}^w(t_j)$, formulada por Jackiewicz e Zennaro em [09], aqui apresentada através do teorema a seguir:

Teorema 5.2: A seguinte relação é verdadeira:

$$\bar{\psi}^v(t_j) = \bar{\psi}^w(t_j) + \sum_{r=1}^{\rho(t_j)-1} \sum_{l=1}^{n_r} \alpha_{r,l}^{(t_j)} \bar{\psi}^w(t_{r,l}) \quad (5.3a)$$

onde

$$\sum_{l=1}^{n_r} \frac{\alpha_{r,l}^{(t_j)}}{\gamma(t_{r,l})} = (-1)^{\rho(t_j)-r} \frac{\rho(t_j)}{r\gamma(t_j)} \binom{\rho(t_j)-1}{r-1}, \quad r = 1, 2, \dots, \rho(t_j)-1 \quad (5.3b)$$

Considerando as relações do teorema 5.2 e os valores de $\bar{\psi}^w(t_j)$ obtidos anteriormente podemos gerar os valores necessários dos pesos $\bar{\psi}^v(t_j)$ para $j = 1, 2, 3 \dots 8$ da seguinte maneira:

▪ Cálculo de $\bar{\psi}^v(t_1)$:

$$\rho(t_1) = 1 \text{ e } \gamma(t_1) = 1$$

Considerando as relações do teorema 5.2 temos que:

$$\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$$

$$\boxed{\therefore \bar{\psi}^v(t_1) = u}$$

▪ Cálculo de $\bar{\psi}^v(t_2)$:

$$\rho(t_2) = 2, \gamma(t_2) = 2, r = 1 \text{ e } n_1 = 1$$

$$\bar{\psi}^v(t_2) = \bar{\psi}^w(t_2) + \sum_{r=1}^1 \sum_{l=1}^{n_1} \alpha_{r,l}^{(t_2)} \bar{\psi}^w(t_{r,l}) = \bar{\psi}^w(t_2) + \alpha_{1,1}^{(t_2)} \bar{\psi}^w(t_{1,1})$$

$$\text{Mas } \frac{\alpha_{1,1}^{(t_2)}}{\gamma(t_{1,1})} = (-1)^1 \frac{2}{2} \binom{1}{0} = -1 \Rightarrow \alpha_{1,1}^{(t_2)} = (-1)\gamma(t_{1,1}) = -1$$

Logo:

$$\bar{\Psi}^v(t_2) = \bar{\Psi}^w(t_2) + \alpha_{1,1}^{(t_2)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) = \bar{\Psi}^w(t_2) + \alpha_{1,1}^{(t_2)} \bar{\Psi}^w(t_1) = c - u$$

$$\therefore \boxed{\bar{\Psi}^v(t_2) = c - u}$$

▪ Cálculo de $\bar{\Psi}^v(t_3)$:

$$\rho(t_3) = 3, \gamma(t_3) = 3, r = 1, 2, n_1 = 1 \text{ e } n_2 = 1$$

$$\bar{\Psi}^v(t_3) = \bar{\Psi}^w(t_3) + \sum_{r=1}^2 \sum_{l=1}^{n_r} \alpha_{r,l}^{(t_3)} \bar{\Psi}^w(t_{r,l}) = \bar{\Psi}^w(t_3) + \sum_{r=1}^2 \alpha_{r,1}^{(t_3)} \bar{\Psi}^w(t_{r,1}) =$$

$$= \bar{\Psi}^w(t_3) + \alpha_{1,1}^{(t_3)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_3)} \bar{\Psi}^w(t_{2,1})$$

$$\text{Mas } \sum_{l=1}^{n_r} \frac{\alpha_{r,l}^{(t_3)}}{\gamma(t_{r,l})} = (-1)^{3-r} \frac{3}{3r} \binom{2}{r-1}, r = 1, 2.$$

Para $r = 1$

$$\frac{\alpha_{1,1}^{(t_3)}}{\gamma(t_{1,1})} = (-1)^2 \binom{2}{0} = 1 \Rightarrow \alpha_{1,1}^{(t_3)} = \gamma(t_{1,1}) = 1$$

Para $r = 2$

$$\frac{\alpha_{2,1}^{(t_3)}}{\gamma(t_{2,1})} = (-1)^1 \frac{1}{2} \binom{2}{1} = -1 \Rightarrow \alpha_{2,1}^{(t_3)} = (-1)\gamma(t_{2,1}) = -2$$

Logo:

$$\bar{\Psi}^v(t_3) = \bar{\Psi}^w(t_3) + \alpha_{1,1}^{(t_3)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_3)} \bar{\Psi}^w(t_{2,1}) = \bar{\Psi}^w(t_3) + \alpha_{1,1}^{(t_3)} \bar{\Psi}^w(t_1) + \alpha_{2,1}^{(t_3)} \bar{\Psi}^w(t_2)$$

$$\therefore \boxed{\bar{\Psi}^v(t_3) = (c - u)^2}$$

▪ Cálculo de $\bar{\Psi}^v(t_4)$:

$$\rho(t_4) = 3, \gamma(t_4) = 6, r = 1, 2, n_1 = 1 \text{ e } n_2 = 1$$

$$\bar{\Psi}^v(t_4) = \bar{\Psi}^w(t_4) + \sum_{r=1}^2 \sum_{l=1}^{n_r} \alpha_{r,l}^{(t_4)} \bar{\Psi}^w(t_{r,l}) = \bar{\Psi}^w(t_4) + \sum_{r=1}^2 \alpha_{r,1}^{(t_4)} \bar{\Psi}^w(t_{r,1}) =$$

$$= \bar{\Psi}^w(t_4) + \alpha_{1,1}^{(t_4)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_4)} \bar{\Psi}^w(t_{2,1})$$

$$\text{Mas } \sum_{l=1}^{n_r} \frac{\alpha_{r,l}^{(t_4)}}{\gamma(t_{r,l})} = (-1)^{3-r} \frac{3}{6r} \binom{2}{r-1}, \quad r=1,2.$$

Para $r=1$

$$\frac{\alpha_{1,1}^{(t_4)}}{\gamma(t_{1,1})} = (-1)^2 \frac{1}{2} \binom{2}{0} = \frac{1}{2} \Rightarrow \alpha_{1,1}^{(t_4)} = \frac{1}{2} \gamma(t_{1,1}) = \frac{1}{2}$$

Para $r=2$

$$\frac{\alpha_{2,1}^{(t_4)}}{\gamma(t_{2,1})} = (-1)^1 \frac{1}{4} \binom{2}{1} = -\frac{1}{2} \Rightarrow \alpha_{2,1}^{(t_4)} = -\frac{1}{2} \gamma(t_{2,1}) = -1$$

Logo:

$$\bar{\Psi}^v(t_4) = \bar{\Psi}^w(t_4) + \alpha_{1,1}^{(t_4)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_4)} \bar{\Psi}^w(t_{2,1}) = \bar{\Psi}^w(t_4) + \alpha_{1,1}^{(t_4)} \bar{\Psi}^w(t_1) + \alpha_{2,1}^{(t_4)} \bar{\Psi}^w(t_2)$$

$$\therefore \boxed{\bar{\Psi}^v(t_4) = Ac - c + \frac{1}{2}u}$$

▪ Cálculo de $\bar{\Psi}^v(t_5)$:

$$\rho(t_5) = 4, \quad \gamma(t_5) = 4, \quad r=1,2,3, \quad n_1=1, \quad n_2=1 \text{ e } n_3=2$$

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}^v(t_5) &= \bar{\Psi}^w(t_5) + \sum_{r=1}^3 \sum_{l=1}^{n_r} \alpha_{r,l}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{r,l}) = \\ &= \bar{\Psi}^w(t_5) + \alpha_{1,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{2,1}) + \alpha_{3,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{3,1}) + \alpha_{3,2}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{3,2}) \end{aligned}$$

$$\text{Mas } \sum_{l=1}^{n_r} \frac{\alpha_{r,l}^{(t_5)}}{\gamma(t_{r,l})} = (-1)^{4-r} \frac{1}{r} \binom{3}{r-1}, \quad r=1,2,3.$$

Para $r=1$

$$\frac{\alpha_{1,1}^{(t_5)}}{\gamma(t_{1,1})} = (-1)^3 \binom{3}{0} = -1 \Rightarrow \alpha_{1,1}^{(t_5)} = (-1) \gamma(t_{1,1}) = -1$$

Para $r=2$

$$\frac{\alpha_{2,1}^{(t_5)}}{\gamma(t_{2,1})} = (-1)^2 \frac{1}{2} \binom{3}{1} = \frac{3}{2} \Rightarrow \alpha_{2,1}^{(t_5)} = \frac{3}{2} \gamma(t_{2,1}) = 3$$

Para $r=3$

$$\sum_{l=1}^{n_3=2} \frac{\alpha_{3,l}^{(t_5)}}{\gamma(t_{3,l})} = (-1)^1 \frac{1}{3} \binom{3}{2} = -1 \Rightarrow \frac{\alpha_{3,1}^{(t_5)}}{\gamma(t_{3,1})} + \frac{\alpha_{3,2}^{(t_5)}}{\gamma(t_{3,2})} = -1 \Rightarrow \frac{\alpha_{3,1}^{(t_5)}}{3} + \frac{\alpha_{3,2}^{(t_5)}}{6} = -1$$

Considerando $\alpha_{3,2}^{(t_5)} = 0$ temos que $\alpha_{3,1}^{(t_5)} = -3$.

Logo:

$$\begin{aligned}\bar{\Psi}^v(t_5) &= \bar{\Psi}^w(t_5) + \alpha_{1,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{2,1}) + \alpha_{3,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{3,1}) + \alpha_{3,2}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_{3,2}) = \\ &= \bar{\Psi}^w(t_5) + \alpha_{1,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_1) + \alpha_{2,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_2) + \alpha_{3,1}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_3) + \alpha_{3,2}^{(t_5)} \bar{\Psi}^w(t_4) = \\ &= c^3 - u + 3c - 3c^2 + 0Ac = c^3 - u^3 + 3c \cdot u^2 - 3c^2 \cdot u \\ &\therefore \boxed{\bar{\Psi}^v(t_5) = (c - u)^3}\end{aligned}$$

▪ Cálculo de $\bar{\Psi}^v(t_6)$:

$$\rho(t_6) = 4, \gamma(t_6) = 8, r = 1, 2, 3, n_1 = 1, n_2 = 1 \text{ e } n_3 = 2$$

$$\begin{aligned}\bar{\Psi}^v(t_6) &= \bar{\Psi}^w(t_6) + \sum_{r=1}^3 \sum_{l=1}^{n_r} \alpha_{r,l}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{r,l}) = \\ &= \bar{\Psi}^w(t_6) + \alpha_{1,1}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{2,1}) + \alpha_{3,1}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{3,1}) + \alpha_{3,2}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{3,2})\end{aligned}$$

$$\text{Mas } \sum_{l=1}^{n_r} \frac{\alpha_{r,l}^{(t_6)}}{\gamma(t_{r,l})} = (-1)^{4-r} \frac{4}{8r} \binom{3}{r-1}, \quad r = 1, 2, 3.$$

Para $r = 1$

$$\frac{\alpha_{1,1}^{(t_6)}}{\gamma(t_{1,1})} = (-1)^3 \frac{1}{2} \binom{3}{0} = -\frac{1}{2} \Rightarrow \alpha_{1,1}^{(t_6)} = -\frac{1}{2}$$

Para $r = 2$

$$\frac{\alpha_{2,1}^{(t_6)}}{\gamma(t_{2,1})} = (-1)^2 \frac{1}{4} \binom{3}{1} = \frac{3}{4} \Rightarrow \alpha_{2,1}^{(t_6)} = \frac{3}{2}$$

Para $r = 3$

$$\sum_{l=1}^{n_3=2} \frac{\alpha_{3,l}^{(t_6)}}{\gamma(t_{3,l})} = (-1)^1 \frac{1}{6} \binom{3}{2} = -\frac{1}{2} \Rightarrow \frac{\alpha_{3,1}^{(t_6)}}{\gamma(t_{3,1})} + \frac{\alpha_{3,2}^{(t_6)}}{\gamma(t_{3,2})} = -\frac{1}{2} \Rightarrow \frac{\alpha_{3,1}^{(t_6)}}{3} + \frac{\alpha_{3,2}^{(t_6)}}{6} = -\frac{1}{2}$$

Considerando $\alpha_{3,1}^{(t_6)} = -1$ temos que $\alpha_{3,2}^{(t_6)} = -1$.

Logo:

$$\begin{aligned}\bar{\Psi}^v(t_6) &= \bar{\Psi}^w(t_6) + \alpha_{1,1}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{2,1}) + \alpha_{3,1}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{3,1}) + \alpha_{3,2}^{(t_6)} \bar{\Psi}^w(t_{3,2}) \\ &\therefore \boxed{\bar{\Psi}^v(t_6) = c \cdot Ac - \frac{1}{2}u + \frac{3}{2}c - c^2 - Ac}\end{aligned}$$

▪ Cálculo de $\bar{\psi}^v(t_7)$:

$$\rho(t_7) = 4, \gamma(t_7) = 12, r = 1, 2, 3, n_1 = 1, n_2 = 1 \text{ e } n_3 = 2$$

$$\begin{aligned}\bar{\psi}^v(t_7) &= \bar{\psi}^w(t_7) + \sum_{r=1}^3 \sum_{l=1}^{n_r} \alpha_{r,l}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{r,l}) = \\ &= \bar{\psi}^w(t_7) + \alpha_{1,1}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{2,1}) + \alpha_{3,1}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{3,1}) + \alpha_{3,2}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{3,2})\end{aligned}$$

$$\text{Mas } \sum_{l=1}^{n_r} \frac{\alpha_{r,l}^{(t_7)}}{\gamma(t_{r,l})} = (-1)^{4-r} \frac{4}{12r} \binom{3}{r-1}, \quad r = 1, 2, 3.$$

Para $r = 1$

$$\frac{\alpha_{1,1}^{(t_7)}}{\gamma(t_{1,1})} = (-1)^3 \frac{1}{3} \binom{3}{0} = -\frac{1}{3} \Rightarrow \alpha_{1,1}^{(t_7)} = -\frac{1}{3}$$

Para $r = 2$

$$\frac{\alpha_{2,1}^{(t_7)}}{\gamma(t_{2,1})} = (-1)^2 \frac{1}{6} \binom{3}{1} = \frac{1}{2} \Rightarrow \alpha_{2,1}^{(t_7)} = 1$$

Para $r = 3$

$$\sum_{l=1}^{n_3=2} \frac{\alpha_{3,l}^{(t_7)}}{\gamma(t_{3,l})} = (-1)^1 \frac{1}{9} \binom{3}{2} = -\frac{1}{3} \Rightarrow \frac{\alpha_{3,1}^{(t_7)}}{\gamma(t_{3,1})} + \frac{\alpha_{3,2}^{(t_7)}}{\gamma(t_{3,2})} = -\frac{1}{3} \Rightarrow \frac{\alpha_{3,1}^{(t_7)}}{3} + \frac{\alpha_{3,2}^{(t_7)}}{6} = -\frac{1}{3}$$

Considerando $\alpha_{3,1}^{(t_7)} = 0$ temos que $\alpha_{3,2}^{(t_7)} = -2$

Logo:

$$\bar{\psi}^v(t_7) = \bar{\psi}^w(t_7) + \alpha_{1,1}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{2,1}) + \alpha_{3,1}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{3,1}) + \alpha_{3,2}^{(t_7)} \bar{\psi}^w(t_{3,2})$$

$$\therefore \boxed{\bar{\psi}^v(t_7) = Ac^2 - 2Ac + c - \frac{1}{3}u}$$

▪ Cálculo de $\bar{\psi}^v(t_8)$:

$$\rho(t_8) = 4, \gamma(t_8) = 24, r = 1, 2, 3, n_1 = 1, n_2 = 1 \text{ e } n_3 = 2$$

$$\begin{aligned}\bar{\psi}^v(t_8) &= \bar{\psi}^w(t_8) + \sum_{r=1}^3 \sum_{l=1}^{n_r} \alpha_{r,l}^{(t_8)} \bar{\psi}^w(t_{r,l}) = \\ &= \bar{\psi}^w(t_8) + \alpha_{1,1}^{(t_8)} \bar{\psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_8)} \bar{\psi}^w(t_{2,1}) + \alpha_{3,1}^{(t_8)} \bar{\psi}^w(t_{3,1}) + \alpha_{3,2}^{(t_8)} \bar{\psi}^w(t_{3,2})\end{aligned}$$

$$\text{Mas } \sum_{l=1}^{n_r} \frac{\alpha_{r,l}^{(t_8)}}{\gamma(t_{r,l})} = (-1)^{4-r} \frac{1}{6r} \binom{3}{r-1}, \quad r = 1, 2, 3.$$

Para $r = 1$

$$\frac{\alpha_{1,1}^{(t_7)}}{\gamma(t_{1,1})} = (-1)^3 \frac{1}{6} \binom{3}{0} = -\frac{1}{6} \Rightarrow \alpha_{1,1}^{(t_8)} = -\frac{1}{6}$$

Para $r = 2$

$$\frac{\alpha_{2,1}^{(t_8)}}{\gamma(t_{2,1})} = (-1)^2 \frac{1}{12} \binom{3}{1} = \frac{1}{4} \Rightarrow \alpha_{2,1}^{(t_8)} = \frac{1}{2}$$

Para $r = 3$

$$\sum_{l=1}^{n_3=2} \frac{\alpha_{3,l}^{(t_8)}}{\gamma(t_{3,l})} = (-1)^1 \frac{1}{18} \binom{3}{2} = -\frac{1}{6} \Rightarrow \frac{\alpha_{3,1}^{(t_8)}}{\gamma(t_{3,1})} + \frac{\alpha_{3,2}^{(t_8)}}{\gamma(t_{3,2})} = -\frac{1}{6} \Rightarrow \frac{\alpha_{3,1}^{(t_8)}}{3} + \frac{\alpha_{3,2}^{(t_8)}}{6} = -\frac{1}{6}$$

Considerando $\alpha_{3,1}^{(t_8)} = 0$ temos que $\alpha_{3,2}^{(t_8)} = -1$.

Logo:

$$\overline{\Psi}^v(t_8) = \overline{\Psi}^w(t_8) + \alpha_{1,1}^{(t_8)} \overline{\Psi}^w(t_{1,1}) + \alpha_{2,1}^{(t_8)} \overline{\Psi}^w(t_{2,1}) + \alpha_{3,1}^{(t_8)} \overline{\Psi}^w(t_{3,1}) + \alpha_{3,2}^{(t_8)} \overline{\Psi}^w(t_{3,2})$$

$$\therefore \overline{\Psi}^v(t_8) = A^2c - Ac + \frac{1}{2}c - \frac{1}{6}u$$

Resumindo obtivemos os valores de $\overline{\Psi}^v(t_j)$ e $\overline{\Psi}^w(t_j)$, necessários para o cálculo das condições de ordem do método TSRK definido em (4.3), apresentados na tabela a seguir:

t_j	$\overline{\Psi}^v(t_j)$	$\overline{\Psi}^w(t_j)$
t_1	u	u
t_2	$c - u$	c
t_3	$(c - u)^2$	c^2
t_4	$Ac - c + \frac{1}{2}u$	Ac
t_5	$(c - u)^3$	c^3
t_6	$c \cdot Ac - Ac - c^2 + \frac{3}{2}c - \frac{1}{2}u$	$c \cdot Ac$
t_7	$Ac^2 - 2Ac + c - \frac{1}{3}u$	Ac^2
t_8	$A^2c - Ac + \frac{1}{2}c - \frac{1}{6}u$	A^2c

5.4 Construção das condições de ordem

Considerando as condições de ordem associadas a cada árvore, e o teorema (5.1), formulado por Jackiewicz e Zennaro [09], podemos construir as condições de ordem de um método TSRK a passo de integração variável, correspondentes às árvores do conjunto T_r para $r = 1, 2, \dots, 5$:

- Para $t_{1,1} = \tau$

Por (5.1a) temos que a condição associada a esta árvore será:

$$(v^T + \xi w^T)u = \xi + \xi\theta$$

Para as demais árvores vamos considerar a relação (5.1b) obtendo:

- $t_{2,1} = [t_1]$

$$\gamma(t_{2,1}) = \rho(t_{2,1}) = 2 \quad \text{e} \quad \gamma(t_1) = \rho(t_1) = 1$$

$$\text{Utilizando (5.1b) temos: } v^T (A\bar{\psi}^v(t_1) - u) + \xi^2 w^T A\bar{\psi}^w(t_1) = \frac{\xi^2 - \xi\theta}{2}$$

Como $\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$ temos:

$$v^T Au - v^T u + \xi^2 w^T Au = \frac{\xi^2 - \xi\theta}{2}, \text{ mas } Au = c \text{ logo:}$$

$$v^T (c - u) + \xi^2 w^T c = \frac{\xi^2 - \xi\theta}{2} \Rightarrow (\xi^2 w^T + v^T)c - v^T u = \frac{\xi^2 - \xi\theta}{2}$$

- $t_{3,1} = [t_1^2]$

$$\gamma(t_{3,1}) = \rho(t_{3,1}) = 3$$

Utilizando (5.1b) temos que:

$$v^T (A\bar{\psi}^v(t_1) - u)(A\bar{\psi}^v(t_1) - u) + \xi^3 w^T (A\bar{\psi}^w(t_1))(A\bar{\psi}^w(t_1)) = \frac{\xi^3 + \xi\theta}{3}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$ e $Au = c$ temos:

$$v^T(c-u)^2 + \xi^3 w^T c^2 = \frac{\xi^3 + \xi\theta}{3} \Rightarrow (\xi^3 w^T + v^T)c^2 - v^T(2c-u) = \frac{\xi^3 + \xi\theta}{3}$$

$$\blacksquare \quad t_{3,2} = [t_2]$$

$$\gamma(t_{3,2}) = 6, \quad \rho(t_{3,2}) = 3 \quad \text{e} \quad \gamma(t_2) = \rho(t_2) = 2$$

$$\text{Utilizando (5.1b) temos: } v^T(A\bar{\psi}^v(t_2) + \frac{u}{2}) + \xi^3 w^T A\bar{\psi}^w(t_2) = \frac{\xi^3 + \xi\theta}{6}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_2) = c-u$, $\bar{\psi}^w(t_2) = c$ e $Au = c$ temos:

$$v^T Ac - v^T c + \frac{1}{2}v^T u + \xi^3 w^T Ac = \frac{\xi^3 + \xi\theta}{6} \Rightarrow (v^T + \xi^3 w^T)Ac - v^T(c - \frac{1}{2}u) = \frac{\xi^3 + \xi\theta}{6}$$

$$\blacksquare \quad t_{4,1} = [t_1^3]$$

$$\gamma(t_{4,1}) = \rho(t_{4,1}) = 4$$

$$\text{Utilizando (5.1b) temos que: } v^T(A\bar{\psi}^v(t_1) - u)^3 + \xi^4 w^T(A\bar{\psi}^w(t_1))^3 = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{4}$$

Como $\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$ e $Au = c$ temos:

$$v^T(c-u)^3 + \xi^4 w^T c^3 = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{4} \Rightarrow (v^T + \xi^4 w^T)c^3 - v^T(3c^2 - 3c + u) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{4}$$

$$\blacksquare \quad t_{4,2} = [t_1, t_2]$$

$$\gamma(t_{4,2}) = 8 \quad \rho(t_{4,2}) = 4$$

Utilizando (5.1b) temos que:

$$v^T(A\bar{\psi}^v(t_1) - u)(A\bar{\psi}^v(t_2) + \frac{u}{2}) + \xi^4 w^T(A\bar{\psi}^w(t_1))(A\bar{\psi}^w(t_2)) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{8}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$, $\bar{\psi}^v(t_2) = c-u$, $\bar{\psi}^w(t_2) = c$ e $Au = c$ temos:

$$v^T(c-u)(Ac - c + \frac{1}{2}u) + \xi^4 w^T c \cdot Ac = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{8} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow v^T c \cdot Ac - v^T c^2 + \frac{1}{2}v^T c - v^T Ac + v^T c - \frac{1}{2}v^T u + \xi^4 w^T c \cdot Ac = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{8} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^4 w^T)(c \cdot Ac) - v^T(c^2 + Ac - \frac{3}{2}c + \frac{1}{2}u) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{8}$$

$$\blacksquare \quad t_{4,3} = [t_3]$$

$$\gamma(t_{4,3}) = 12, \quad \rho(t_{4,3}) = 4 \quad \text{e} \quad \gamma(t_3) = \rho(t_3) = 3$$

Por (5.1b) temos:

$$v^T(A\bar{\psi}^v(t_3) - \frac{u}{3}) + \xi^4 w^T A\bar{\psi}^w(t_3) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{12}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_3) = (c - u)^2 = c^2 - 2c + u$, $\bar{\psi}^w(t_3) = c^2$ e $Au = c$ temos:

$$-2v^T Ac + v^T Ac^2 + v^T c - \frac{1}{3}v^T u + \xi^4 w^T Ac^2 = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{12} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^4 w^T)Ac^2 - v^T(2Ac - c + \frac{1}{3}u) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{12}$$

$$\blacksquare \quad t_{4,4} = [t_4]$$

$$\gamma(t_{4,4}) = 24, \quad \rho(t_{4,4}) = 4, \quad \gamma(t_4) = 6 \quad \text{e} \quad \rho(t_4) = 3$$

Por (5.1b) temos:

$$v^T(A\bar{\psi}^v(t_4) - \frac{u}{6}) + \xi^4 w^T A\bar{\psi}^w(t_4) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{24}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_4) = Ac - c + \frac{1}{2}u$, $\bar{\psi}^w(t_4) = Ac$ e $Au = c$ temos:

$$v^T(A^2c - Ac + \frac{1}{2}c) - \frac{1}{6}v^T u + \xi^4 w^T A^2c = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{24} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^4 w^T)A^2c - v^T(Ac - \frac{1}{2}c + \frac{1}{6}u) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{24}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,1} = [t_1^4]$$

$$\gamma(t_{5,1}) = \rho(t_{5,1}) = 5$$

$$\text{Utilizando (5.1b) temos: } v^T(A\bar{\psi}^v(t_1) - u)^4 + \xi^5 w^T(A\bar{\psi}^w(t_1))^4 = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{5}$$

Como $\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$ e $Au = c$ temos:

$$v^T(c-u)^4 + \xi^5 w^T c^4 = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{5} \Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)c^4 - v^T(4c^3 - 6c^2 + 4c - u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{5}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,2} = [t_1^2, t_2]$$

$$\gamma(t_{5,2}) = 10 \text{ e } \rho(t_{5,2}) = 5$$

Utilizando (5.1b) temos:

$$v^T(A\bar{\psi}^v(t_1) - u)^2(A\bar{\psi}^v(t_2) + \frac{u}{2}) + \xi^5 w^T(A\bar{\psi}^w(t_1))^2(A\bar{\psi}^w(t_2)) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{10}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$, $\bar{\psi}^v(t_2) = c - u$, $\bar{\psi}^w(t_2) = c$ e $Au = c$ temos:

$$v^T(c^2 - 2c + u)(Ac - c + \frac{1}{2}u) + \xi^5 w^T c^2 \cdot Ac = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{10} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow v^T(c^2 \cdot Ac - c^3 + \frac{1}{2}c^2 - 2c \cdot Ac + 2c^2 - 2c + Ac + \frac{1}{2}u) + \xi^5 w^T c^2 \cdot Ac = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{10} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)(c^2 \cdot Ac) - v^T(c^3 + 2c \cdot Ac - \frac{5}{2}c^2 - Ac + 2c - \frac{1}{2}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{10}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,3} = [t_1, t_3]$$

$$\gamma(t_{5,3}) = 15 \text{ e } \rho(t_{5,3}) = 5$$

Utilizando (5.1b) temos:

$$v^T(A\bar{\psi}^v(t_1) - u)(A\bar{\psi}^v(t_3) - \frac{u}{3}) + \xi^5 w^T(A\bar{\psi}^w(t_1))(A\bar{\psi}^w(t_3)) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{15}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$, $\bar{\psi}^v(t_3) = (c - u)^2$, $\bar{\psi}^w(t_3) = c^2$ e $Au = c$ temos:

$$v^T(c - u)(Ac^2 - 2Ac + c - \frac{1}{3}u) + \xi^5 w^T c \cdot Ac^2 = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{15} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow v^T(c \cdot Ac^2 - 2c \cdot Ac + c^2 - \frac{4}{3}c - Ac^2 + 2Ac + \frac{1}{3}u) + \xi^5 w^T c \cdot Ac^2 = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{15} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)(c \cdot Ac^2) - v^T(2c \cdot Ac + Ac^2 - c^2 - 2Ac + \frac{4}{3}c - \frac{1}{3}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{15}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,4} = [t_1, t_4]$$

$$\gamma(t_{5,4}) = 30 \text{ e } \rho(t_{5,4}) = 5$$

Utilizando (5.1b) temos que:

$$v^T (A\bar{\psi}^v(t_1) - u)(A\bar{\psi}^v(t_4) - \frac{u}{6}) + \xi^5 w^T (A\bar{\psi}^w(t_1))(A\bar{\psi}^w(t_4)) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{30}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_1) = \bar{\psi}^w(t_1) = u$, $\bar{\psi}^v(t_4) = Ac - c + \frac{1}{2}u$, $\bar{\psi}^w(t_4) = Ac$ e $Au = c$ temos:

$$v^T (c - u)(A^2c - Ac + \frac{1}{2}c - \frac{1}{6}u) + \xi^5 w^T c \cdot A^2c = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{30} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow v^T (c \cdot A^2c - c \cdot Ac + \frac{1}{2}c^2 - \frac{2}{3}c - Ac^2 + Ac + \frac{1}{6}u) + \xi^5 w^T c \cdot A^2c = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{30} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)(c \cdot A^2c) - v^T (c \cdot Ac + A^2c - \frac{1}{2}c^2 - Ac + \frac{2}{3}c - \frac{1}{6}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{30}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,5} = [t_2^2]$$

$$\gamma(t_{5,5}) = 20 \text{ e } \rho(t_{5,5}) = 5$$

Por (5.1b) temos:

$$v^T (A\bar{\psi}^v(t_2) + \frac{1}{2}u)^2 + \xi^5 w^T (A\bar{\psi}^w(t_2))^2 = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_2) = c - u$, $\bar{\psi}^w(t_2) = c$ e $Au = c$ temos:

$$v^T (Ac - c + \frac{1}{2}u)^2 + \xi^5 w^T (Ac)^2 = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow v^T ((Ac)^2 - 2c \cdot Ac + Ac \cdot u + c^2 - c \cdot u - \frac{1}{2}u \cdot \frac{1}{2}u) + \xi^5 w^T c \cdot A^2c = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)(Ac)^2 - v^T (2c \cdot Ac - c^2 - Ac + c - \frac{1}{4}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,6} = [t_5]$$

$$\gamma(t_{5,6}) = 20, \quad \rho(t_{5,6}) = 5 \text{ e } \gamma(t_5) = \rho(t_5) = 4$$

$$\text{Utilizando (5.1b) temos que: } v^T (A\bar{\psi}^v(t_5) + \frac{u}{4}) + \xi^5 w^T A\bar{\psi}^w(t_5) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_5) = (c - u)^3 = c^3 - 3c^2 + 3c - u$, $\bar{\psi}^w(t_5) = c^3$ e $Au = c$ temos:



$$v^T (Ac^3 - 3Ac^2 + 3Ac - c + \frac{1}{4}u) + \xi^5 w^T Ac^3 = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)Ac^3 - v^T (3Ac^2 - 3Ac + c - \frac{1}{4}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,7} = [t_6]$$

$$\gamma(t_{5,7}) = 40, \quad \rho(t_{5,7}) = 5, \gamma(t_6) = 8 \text{ e } \rho(t_6) = 4$$

$$\text{Utilizando (5.1b) temos que: } v^T (A\bar{\psi}^v(t_6) + \frac{u}{8}) + \xi^5 w^T A\bar{\psi}^w(t_6) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{40}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_6) = c \cdot Ac - Ac - c^2 + \frac{3}{2}c - \frac{1}{2}u$, $\bar{\psi}^w(t_6) = c \cdot Ac$ e $Au = c$ temos:

$$v^T (A(c \cdot Ac) - A^2c - Ac^2 + \frac{3}{2}Ac - \frac{1}{2}c + \frac{1}{8}u) + \xi^5 w^T A(c \cdot Ac) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{40} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)A(c \cdot Ac) - v^T (A^2c + Ac^2 - \frac{3}{2}Ac + \frac{1}{2}c - \frac{1}{8}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{40}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,8} = [t_7]$$

$$\gamma(t_{5,8}) = 60, \quad \rho(t_{5,8}) = 5, \gamma(t_7) = 12 \text{ e } \rho(t_7) = 4$$

Utilizando (5.1b) temos:

$$v^T (A\bar{\psi}^v(t_7) + \frac{u}{12}) + \xi^5 w^T A\bar{\psi}^w(t_7) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{60}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_7) = Ac^2 - 2Ac + c - \frac{1}{3}u$, $\bar{\psi}^w(t_7) = Ac^2$ e $Au = c$ temos:

$$v^T (A^2c^2 - 2A^2c + Ac - \frac{1}{3}c + \frac{1}{12}u) + \xi^5 w^T (A^2c^2) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{60} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)A^2c^2 - v^T (2A^2c - Ac + \frac{1}{3}c - \frac{1}{12}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{60}$$

$$\blacksquare \quad t_{5,9} = [t_8]$$

$$\gamma(t_{5,9}) = 120, \quad \rho(t_{5,9}) = 5, \gamma(t_8) = 24 \text{ e } \rho(t_8) = 4$$

Utilizando (5.1b) temos:

$$v^T (A\bar{\psi}^v(t_8) + \frac{u}{24}) + \xi^5 w^T A\bar{\psi}^w(t_8) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{120}$$

Considerando $\bar{\psi}^v(t_8) = A^2c - Ac + \frac{1}{2}c - \frac{1}{6}u$, $\bar{\psi}^w(t_8) = A^2c$ e $Au = c$ temos:

$$v^T (A^3c - A^2c + \frac{1}{2}Ac - \frac{1}{6}c + \frac{1}{24}u) + \xi^5 w^T A^3c = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{120} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (v^T + \xi^5 w^T)A^3c - v^T(A^2c - \frac{1}{2}Ac + \frac{1}{6}c - \frac{1}{24}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{120}$$

Observação: Para as árvores primárias, ou seja árvores onde $\gamma(t) = \rho(t)$, ao invés do procedimento acima, podemos utilizar o corolário 5.1 citado anteriormente, para a construção das respectivas condições de ordem primárias.

Resumindo, as condições de ordem de um método TSRK a passo de integração variável com ordem até 5 são dadas por:

t	$\rho(t)$	Condições de ordem
$t_{1,1}$	1	$(v^T + \xi w^T)u = \xi + \xi\theta$
$t_{2,1}$	2	$(v^T + \xi^2 w^T)c - v^T u = \frac{\xi^2 - \xi\theta}{2}$
$t_{3,1}$	3	$(v^T + \xi^3 w^T)c^2 - v^T(2c - u) = \frac{\xi^3 + \xi\theta}{3}$
$t_{3,2}$	3	$(v^T + \xi^3 w^T)Ac - v^T(c - \frac{1}{2}u) = \frac{\xi^3 + \xi\theta}{6}$
$t_{4,1}$	4	$(v^T + \xi^4 w^T)c^3 - v^T(3c^2 - 3c + u) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{4}$
$t_{4,2}$	4	$(v^T + \xi^4 w^T)(c \cdot Ac) - v^T(c^2 + Ac - \frac{3}{2}c + \frac{1}{2}u) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{8}$
$t_{4,3}$	4	$(v^T + \xi^4 w^T)Ac^2 - v^T(2Ac - c\frac{1}{3}u) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{12}$
$t_{4,4}$	4	$(v^T + \xi^4 w^T)A^2c - v^T(Ac - \frac{1}{2}c + \frac{1}{6}u) = \frac{\xi^4 - \xi\theta}{24}$
$t_{5,1}$	5	$(v^T + \xi^5 w^T)c^4 - v^T(4c^3 - 6c^2 + 4c - u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{5}$
$t_{5,2}$	5	$(v^T + \xi^5 w^T)(c^2 \cdot Ac) - v^T(c^3 + 2c \cdot Ac - \frac{5}{2}c^2 - Ac + 2c - \frac{1}{2}u) = \frac{\xi^5 + \xi\theta}{10}$

$$\begin{aligned}
t_{5,3} \quad 5 \quad (v^T + \xi^5 w^T)(c \cdot Ac^2) - v^T(2c \cdot Ac + Ac^2 - c^2 - 2Ac + \frac{4}{3}c - \frac{1}{3}u) &= \frac{\xi^5 + \xi\theta}{15} \\
t_{5,4} \quad 5 \quad (v^T + \xi^5 w^T)(c \cdot A^2c) - v^T(c \cdot Ac + A^2c - \frac{1}{2}c^2 - Ac + \frac{2}{3}c - \frac{1}{6}u) &= \frac{\xi^5 + \xi\theta}{30} \\
t_{5,5} \quad 5 \quad (v^T + \xi^5 w^T)(Ac)^2 - v^T(2c \cdot Ac - c^2 - Ac + c - \frac{1}{4}u) &= \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20} \\
t_{5,6} \quad 5 \quad (v^T + \xi^5 w^T)Ac^3 - v^T(3Ac^2 - 3Ac + c - \frac{1}{4}u) &= \frac{\xi^5 + \xi\theta}{20} \\
t_{5,7} \quad 5 \quad (v^T + \xi^5 w^T)A(c \cdot Ac) - v^T(A^2c + Ac^2 + \frac{3}{2}Ac + \frac{1}{2}c - \frac{1}{8}u) &= \frac{\xi^5 + \xi\theta}{40} \\
t_{5,8} \quad 5 \quad (v^T + \xi^5 w^T)A^2c^2 - v^T(2A^2c - Ac + \frac{1}{3}c - \frac{1}{12}u) &= \frac{\xi^5 + \xi\theta}{60} \\
t_{5,9} \quad 5 \quad (v^T + \xi^5 w^T)A^3c - v^T(A^2c - \frac{1}{2}Ac + \frac{1}{6}c - \frac{1}{24}u) &= \frac{\xi^5 + \xi\theta}{120}
\end{aligned}$$

Podemos observar que para $\theta = 0$ e $v = 0$ estas condições se reduzem às condições de ordem dos métodos de Runge- Kutta de passo um:

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & w^T \end{array}$$

8.1 Introdução

Os métodos de Runge-Kutta embutidos permitem obter de maneira eficiente o erro de truncamento local do método de ordem menor, como mostrado no capítulo 2. Procurando seguir esta ideia, Dahlquist e Ljunger [29], desenvolveram os algoritmos e estruturas necessárias para a construção de pares embutidos de métodos, implementados pelo TSRK dado em (4.4) com ordem $p+1$ e um método de Runge-Kutta clássico com ordem p . O objetivo principal deste capítulo é mostrar de forma clara como se obtém a partir destes conceitos as condições de ordem que nos levam a obter dados métodos com ordem até 5. Finalmente, construímos a partir de um par de Runge-Kutta embutidos com ordem 3 um método TSRK com ordem 4, de tal forma que tenham estabilidade.

CONSTRUÇÃO DO PAR DE MÉTODOS RK E TSRK EMBUTIDOS

6.1 Introdução

Os métodos de Runge-Kutta embutidos permitem estimar de maneira eficiente o erro de truncamento local do método de ordem menor, como mostramos no capítulo 2. Procurando explorar esta idéia Jackiewicz e Zennaro [09], desenvolveram os conceitos e resultados necessários para a construção de pares embutidos de métodos, constituídos pelo TSRK dado em (4.3) com ordem $p+1$ e um método de Runge-Kutta contínuo com ordem p . O objetivo principal deste capítulo é mostrar de forma clara esses resultados e a partir deles construir as condições de ordem que nos levem a pares desses métodos com ordem até 5. Finalmente, construímos a partir de um método de Runge-Kutta contínuo com ordem 3 um método TSRK com ordem 4, de tal forma que sejam embutidos.

6.2 O par de métodos embutidos (Runge-Kutta e TSRK)

Jackiewicz e Zennaro [09], estudaram a possibilidade de ao invés de se trabalhar com pares embutidos, utilizando apenas métodos de Runge-Kutta, considerar pares onde a um método de Runge-Kutta com extensão contínua de ordem p associa-se um método TSRK como o definido em (4.3) de ordem $p+1$. Para esse par sua representação de Butcher será dada por:

$c_1 = 0$					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$		
c_s	a_{s1}	a_{s2}	$\cdots$	$a_{s,s-1}$	
	$b_1(\eta)$	$b_2(\eta)$	$\cdots$	$b_{s-1}(\eta)$	$b_s(\eta)$
0	$v_1(\xi)$	$v_2(\xi)$	$\cdots$	$v_{s-1}(\xi)$	$v_s(\xi)$
	$w_1(\xi)$	$w_2(\xi)$	$\cdots$	$w_{s-1}(\xi)$	$w_s(\xi)$

ou

c	A
	$b^T(\eta)$
0	$v^T(\xi)$
	$w^T(\xi)$

(6.1)

onde

- c, A e $b^T(\eta)$ definem o método de Runge-Kutta contínuo de ordem p ;
- $c, A, v^T(\xi)$ e $w^T(\xi)$ definem o método TSRK de ordem $p+1$.

De (2.2) sabemos que o erro de truncamento local do método de Runge-Kutta com extensão contínua de ordem p em x_{n+1} é dado por:

$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1},$ (6.2)

onde

$$y_{n+1} = y_n + h_n \sum_{i=1}^s b_i(\eta) k_i$$
$$k_i = f(x_n + c_i h_n, y_n + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j)$$

(6.3)

ou seja, $T_{n+1} = \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2})$.

Considerando que y_{n+1}^* é a aproximação numérica calculada pelo método TSRK, dado por:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^* &= y_n + h_{n-1} \sum_{i=1}^s (v_i k_i^{n-1} + \xi w_i k_i^n) \\ k_i^{n-1} &= f(x_{n-1} + c_i h_{n-1}, y_{n-1} + h_{n-1} \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^{n-1}) \\ k_i^n &= f(x_n + c_i h_n, y_n + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j^n) \end{aligned}$$

temos que o erro de truncamento local da aproximação gerada por esse método é dado por:

$$T_{n+1}^* = y(x_{n+1}) - y_{n+1}^* \quad (6.4)$$

Logo, $T_{n+1}^* = \varphi^*(x_n, y(x_n))h^{p+2} + O(h^{p+3})$. Efetuando a diferença entre as expressões de (6.2) e (6.4), obtemos:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^* - y_{n+1} &= \\ &= \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2}) - \varphi^*(x_n, y(x_n))h^{p+2} + O(h^{p+3}) = \\ &= \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2}) \end{aligned}$$

Consequentemente, podemos considerar $\|y_{n+1} - y_{n+1}^*\|$ como uma estimativa para a parte principal $\varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1}$ do erro de truncamento local da aproximação gerada através do método de ordem p dado por (6.3), isto é:

$$T_{n+1} \cong \|y_{n+1} - y_{n+1}^*\| \quad (6.5)$$

Portanto, como os métodos são embutidos, ou seja, eles tem em comum a matriz A e o vetor c , é possível estimar o erro de truncamento local do método de Runge-Kutta contínuo de ordem p com um esforço computacional adicional mínimo.



6.3 Construção do par embutido

Para construirmos pares de métodos embutidos como dado na representação (6.1) é preciso considerar simultaneamente as condições do método de Runge-Kutta de ordem p citadas no capítulo 3 e as condições do método TSRK de ordem $p+1$ determinadas no capítulo 5.

Nesta seção iremos mostrar uma maneira mais simples de construir este par de métodos embutidos. Para isso vamos determinar algumas condições de ordem simplificadoras de um método TSRK, propostas por Jackiewicz e Zennaro [09].

Denotamos por T_p o conjunto de todas as árvores primárias, definido por:

$$T_p = \{t \in T : t = [\tau^r], r = 0, 1, \dots\}, \text{ onde } [\tau^0] := \tau$$

e por $T_s = T - T_p$ o conjunto de todas as árvores secundárias.

Assim, temos que as condições de ordem correspondentes às árvores $t \in T_p$ serão denominadas **condições primárias**, e as condições de ordem correspondentes às árvores $t \in T_s$ serão denominadas **condições secundárias**.

Seja $e^{(1)} = (1, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^s$ e consideremos o seguinte teorema:

Teorema 6.1: Assumimos como hipótese que $v + \xi^p w = f(\xi)e^{(1)}$ e que v satisfaz as condições secundárias de ordem até $p-1$ do método de Runge-Kutta de passo um, com o lado direito modificado como segue:

$$v^T \overline{\psi}^w(t) = \frac{\rho(t)}{\gamma(t)} v^T c^{\rho(t)-1}$$

onde $t \in T_s$ e $\rho(t) \leq p-1$. Então, toda condição secundária de ordem até p se reduz a uma condição primária de mesma ordem.

Considerando o resultado do teorema 6.1, Jackiewicz e Zennaro obtiveram o seguinte algoritmo para a construção de métodos TSRK com ordem $p \geq 2$. Seja:

$$v + \xi^p w = f_p(\xi)e^{(1)} \quad (6.6)$$

onde $f_p(\xi)$ é a função que vamos determinar. Consideremos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} v^T c^{\rho-1} + \xi^\rho w^T c^{\rho-1} = f_p(\xi) \delta_{p,p-\rho+1}, \\ v^T c^{\rho-1} + \xi^\rho w^T c^{\rho-1} = \frac{\xi^\rho - (-1)^\rho \xi \theta}{\rho} - v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r}, \rho = 1, 2, \dots, p-1, \end{cases} \quad (6.7)$$

onde a primeira equação de (6.7) é obtida pela multiplicação de (6.6) por $c^{\rho-1}$, e a segunda é a condição primária de ordem ρ definida no corolário 3.1. Além disso

$$\delta_{p,p-\rho+1} = e^{(1)} c^{\rho-1}.$$

Resolvendo o sistema (6.7) obtemos que:

$$v^T c^{\rho-1} = \left[\xi^{\rho-\rho} \left(\frac{\xi^\rho - (-1)^\rho \xi \theta}{\rho} - v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} \right) - f_p(\xi) \delta_{p,p-\rho+1} \right] / (\xi^{\rho-\rho} - 1) \quad (6.8)$$

que expressa $v^T c^{\rho-1}$ em termos de $f_p(\xi)$ e $v^T c^r$ para $r = 0, 1, \dots, \rho-2$.

Substituindo $v^T c^{\rho-1}$ dado em (6.8), na condição primária de ordem p dada por:

$$\sum_{r=1}^{p-1} (-1)^r \binom{p-1}{r} v^T c^{p-1-r} = \frac{\xi^p - (-1)^p \xi \theta}{p} \quad (6.9)$$

podemos obter o valor da função $f_p(\xi)$, que depende somente de ξ .

Ainda, substituindo o valor de $f_p(\xi)$ calculado por (6.9) em (6.8) podemos expressar $v^T c^{\rho-1}$ na forma:

$$v^T c^{\rho-1} = f_\rho^p(\xi),$$

$\rho = 1, 2, \dots, p-1$, onde $f_\rho^p(\xi)$ são funções que também dependem somente de ξ .

Através do algoritmo dado acima desenvolvemos os cálculos necessários para encontrarmos os valores de $f_p(\xi)$ e $f_\rho^p(\xi)$ para $\rho = 1, 2, \dots, p-1$, $p = 2, 3, 4, 5$, conforme mostraremos a seguir.

1) Para métodos com ordem $p = 2$.

Seja $v + \xi^2 w = f_2(\xi)e^{(1)}$, onde $f_2(\xi)$ é a função que vamos determinar.

Considerando $\theta = 0$ e $p = 2$ obtemos o sistema:

$$\begin{cases} v^T c^{p-1} + \xi^2 w^T c^{p-1} = f_2(\xi) \delta_{2,2-p+1} \\ v^T c^{p-1} + \xi^p w^T c^{p-1} = \frac{\xi^p}{p} - v^T \sum_{r=1}^{p-1} (-1)^r \binom{p-1}{r} c^{p-1-r} \end{cases}, \text{ para } p = 1$$

Assim, resolvendo-o podemos expressar $v^T c^{p-1}$ como:

$$v^T c^{p-1} = \left[\xi^{2-p} \left(\frac{\xi^p}{p} - v^T \sum_{r=1}^{p-1} (-1)^r \binom{p-1}{r} c^{p-1-r} \right) - f_2(\xi) \delta_{2,2-p+1} \right] / (\xi^{2-p} - 1)$$

▪ Para $p = 1$ temos que:

$$v^T c^0 = [\xi \cdot \xi - f_2(\xi) \delta_{2,2}] / (\xi - 1) \Rightarrow v^T u = [\xi^2 - f_2(\xi) \delta_{2,2}] / (\xi - 1).$$

Mas $\delta_{2,2} = e^{(1)} c^{p-1} = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$. Assim, substituindo na expressão acima obtemos:

$$v^T u = \frac{\xi^2 - f_2(\xi)}{\xi - 1} \quad (6.10)$$

Substituindo (6.10) em (6.9) e considerando que $p = 2$, podemos encontrar o valor para $f_2(\xi)$, da seguinte forma:

$$\sum_{r=1}^{p-1} (-1)^r \binom{p-1}{r} v^T c^{p-1-r} = \frac{\xi^p - (-1)^p \xi \theta}{p} \Rightarrow \sum_{r=1}^1 (-1)^r \binom{1}{r} v^T c^{1-r} = \frac{\xi^2}{2} \Rightarrow v^T u = -\frac{\xi^2}{2}$$

$$\text{Logo, } \frac{\xi^2 - f_2(\xi)}{\xi - 1} = -\frac{\xi^2}{2} \Rightarrow f_2(\xi) = \frac{1}{2} \xi^2 (\xi + 1).$$

Ainda, substituindo $f_2(\xi)$ encontrado em (6.10) podemos expressar $v^T c^{p-1} = v^T u$ como

$$v^T u = f_1^2(\xi) = -\frac{\xi^2}{2}.$$

Portanto, para $p = 2$ e $\theta = 0$ obtemos os seguintes valores:

$$f_2(\xi) = \frac{1}{2}\xi^2(\xi+1),$$

$$f_1^2(\xi) = g_2(\xi),$$

$$g_2(\xi) = -\xi^2/2.$$

2) Para métodos com ordem $p = 3$.

Analogamente ao processo utilizado para métodos com ordem $p = 2$ vamos determinar $f_3(\xi)$.

Seja $v + \xi^3 w = f_3(\xi)e^{(1)}$ e para $\theta = 0$ consideremos o sistema:

$$\begin{cases} v^T c^{\rho-1} + \xi^3 w^T c^{\rho-1} = f_3(\xi) \delta_{3,3-\rho+1} \\ v^T c^{\rho-1} + \xi^\rho w^T c^{\rho-1} = \frac{\xi^\rho}{\rho} - v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} \end{cases} \text{ para } \rho = 1, 2.$$

Assim:

$$v^T c^{\rho-1} = \left[\xi^{3-\rho} \left(\frac{\xi^\rho}{\rho} - v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} \right) - f_3(\xi) \delta_{3,3-\rho+1} \right] / (\xi^{3-\rho} - 1)$$

▪ Para $\rho = 1$ temos que:

$$v^T c^0 = \left[\xi^2 \cdot \xi - f_3(\xi) \delta_{3,3} \right] / (\xi^2 - 1) \Rightarrow v^T u = \left[\xi^3 - f_3(\xi) \delta_{3,3} \right] / (\xi^2 - 1)$$

Mas $\delta_{3,3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1$. Logo substituindo na expressão anterior obtemos:

$$v^T u = \frac{\xi^3 - f_3(\xi)}{\xi^2 - 1} \quad (6.11)$$

▪ Para $\rho = 2$ temos que :

$$v^T c = \left[\xi(\xi^2/2 + v^T u) - f_3(\xi)\delta_{3,2} \right] / (\xi - 1)$$

Mas $\delta_{3,2} = (1 \ 0 \ 0) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0$, pois $c_1 = 0$. Assim, substituindo (6.11) e $\delta_{3,2} = 0$ obtemos :

$$v^T c = \frac{\xi^3(-1 + 2\xi + \xi^2) - 2\xi f_3(\xi)}{2(-1 + \xi)^2(1 + \xi)} \quad (6.12)$$

Substituindo (6.11) e (6.12) na condição primária de ordem $p = 3$, podemos encontrar o valor para $f_3(\xi)$, da seguinte forma:

$$\sum_{r=1}^2 (-1)^r \binom{2}{r} v^T c^{2-r} = \frac{\xi^3}{3} \Rightarrow v^T u - 2v^T c - \frac{\xi^3}{3} = 0$$

Logo:

$$\frac{\xi^3 + \xi^4 + \xi^5 - 3f_3(\xi)}{3(-1 + \xi)^2} = 0 \Rightarrow f_3(\xi) = \frac{1}{3}\xi^3(\xi^2 + \xi + 1)$$

Ainda, substituindo $f_3(\xi)$ em (6.11) e (6.12) podemos expressar $v^T c^{p-1}$ como:

$$v^T u = -\frac{\xi^3(2 + \xi)}{3(1 + \xi)} = f_1^3(\xi), \text{ para } p = 1$$

$$v^T c = -\frac{\xi^3(3 + 2\xi)}{6(1 + \xi)} = f_2^3(\xi), \text{ para } p = 2$$

Logo, para $p = 3$ e $\theta = 0$ obtemos os seguintes valores:

$$f_3(\xi) = \frac{1}{3}\xi^3(\xi^2 + \xi + 1),$$

$$f_1^3(\xi) = g_3(\xi)(\xi + 2),$$

$$f_2^3(\xi) = g_3(\xi)\left(\xi + \frac{3}{2}\right),$$

$$g_3(\xi) = -\xi^3 / (3(\xi + 1)).$$

3) Para métodos com ordem $p = 4$

Seja $v + \xi^4 w = f_4(\xi)e^{(1)}$ e para $\theta = 0$ consideremos o sistema:

$$\begin{cases} v^T c^{\rho-1} + \xi^4 w^T c^{\rho-1} = f_4(\xi) \delta_{4,4-\rho+1} \\ v^T c^{\rho-1} + \xi^\rho w^T c^{\rho-1} = \frac{\xi^\rho}{\rho} - v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r}, \text{ para } \rho = 1, 2 \text{ e } 3 \end{cases}$$

$$\text{Logo } v^T c^{\rho-1} = \left[\xi^{4-\rho} \left(\frac{\xi^\rho}{\rho} - v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} \right) - f_4(\xi) \delta_{4,4-\rho+1} \right] / (\xi^{4-\rho} - 1).$$

▪ Para $\rho = 1$ temos que:

$$v^T c^0 = [\xi^3 \cdot \xi - f_4(\xi) \delta_{4,4} / (\xi^3 - 1)] \Rightarrow v^T u = [\xi^4 - f_4(\xi) \delta_{4,4} / (\xi^3 - 1)]$$

Mas $\delta_{4,4} = e^{(1)} c^0 \Rightarrow \delta_{4,4} = 1$, então, substituindo na equação anterior obtemos:

$$v^T u = \frac{\xi^4 - f_4(\xi)}{\xi^3 - 1} \quad (6.13)$$

▪ Para $\rho = 2$ temos que:

$$v^T c = [\xi^2 (\xi^2/2 + v^T u) - f_4(\xi) \delta_{4,3} / (\xi^2 - 1)]$$

Mas $\delta_{4,3} = e^{(1)} c^1 \Rightarrow \delta_{4,3} = 0$, pois $c_1 = 0$. Assim, substituindo (6.13) e $\delta_{4,3} = 0$ obtemos:

$$v^T c = \frac{\xi^2 (-\xi^2 + 2\xi^4 + \xi^5) - 2\xi^2 f_4(\xi)}{2(-1 + \xi)^2 (1 + \xi)(1 + \xi + \xi^2)} \quad (6.14)$$

▪ Para $\rho = 3$ temos que:

$$v^T c^2 = [\xi (\xi^3/3 + 2v^T c - v^T u) - f_4(\xi) \delta_{4,2} / (\xi - 1)].$$

Mas $\delta_{4,2} = e^{(1)} c^2 \Rightarrow \delta_{4,2} = 0$, pois $c_1 = 0$. Assim, substituindo (6.13), (6.14) e $\delta_{4,2} = 0$ na expressão anterior temos :

$$v^T c^2 = \frac{\xi(\xi^3 - \xi^5 + 2\xi^6 + 3\xi^7 + \xi^8) - (3 + 3\xi^2)f_4(\xi)}{3(-1 + \xi)^3(1 + \xi)(1 + \xi + \xi^2)} \quad (6.15)$$

Substituindo (6.13), (6.14) e (6.15) na condição primária de ordem $p = 4$, podemos encontrar o valor para $f_4(\xi)$, da seguinte forma:

$$\sum_{r=1}^3 (-1)^r \binom{3}{r} v^T c^{3-r} = \frac{\xi^4}{4} \Rightarrow -3v^T c^2 + 3v^T c - v^T u - \frac{\xi^4}{4} = 0$$

Portanto:

$$\frac{\xi^4 + \xi^5 + \xi^6 + \xi^7 - 4f_4(\xi)}{4(-1 + \xi)^3} = 0 \Rightarrow f_4(\xi) = \frac{1}{4}\xi^4(\xi^3 + \xi^2 + \xi + 1)$$

Ainda, substituindo $f_4(\xi)$ em (6.13), (6.14) e (6.15) podemos expressar $v^T c^{p-1}$ como:

$$v^T u = -\frac{\xi^4(3 + 2\xi + \xi^2)}{4(1 + \xi + \xi^2)} = f_1^4(\xi), \text{ para } \rho = 1$$

$$v^T c = -\frac{\xi^3(2 + 2\xi + \xi^2)}{4(1 + \xi + \xi^2)} = f_2^4(\xi), \text{ para } \rho = 2$$

$$v^T c^2 = -\frac{\xi^4(4 + 5\xi + 3\xi^2)}{12(1 + \xi + \xi^2)} = f_3^4(\xi), \text{ para } \rho = 3$$

Logo para $p = 4$ e $\theta = 0$:

$$f_4(\xi) = \frac{1}{4}\xi^4(\xi^3 + \xi^2 + \xi + 1),$$

$$f_1^4(\xi) = g_4(\xi)(\xi^2 + 2\xi + 3),$$

$$f_2^4(\xi) = g_4(\xi)(\xi^2 + 2\xi + 2),$$

$$f_3^4(\xi) = g_4(\xi)(\xi^2 + \frac{5}{3}\xi + \frac{4}{3}),$$

$$g_4(\xi) = -\xi^4 / (4(\xi^2 + \xi + 1)).$$

4) Para métodos com ordem $p = 5$.

Seja $v + \xi^5 w = f_5(\xi)e^{(1)}$ e para $\theta = 0$ consideremos o sistema:

$$\begin{cases} v^T c^{\rho-1} + \xi^5 w^T c^{\rho-1} = f_5(\xi) \delta_{5,5-\rho+1} \\ v^T c^{\rho-1} + \xi^5 w^T c^{\rho-1} = \frac{\xi^\rho}{\rho} - v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r}, \text{ para } \rho = 1, 2, 3 \text{ e } 4 \end{cases}$$

Logo:

$$v^T c^{\rho-1} = \left[\xi^{5-\rho} \left(\frac{\xi^\rho}{\rho} - v^T \sum_{r=1}^{\rho-1} (-1)^r \binom{\rho-1}{r} c^{\rho-1-r} \right) - f_5(\xi) \delta_{5,5-\rho+1} \right] / (\xi^{5-\rho} - 1).$$

- Para $\rho = 1$ temos que:

$$v^T u = \left[\xi^5 - f_5(\xi) \delta_{5,5} \right] / (\xi^4 - 1)$$

Mas $\delta_{5,5} = e^{(1)} c^0 \Rightarrow \delta_{5,5} = 1$, então, substituindo na equação anterior obtemos:

$$v^T u = \frac{\xi^5 - f_5(\xi)}{\xi^4 - 1} \quad (6.16)$$

- Para $\rho = 2$ temos que:

$$v^T c = \left[\xi^3 (\xi^2/2 + v^T u) - f_5(\xi) \delta_{5,4} \right] / (\xi^3 - 1)$$

Substituindo $\delta_{5,4} = e^{(1)} c \Rightarrow \delta_{5,4} = 0$ e (6.16) obtemos:

$$v^T c = \frac{\xi^3 (-\xi^2 + 2\xi^5 + \xi^6) - 2\xi^3 f_5(\xi)}{2(-1 + \xi)^2 (1 + \xi)(1 + \xi^2)(1 + \xi + \xi^2)} \quad (6.17)$$

- Para $\rho = 3$ temos que:

$$v^T c^2 = \left[\xi^2 (\xi^3/3 + 2v^T c - v^T u) - f_5(\xi) \delta_{5,3} \right] / (\xi - 1)$$

Substituindo $\delta_{5,3} = e^{(1)}c^2 \Rightarrow \delta_{5,3} = 0$, (6.16) e (6.17) obtemos:

$$v^T c^2 = \frac{\xi^2(\xi^3 - \xi^4 + \xi^5 - 2\xi^6 + \xi^7 + 2\xi^8 + \xi^9 - (3 - 3\xi + 3\xi^2)f_5(\xi))}{3(-1 + \xi)^3(1 + \xi)(1 + \xi^2)(1 + \xi + \xi^2)} \quad (6.18)$$

▪ Para $\rho = 4$ obtemos:

$$v^T c^3 = \frac{\xi(-\xi^4 + 3\xi^5 - 2\xi^6 + 5\xi^7 + \xi^9 + 2\xi^{10} + 3\xi^{11} + \xi^{12} - (1 - \xi + 3\xi^2 - \xi^3 + \xi^4)4f_5(\xi))}{4(-1 + \xi)^4(1 + \xi)(1 + \xi^2)(1 + \xi + \xi^2)} \quad (6.19)$$

Substituindo os valores de (6.16), (6.17), (6.18) e (6.19) na condição primária de ordem $p = 5$, dada por :

$$\sum_{r=1}^4 (-1)^r \binom{4}{r} v^T c^{4-r} = \frac{\xi^5}{5} \Rightarrow -4v^T c^3 + 6v^T c^2 - 4v^T c + v^T u - \frac{\xi^5}{5} = 0$$

podemos encontrar o valor para $f_5(\xi)$:

$$f_5(\xi) = \frac{1}{5}\xi^5(\xi^4 + \xi^3 + \xi^2 + \xi + 1)$$

Ainda, substituindo $f_5(\xi)$ em (6.16), (6.17), (6.18) e (6.19) podemos expressar $v^T c^{p-1}$ como:

$$v^T u = -\frac{\xi^5(\xi^5 + 3\xi^4 + 6\xi^3 + 9\xi^2 + 7\xi + 4)}{5(1 + \xi + \xi^2 + \xi^3)(1 + \xi + \xi^2)} = f_1^5(\xi), \text{ para } \rho = 1,$$

$$v^T c = -\frac{\xi^5(2\xi^5 + 6\xi^4 + 12\xi^3 + 15\xi^2 + 10\xi + 5)}{10(1 + \xi + \xi^2 + \xi^3)(1 + \xi + \xi^2)} = f_2^5(\xi), \text{ para } \rho = 2,$$

$$v^T c^2 = -\frac{\xi^5(3\xi^5 + 9\xi^4 + 16\xi^3 + 17\xi^2 + 10\xi + 5)}{15(1 + \xi + \xi^2 + \xi^3)(1 + \xi + \xi^2)} = f_3^5(\xi), \text{ para } \rho = 3,$$

$$v^T c^3 = -\frac{\xi^5(4\xi^5 + 11\xi^4 + 17\xi^3 + 16\xi^2 + 9\xi + 5)}{20(1 + \xi + \xi^2 + \xi^3)(1 + \xi + \xi^2)} = f_4^5(\xi), \text{ para } \rho = 4.$$

Logo para $p = 5$ e $\theta = 0$ obtemos os seguintes valores:

$$f_5(\xi) = \frac{1}{5}\xi^5(\xi^4 + \xi^3 + \xi^2 + \xi + 1),$$

$$f_1^5(\xi) = g_5(\xi)(\xi^5 + 3\xi^4 + 6\xi^3 + 9\xi^2 + 7\xi + 4),$$

$$f_2^5(\xi) = g_5(\xi)(\xi^5 + 3\xi^4 + 6\xi^3 + \frac{15}{2}\xi^2 + 5\xi + \frac{5}{2}),$$

$$f_3^5(\xi) = g_5(\xi)(\xi^5 + 3\xi^4 + \frac{16}{3}\xi^3 + \frac{17}{3}\xi^2 + \frac{10}{3}\xi + \frac{5}{3}),$$

$$f_4^5(\xi) = g_5(\xi)(\xi^5 + \frac{11}{4}\xi^4 + \frac{17}{4}\xi^3 + 4\xi^2 + \frac{9}{4}\xi + \frac{5}{4}),$$

$$g_5(\xi) = -\xi^5 / (5(\xi^2 + \xi + 1)(\xi^3 + \xi^2 + \xi + 1)).$$

Concluindo, para construirmos o par de métodos embutidos definido na seção 6.2, partimos de um método de Runge-Kutta contínuo de ordem $p-1$ e construímos o método TSRK de ordem p associado a ele, que deve satisfazer às seguintes relações:

$$\begin{cases} v + \xi^p w = f_p(\xi)e^{(1)} \\ v^T c^{p-1} = f_p^p(\xi) \end{cases} \quad (6.20)$$

onde $\rho = 1, 2, \dots, p-1$, para $p = 2, 3, 4$ e 5 . Observe que $f_p(\xi)$ e $f_p^p(\xi)$ são funções que dependem de ξ e que acabamos de determinar.

6.4 Construção de um particular par embutido

Através da teoria descrita na seção anterior, como ilustração, construiremos um par de métodos embutidos do tipo (6.1). Para isso consideramos o seguinte teorema formulado por Jackiewicz e Zennaro:

Teorema 6.2: Para cada método de Runge-Kutta contínuo com s estágios e ordem $p-1 \geq 2$, existe um método TSRK com s estágios e ordem p , a passo de integração variável, tendo em comum com o método de Runge-Kutta os elementos do vetor c e da matriz A .

Consideremos o método de Runge-Kutta contínuo com ordem 3 e 4 estágios dado por:

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
1	-1	2		
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$	
	$b_1(\eta)$	$b_2(\eta)$	$b_3(\eta)$	$b_4(\eta)$

onde

$$b_1(\eta) = \frac{2}{3}\eta^3 - \frac{3}{2}\eta^2 + \eta$$

$$b_2(\eta) = -\frac{4}{3}\eta^3 + 2\eta^2$$

$$b_3(\eta) = -\frac{1}{3}\eta^3 + \frac{1}{2}\eta^2$$

$$b_4(\eta) = \eta^3 - \eta^2$$

Pelo teorema 6.2, podemos construir associado a ele, um método TSRK com 4 estágios e ordem 4, que tenha em comum os coeficientes da matriz A e do vetor c .

Considerando (6.20), temos que o método TSRK deve satisfazer às seguintes relações:

$$\begin{aligned} v + \xi^4 w &= f_4(\xi)e^{(1)} \\ v^T c^0 &= f_1^4(\xi) \\ v^T c^1 &= f_2^4(\xi) \\ v^T c^2 &= f_3^4(\xi) \end{aligned} \tag{6.21}$$

Substituindo em (6.21), os valores de $f_4(\xi)$, $f_1^4(\xi)$, $f_2^4(\xi)$ e $f_3^4(\xi)$ encontrados na seção 6.3 e o vetor c do método de Runge-Kutta contínuo de ordem 3, obtemos o sistema:

$$v_1 + \xi^4 w_1 = \frac{1}{4}\xi^4(\xi^3 + \xi^2 + \xi + 1)$$

$$v_2 + \xi^4 w_2 = 0$$

$$v_3 + \xi^4 w_3 = 0$$

$$v_4 + \xi^4 w_4 = 0$$

$$v_1 + v_2 + v_3 + v_4 = \frac{\xi^4 (\xi^2 + 2\xi + 3)}{4(\xi^2 + \xi + 1)}$$

$$\frac{1}{2} v_2 + v_3 + v_4 = -\frac{\xi^4 (\xi^2 + 2\xi + 2)}{4(\xi^2 + \xi + 1)}$$

$$\frac{1}{4} v_2 + v_3 + v_4 = -\frac{\xi^4 (\xi^2 + \frac{5}{3}\xi + \frac{4}{3})}{4(\xi^2 + \xi + 1)}$$

onde para simplificar denotamos $v_i(\xi)$ e $w_i(\xi)$ respectivamente por v_i e w_i , $i = 1(1)4$.

Considerando ξ como um valor constante, a partir da resolução do sistema acima, encontramos os valores:

$$\begin{aligned} w_1 &= -\frac{-2 - 4\xi - 9\xi^2 - 9\xi^3 - 6\xi^4 - 3\xi^5}{12(\xi^2 + \xi + 1)}, & v_1 &= -\frac{-\xi^4 - 2\xi^5}{12(\xi^2 + \xi + 1)}, \\ w_2 &= -\frac{-2 - \xi}{3(\xi^2 + \xi + 1)}, & v_2 &= -\frac{2\xi^4 + \xi^5}{3(\xi^2 + \xi + 1)}, \\ w_3 &= -\frac{-2 - 4\xi - 3\xi^2}{12(\xi^2 + \xi + 1)} + \frac{v_4}{\xi^4}, & v_3 &= -\frac{-2\xi^4 + 4\xi^5 + 3\xi^6}{12(\xi^2 + \xi + 1)} - v_4, \\ w_4 &= -\frac{v_4}{\xi^4}. \end{aligned}$$

Considerando $v_4 = g_4(\xi^2 + \xi) = -\frac{\xi^4 (\xi^2 + \xi)}{4(\xi^2 + \xi + 1)}$, determinamos os valores de

$v_i(\xi)$ e $w_i(\xi)$ encontrados por Jackiewicz e Zennaro que são:

$$\begin{aligned} v_1(\xi) &= -\frac{-\xi^4 - 2\xi^5}{12(\xi^2 + \xi + 1)}, & w_1(\xi) &= -\frac{1}{4}(\xi^3 + \xi^2 + \xi + 1) - \frac{1 + 2\xi}{12(\xi^2 + \xi + 1)}, \\ v_2(\xi) &= -\frac{2\xi^4 + \xi^5}{3(\xi^2 + \xi + 1)}, & w_2(\xi) &= -\frac{-2 - \xi}{3(\xi^2 + \xi + 1)}, \\ v_3(\xi) &= -\frac{-\xi^4 (2 + \xi)}{12(\xi^2 + \xi + 1)}, & w_3(\xi) &= \frac{2 + \xi}{3(\xi^2 + \xi + 1)}, \\ v_4(\xi) &= -\frac{\xi^4 (\xi^2 + \xi)}{4(\xi^2 + \xi + 1)}, & w_4(\xi) &= \frac{\xi^2 + \xi}{4(\xi^2 + \xi + 1)}. \end{aligned}$$

Portanto, a partir de um método de Runge-Kutta contínuo com 4 estágios e ordem 3 obtivemos um método TSRK com 4 estágios e ordem 4, a ele associado, dado por:

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
1	-1	2		
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$	
	$b_1(\eta)$	$b_2(\eta)$	$b_3(\eta)$	$b_4(\eta)$
0	$v_1(\xi)$	$v_2(\xi)$	$v_3(\xi)$	$v_4(\xi)$
	$w_1(\xi)$	$w_2(\xi)$	$w_3(\xi)$	$w_4(\xi)$

No próximo capítulo iremos discutir o desempenho computacional de métodos de Runge-Kutta contínuos associados a métodos TSRK, onde os TSRK serão considerados como uma ferramenta para estimar o erro de truncamento local dos métodos de Runge-Kutta.

7.1 Introdução

Para uma partícula p de massa m em movimento sob a ação de uma força F , a equação de movimento é dada por $m \ddot{x} = F(x, \dot{x}, t)$. A solução exata desta equação é geralmente desconhecida, sendo necessário recorrer a métodos numéricos para obter uma aproximação da solução. Neste capítulo, vamos apresentar alguns dos métodos mais utilizados para a solução de problemas de valor inicial de equações diferenciais ordinárias (EDOs).

Também discutiremos a influência da escolha dos métodos para a solução de problemas de valor inicial de equações diferenciais ordinárias (EDOs). Finalmente, apresentaremos a metodologia de trabalho com métodos de Runge-Kutta para a solução de problemas de valor inicial de equações diferenciais ordinárias (EDOs).

AVALIAÇÃO COMPUTACIONAL

7.1 Introdução

Para um particular par de métodos embutidos da classe definida no capítulo anterior, desenvolvemos uma avaliação computacional, considerando problemas testes cuja solução exata é conhecida. Alguns desses resultados numéricos serão apresentados neste capítulo. No sentido de ilustrar seu desempenho quanto ao número de avaliações da derivada do pvi, apresentamos resultados comparativos com os produzidos utilizando o código RKF45.

Também discutiremos a influência da estratégia considerada para o controle do tamanho do passo de integração. Finalmente, mostraremos a vantagem de se trabalhar com métodos dessa classe para a resolução de problemas com saída densa.

7.2 O método avaliado

Como vimos na seção 6.2 podemos considerar pares embutidos de métodos onde a um método de Runge-Kutta com extensão contínua de ordem p associa-se um método TSRK de ordem $p+1$. Consideremos um particular par de métodos dessa classe com ordens 4 e 5 respectivamente e 6 estágios, que aqui denotaremos por TSRK e que tem a seguinte representação de Butcher:

$$\begin{array}{c|cccccc} 0 & & & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & & & & \\ 1 & 0 & -1 & 2 & & & \\ \frac{3}{4} & \frac{3}{16} & 0 & \frac{9}{16} & 0 & & \\ 1 & \frac{1}{6} & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & \end{array} \quad (7.1)$$

$$\begin{array}{c|cccccc} & b_1(\eta) & b_2(\eta) & b_3(\eta) & b_4(\eta) & b_5(\eta) & b_6(\eta) \\ \hline 0 & v_1(\xi) & v_2(\xi) & v_3(\xi) & v_4(\xi) & v_5(\xi) & v_6(\xi) \\ & w_1(\xi) & w_2(\xi) & w_3(\xi) & w_4(\xi) & w_5(\xi) & w_6(\xi) \end{array}$$

onde

$$\begin{aligned} b_1(\eta) &= \eta \left(\frac{2}{3} \eta^3 + 2\eta^2 - \frac{13}{6} \eta + 1 \right), & b_2(\eta) &= 0, \\ b_3(\eta) &= \eta^2 \left(4\eta^2 - \frac{28}{3} \eta + 6 \right), & b_4(\eta) &= \eta^2 \left(\eta^2 - \frac{7}{3} \eta + \frac{3}{2} \right), \\ b_5(\eta) &= \eta^2 \left(-\frac{16}{3} \eta^2 - \frac{32}{3} \eta - \frac{16}{3} \right), & b_6(\eta) &= \eta^3 (\eta - 1), \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} v_1(\xi) &= g_5(\xi) \left(\frac{2}{3} \xi^4 + \frac{2}{3} \xi^3 - \frac{1}{6} \xi^2 - \frac{2}{3} \xi - \frac{1}{6} \right), \\ v_2(\xi) &= 0, \\ v_3(\xi) &= g_5(\xi) \left(-4\xi^4 - \frac{28}{3} \xi^3 - \frac{14}{3} \xi^2 + \frac{8}{3} \xi + \frac{10}{3} \right), \\ v_4(\xi) &= \frac{1}{4} v_3(\xi), \\ v_5(\xi) &= g_5(\xi) \left(\frac{16}{3} \xi^4 + 16\xi^3 + 16\xi^2 + \frac{16}{3} \xi \right), \\ v_6(\xi) &= g_5(\xi) (\xi^5 + 2\xi^4 + \xi^3 - \xi^2 - \xi), \\ w_1(\xi) &= \frac{f_5(\xi) - v_1(\xi)}{\xi^5}, \\ w_i(\xi) &= -\frac{v_i(\xi)}{\xi^5}, \quad i = 2, 3, 4, 5, 6. \end{aligned}$$

com

$$g_5(\xi) = -\xi^5 / (5(\xi^2 + \xi + 1)(\xi^3 + \xi^2 + \xi + 1)).$$

7.3 As estratégias de controle do passo

Como vimos no capítulo 2, diferentes estratégias podem ser consideradas quando trabalhamos com integração a passo variável.

Procurando caracterizar a importância de uma boa escolha da estratégia implementamos o par TSRK considerando as três estratégias que apresentamos no capítulo 2.

A estratégia que denominamos "controle 01" foi por nós considerada apenas para melhor ilustrar as consequências de se trabalhar com um controle ineficiente para o erro. Ela considera $h_{\text{novo}} = 0.1 \times h_{\text{anterior}}$ para passo rejeitado e $h_{\text{novo}} = 2.0 \times h_{\text{anterior}}$ para passo aceito.

Denominamos "controle 02" à estratégia que considera $h_{\text{novo}} = 0.5 \times h_{\text{anterior}}$ quando o passo é rejeitado e $h_{\text{novo}} = 2.0 \times h_{\text{anterior}}$ quando o passo é aceito.

Finalmente, denominamos "controle 03" à estratégia considerada por Shampine e outros [17] e [18] na implementação do código RKF45. Essa estratégia considera $h_{\text{novo}} = \alpha \times h_{\text{anterior}}$ onde α é determinado em função da relação entre $\|y_{n+1} - y_{n+1}^*\|$ e TOL.

Os resultados dessa avaliação são apresentados nos dois exemplos a seguir, que traduzem o desempenho apresentado por cada estratégia em vários problemas integrados.

As tabelas a seguir apresentam o número total de passos, de passos aceitos, de passos rejeitados, a porcentagem de passos rejeitados e o número de avaliações da derivada, quando consideramos a utilização dos controles de tamanho de passo 01, 02 e 03 para o par TSRK, exigindo-se 5 casas de precisão. Para uma melhor visualização da diferença do comportamento entre os controles 01 e 03, plotaremos as aproximações da solução exata até o ponto final desejado, quando utilizamos os mesmos.

Problema 1: $y' = y \cos(x)$, $y(0) = 1$

$$y(x) = e^{\sin(x)}$$

$$I = [0,10]$$

Controle	Nº de passos aceitos	Nº de passos rejeitados	Nº de passos realizados	% de passos rejeitados	Nº de avaliaç. da função
01	120	34	154	22.0	924
02	62	55	117	47.0	702
03	59	08	67	11.9	402

Os gráficos a seguir apresentaram a aproximação gerada para a solução considerando-se respectivamente as estratégias de controle 01 e 03. Através deles podemos rapidamente visualizar o comportamento de cada estratégia. Observe que ambos nos dão uma boa visão do comportamento da solução numérica, mostrando que ao utilizarmos o controle 01 a integração avança a passos bem menores do que quando consideramos o controle 03.

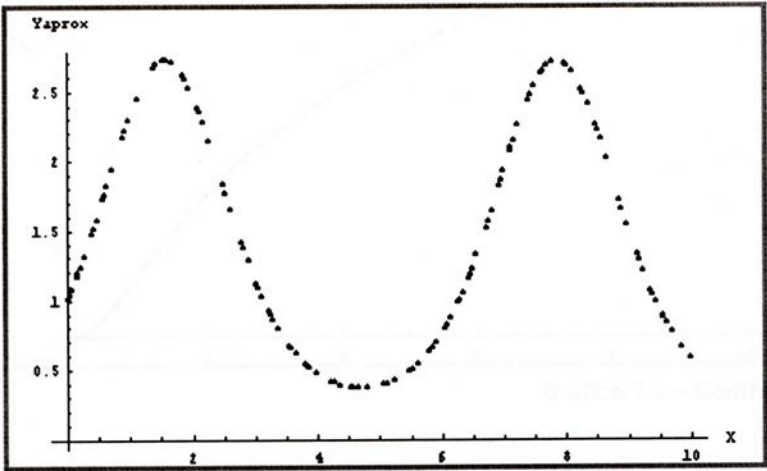


Gráfico 7.1 – Controle 01

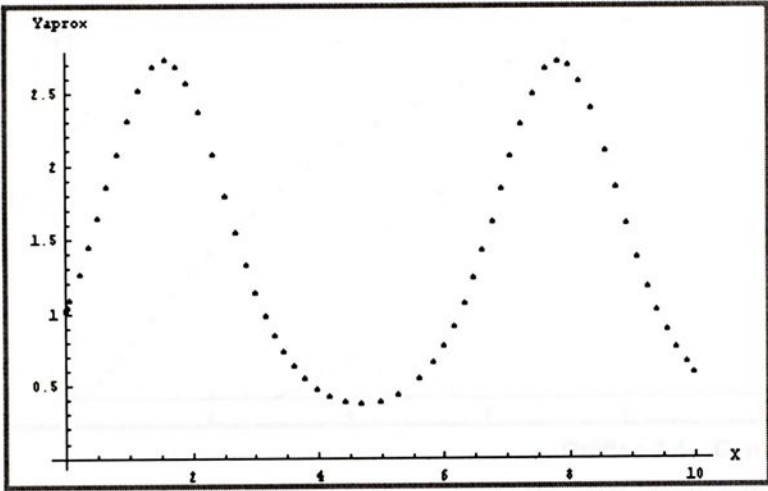


Gráfico 7.2 – Controle 03

Problema 2: $y' = xe^{-y} + \frac{x}{1+x^2}$, $y(0) = 0$

$y(x) = \ln(1+x^2)$

$I = [0,10]$

Controle	Nº de passos aceitos	Nº de passos rejeitados	Nº de passos realizados	% de passos rejeitados	Nº de avaliaç. da função
01	105	29	134	21.6	804
02	27	17	44	38.6	264
03	26	05	31	16.1	186

Como no exemplo anterior, apresentamos a seguir o gráfico da aproximação para a solução do problema 2, considerando respectivamente as estratégias 01 e 03

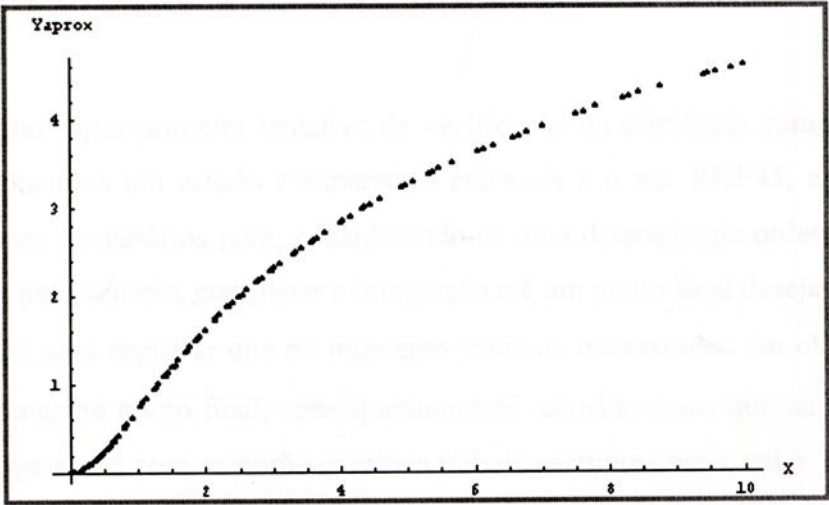


Gráfico 7.3 – Controle 01

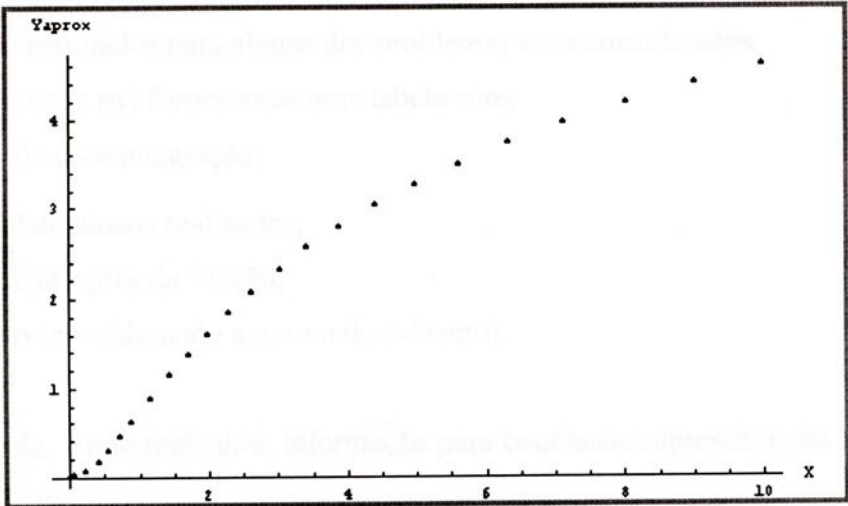


Gráfico 7.4 – Controle 03

Como esperávamos o controle 03 mostrou-se mais eficiente, como estratégia para definição do tamanho do passo de integração. Podemos justificar essas diferenças de desempenho pelo fato de que, nos controles 01 e 02 o passo sempre aumenta ou diminui a um fator constante, o que nos leva a reduções desnecessárias do tamanho do passo de integração ou a aumentos que podem ocasionar rejeições nos passos seguintes, aumentando portanto o número de avaliações da derivada e tornando o processo menos estável.

Portanto, daqui em diante, sempre que utilizarmos o par TSRK, estaremos considerando o controle 03, como estratégia para definição do tamanho do passo de integração.

7.4 Comparação entre os pares TSRK e RKF45

Como uma primeira tentativa de verificação da eficiência computacional do par TSRK, realizamos um estudo comparativo entre ele e o par RKF45, em relação ao número de passos necessários para, considerando-se uma determinada ordem de precisão (TOL) definida pelo usuário, completar a integração até um ponto final desejado.

Cabe aqui registrar que no momento estamos interessados em obter a solução aproximada apenas no ponto final, conseqüentemente consideramos que no par TSRK, o método de Runge-Kutta com extensão contínua trabalha sempre com o valor η constante e igual a 1.

A seguir ilustraremos a comparação entre esses dois pares de métodos, apresentando os resultados para alguns dos problemas teste considerados.

Para cada pvi fornecemos uma tabela com:

- x_f - ponto final de integração;
- número total de passos realizados;
- número de avaliações da função;
- erro absoluto (considerando a norma do máximo).

Ainda, como mais uma informação para conclusões apresentamos o gráfico da solução exata do pvi.

Exemplo 7.1

$y' = 4x\sqrt{y}, \quad y(0) = 1$

$y(x) = (1 + x^2)^2$

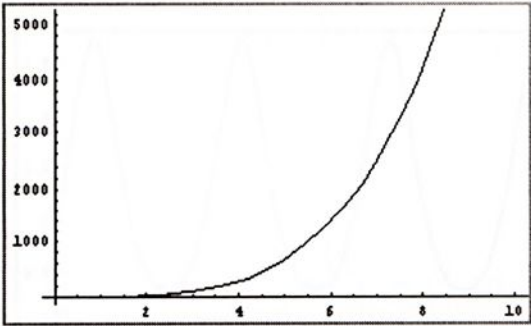


Gráfico 7.1 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	5.0	157	942	3.4453034E-007
RKF45	5.0	172	1032	4.9835644E-007

Exemplo 7.2

$y' = (4x - 1)(8x^2 - 2x + 8) - 2xy, \quad y(0) = 2$

$y(x) = e^{-x^2} + 16(x - \frac{1}{4})^2$

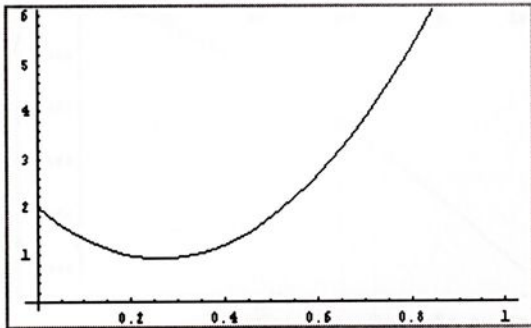


Gráfico 7.2 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	50.0	17606	105636	5.9138685E-009
RKF45	50.0	18314	109884	3.7644945E-009

Exemplo 7.3

$y' = x(1 - y) + (1 - x)e^{-x}, \quad y(0) = 1$

$y(x) = e^{-(x^2/2)} - e^{-x} + 1$

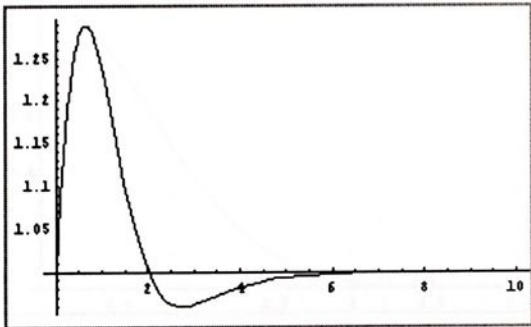


Gráfico 7.3 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	20.0	220	1320	3.2199141E-010
RKF45	20.0	237	1422	5.2984465E-010

Exemplo 7.4

$y' = y \cos(x), y(0) = 1$

$y(x) = e^{\text{sen}(x)}$

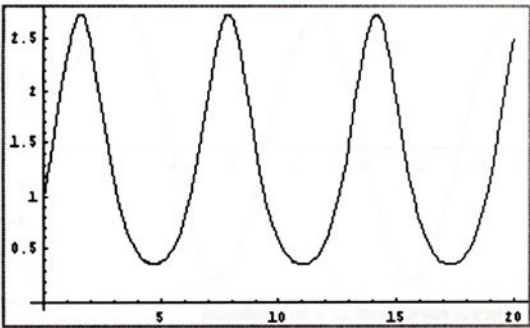


Gráfico 7.4 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	20.0	403	2418	4.5850551E-007
RKF45	20.0	327	1962	1.8543857E-007

Exemplo 7.5

$y' = \frac{3x^2 + 4x + 2}{2(y - 1)}, y(0) = -1$

$y(x) = 1 - \sqrt{4 + 2x + 2x^2 + x^3}$

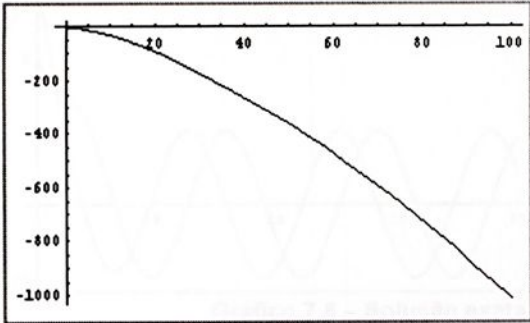


Gráfico 7.5 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	100.0	185	1110	3.3392101E-008
RKF45	100.0	186	1116	2.2274677E-008

Exemplo 7.6

$y' = -2xy, y(0) = 1$

$y(x) = e^{-x^2}$

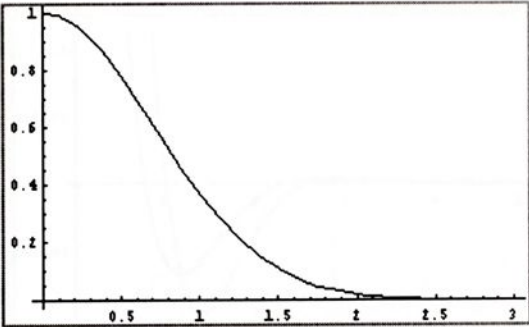


Gráfico 7.6 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	40.0	797	4782	6.0877491E-010
RKF45	40.0	676	4056	2.5164501E-010

Exemplo 7.7

$$y' = \text{sen}(x) - y, \quad y(0) = 0.5$$

$$y(x) = \frac{1}{2}(\text{sen}(x) - \cos(x)) + e^{-x}$$

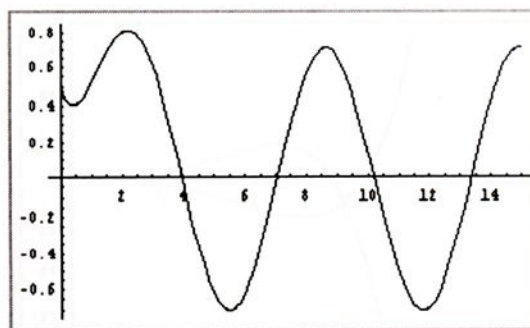


Gráfico 7.7 - Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	25.0	378	2268	4.1445518E-009
RKF45	25.0	393	2358	7.8146514E-009

Exemplo 7.8

$$\begin{cases} y_1' = -2y_1 + y_2 + 2\text{sen}(x) \\ y_2' = y_1 - 2y_2 + 2(\cos(x) - \text{sen}(x)) \end{cases} \quad \begin{matrix} y_1(0) = 2 \\ y_2(0) = 3 \end{matrix}$$

$$y_1(x) = 2e^{-x} + \text{sen}(x)$$

$$y_2(x) = 2e^{-x} + \cos(x)$$

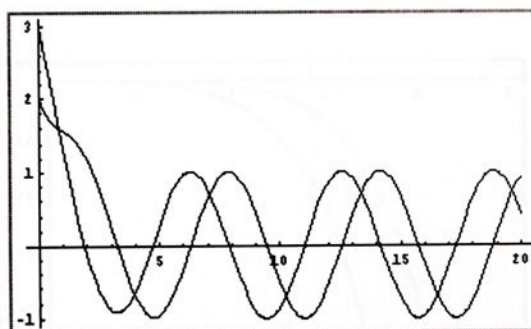


Gráfico 7.8 - Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	30.0	865	10380	6.5944815E-009
RKF45	30.0	899	10788	4.3911794E-009

Exemplo 7.9

$$\begin{cases} y_1' = y_1 - y_2 \\ y_2' = 5y_1 - 3y_2 \end{cases} \quad \begin{matrix} y_1(0) = 1 \\ y_2(0) = 2 \end{matrix}$$

$$y_1(x) = \cos(x)e^{-x}$$

$$y_2(x) = (2\cos(x) + \text{sen}(x))e^{-x}$$

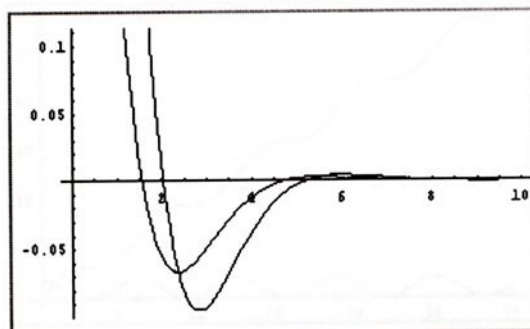


Gráfico 7.9 - Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	100.0	209	2508	2.9692314E-009
RKF45	100.0	191	2292	1.5618983E-009

Exemplo 7.10

$$\begin{cases} y_1' = 4y_1 + 5y_2 + 4e^x \cos(x) & y_1(0) = 0 \\ y_2' = -2y_1 - 2y_2 & y_2(0) = 0 \end{cases}$$

$$y_1(x) = 2(x \cos(x) + \sin(x))e^{-x}$$
$$y_2(x) = -4x \sin(x)e^{-x}$$

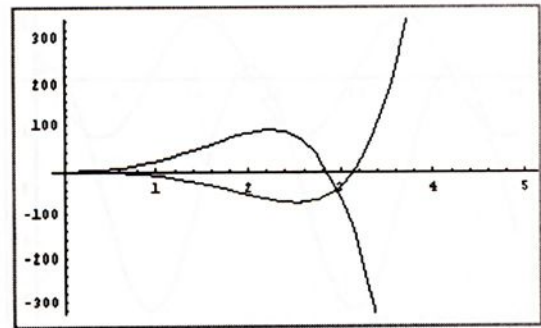


Gráfico 7.10 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	3.0	151	1812	1.2277697E-007
RKF45	3.0	166	1992	1.0826933E-007

Exemplo 7.11

$$\begin{cases} y_1' = 3y_1 - 4y_2 + e^x & y_1(0) = 1 \\ y_2' = y_1 - y_2 + e^x & y_2(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = (1 - x - x^2)e^x$$
$$y_2(x) = (1 - 0.5x^2)e^x$$

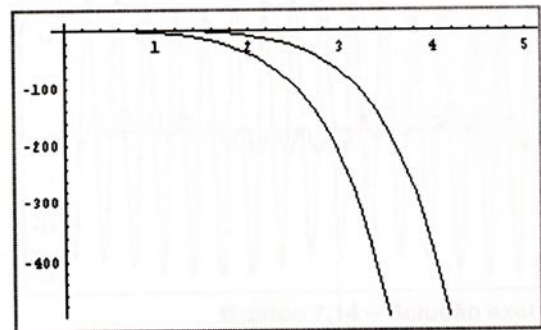


Gráfico 7.11 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	3.0	147	1764	1.9795193E-007
RKF45	3.0	160	1920	3.4471291E-007

Exemplo 7.12

$$\begin{cases} y_1' = y_2 & y_1(0) = 0 \\ y_2' = x - y_1 & y_2(0) = 2 \end{cases}$$

$$y_1(x) = x + \sin(x)$$
$$y_2(x) = 1 + \cos(x)$$

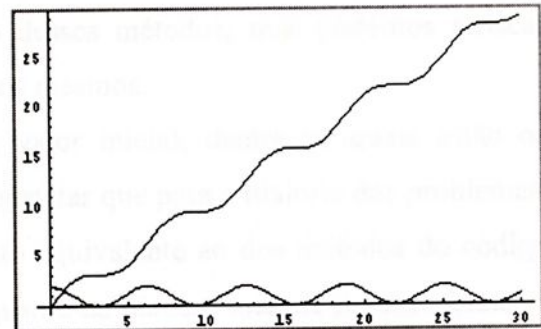


Gráfico 7.12 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	30.0	502	6024	1.6423590E-007
RKF45	30.0	545	6540	3.5941134E-007

Exemplo 7.13

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = \frac{-2 - y_1}{4} \end{cases} \quad \begin{matrix} y_1(0) = 0 \\ y_2(0) = 0.5 \end{matrix}$$

$$y_1(x) = -2 + 2\cos(x/2) + \sin(x/2)$$
$$y_2(x) = -\sin(x/2) + (1/2)\cos(x/2)$$

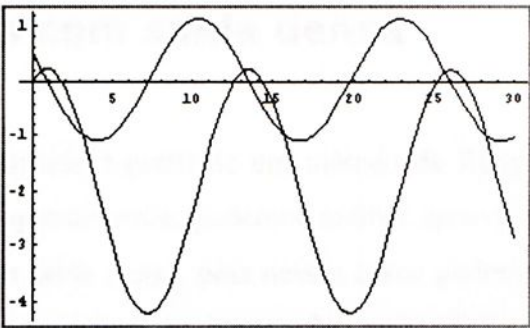


Gráfico 7.13 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	30.0	281	3372	3.9004510E-007
RKF45	30.0	303	3636	2.5854512E-007

Exemplo 7.14

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = -100y_1 + 99\sin(x) \end{cases} \quad \begin{matrix} y_1(0) = 1 \\ y_2(0) = 11 \end{matrix}$$

$$y_1(x) = \cos(10x) + \sin(10x) + \sin(x)$$
$$y_2(x) = \cos(x) + 10\cos(10x) - 10\sin(10x)$$

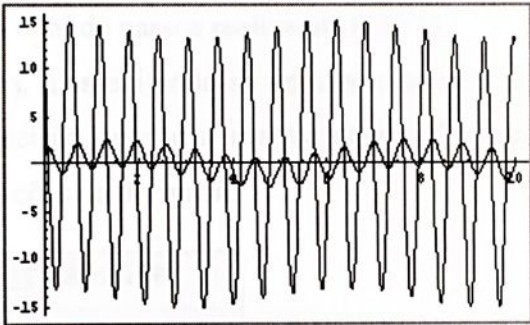


Gráfico 7.14 – Solução exata

Método	xf	Total de passos	Avaliações da função	Erro absoluto
TSRK	10.0	2565	30780	1.4315001E-007
RKF45	10.0	2799	33588	3.6714281E-007

Da avaliação computacional não podemos tirar conclusões que possam ser consideradas como padrões de comportamento desses métodos, mas podemos arriscar algumas considerações quanto ao desempenho dos mesmos.

Após integrar vários problemas de valor inicial, dentre os quais estão os apresentados nas tabelas anteriores, é possível constatar que para a maioria dos problemas, o par de métodos TSRK teve um comportamento equivalente ao dos métodos do código RKF45, ocorrendo apenas pequenas diferenças quanto ao número total de passos efetuados por cada um deles.

Conforme apresentaremos na próxima seção, a grande vantagem do par TSRK em relação ao RKF45 está na resolução de problemas com saída densa..

7.5 Resolução de problemas com saída densa

O par TSRK dado em (7.1) foi construído a partir de um método de Runge-Kutta de ordem 4 com extensão contínua. Consequentemente, podemos melhor aproveitar essa característica ao integrarmos problemas com saída densa, pois nesses casos podemos encontrar a solução em vários pontos internos ao passo de integração, sem nenhuma avaliação adicional da derivada, utilizando-se um processo análogo ao descrito na seção 1.4.

Observando o problema 7.7 do parágrafo anterior constatamos que para obtermos a solução aproximada apenas no ponto final $x_f = 25.0$, através do par TSRK, com uma precisão de 7 casas decimais, o número total de passos realizados foi 378.

Se considerarmos o mesmo problema, mas exigindo-se uma aproximação em 10 pontos distintos (tabela 1) e com a mesma precisão, conforme mostra a tabela 2 abaixo, efetuamos o mesmo número de passos e de avaliações da derivada:

x	Erro absoluto
2.5	9.1158269E-009
5.7	4.7458790E-009
7.5	2.6488743E-008
10.8	1.8494171E-008
12.5	1.1526657E-009
15	7.3542849E-009
17.4	1.6749495E-008
20.1	1.7409133E-008
22.5	6.2009407E-009
25	4.1445518E-009

Tabela 1

Método	Total de passos	Avaliações da função
TSRK	378	2268

Tabela 2

Foi neste momento que a utilização do par TSRK tornou-se interessante, pois independente do número de pontos internos no intervalo de integração em que desejamos a solução, o total de passos será o mesmo, consequentemente teremos o mesmo número de avaliações da derivada.

Caso contrário se fosse utilizado o par RKF45, ao invés do método dar apenas um passo de x_n para x_{n+1} , o passo teria que ser reduzido para calcular a aproximação em possíveis pontos desejados x_{η_i} 's, onde $x_n < x_{\eta_i} < x_{n+1}$, não permitindo a utilização de passos com “tamanho ótimo”.

Como consequência, teríamos um acréscimo no número de passos que pode ser de 1 até o número total de pontos em que exige as aproximações. Como o total de pontos pode ser elevado, teremos uma considerável economia no número de avaliações da derivada, ao utilizarmos o par TSRK, conforme mostra os exemplos a seguir.

No problema 7.5, para obter a aproximação no ponto final 100.0 com 7 casas de precisão, foram dados os seguintes números de passos e avaliações da derivada:

Método	Total de passos	Avaliações da função
TSRK	185	1110
RKF45	186	1116

no entanto exigindo-se as aproximações em 100 pontos obtemos:

Método	Total de passos	Avaliações da função
TSRK	185	1110
RKF45	231	1386

No problema 7.8, para obter a aproximação no ponto final 30.0 com 8 casas de precisão, foram dados os seguintes números de passos e avaliações da derivada:

Método	Total de passos	Avaliações da função
TSRK	865	10380
RKF45	899	10788

exigindo-se as aproximações em 200 pontos teremos:

Método	Total de passos	Avaliações da função
TSRK	865	10380
RKF45	964	11568

Cabe aqui registrar, que a comparação realizada entre o par de métodos TSRK e o RKF45 para problemas com saída densa teve apenas um caráter ilustrativo, pois o método RKF45 não é construído com extensão contínua e portanto não é indicado para a resolução desse tipo de problemas.

A integração numérica de problemas de valor inicial de forma eficiente e estável é uma questão importante. Nessa direção, torna-se interessante considerar métodos que permitam variar o tamanho do passo de integração durante a execução, a fim de minimizar o tempo computacional necessário para se obter a aproximação para a solução exata, sob o risco de se obter uma solução instável. Consequentemente, é fundamental considerar métodos que integrem naturalmente boas estratégias para o controle do erro de truncamento local.

Neste trabalho consideramos e procuramos apresentar de forma clara e objetiva a classe dos métodos de Runge-Kutta de passo duplo explícitos, proposta por Iannelli e Zangari [10]. Podemos trabalhar com métodos dessa classe considerando integração a passo variável para a resolução numérica de problemas de valor inicial não-rígido.

Podemos observar que os métodos TSRK são definidos de forma muito semelhante aos métodos de Runge-Kutta, pois também consideram combinações das derivadas da função em pontos internos ao passo de integração. Uma característica que os diferencia dos métodos de Runge-Kutta é a necessidade de considerarmos duas informações anteriores a cada passo de integração.

Como já mencionamos, a integração a passo variável será mais ou menos eficiente dependendo do controle do erro de truncamento local e do controle do tamanho do passo.

Consideramos a estratégia de controle do erro apresentada no capítulo 2, como a de melhor desempenho para a classe dos métodos de Runge-Kutta. Ela consiste em considerar pares de métodos embolados, por exemplo o par RKF45, onde o método de ordem maior é utilizado como ferramenta para estimar o erro do método de ordem menor, com um esforço computacional mínimo, conforme visto na seção 4.1.

Como já mencionamos neste trabalho, uma estratégia de controle do tamanho do passo de integração, a considerada por Shampine no código RKF45, é baseada na grande maioria das aplicações, que determina uma redução de tamanho do tamanho do passo a cada região de alta rigidez e a que considera uma redução da densidade por região.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A integração numérica de problemas de valor inicial de forma eficiente e otimizada é uma questão importante. Nessa direção, torna-se interessante considerar métodos que permitam variar o tamanho do passo de integração durante o processo, a fim de minimizar o esforço computacional dispendido para se obter a aproximação para a solução exata, sem abrir mão da precisão exigida pelo usuário. Consequentemente, é fundamental considerar métodos que incorporem naturalmente boas estratégias para o controle do erro de truncamento local.

Neste trabalho estudamos e procuramos apresentar de forma clara e objetiva a classe dos métodos de Runge-Kutta de passo dois explícitos, proposta por Jackiewicz e Zennaro [09]. Podemos trabalhar com métodos dessa classe considerando integração a passo variável para a resolução numérica de problemas de valor inicial não-stiff.

Podemos observar que os métodos TSRK são definidos de forma muito semelhante aos métodos de Runge-Kutta, pois também consideram combinações das derivadas da função em pontos internos ao passo de integração. Uma característica que os diferencia dos métodos de Runge-Kutta é a necessidade de considerarmos duas informações anteriores a cada passo de integração.

Como já mencionamos, a integração a passo variável será mais ou menos eficiente dependendo do controle do erro de truncamento local e do controle do tamanho do passo.

Consideramos a estratégia de controle do erro apresentada no capítulo 2, como a de melhor desempenho para a classe dos métodos de Runge-Kutta. Ela consiste em considerar pares de métodos embutidos, por exemplo o par RKF45, onde o método de ordem maior é utilizado como ferramenta para estimar o erro do método de ordem menor, com um esforço computacional mínimo, conforme visto na seção 2.3.

Consideramos neste trabalho três estratégias de definição do tamanho do passo de integração, a considerada por Shampine no código RKF45, a encontrada na grande maioria das publicações, que determina uma redução de cinquenta por cento do tamanho do passo a cada rejeição e a que considera uma redução de noventa por cento.



Os resultados numéricos apresentados no trabalho, que traduzem o comportamento dos demais problemas por nós considerados, permitem concluir que a estratégia do código RKF45 é a mais eficiente. Para uma investigação mais apurada é importante considerar o trabalho de Shampine e outros [16].

A construção das condições de ordem para os métodos de Runge-Kutta pode ser efetivada considerando-se o caminho clássico, que considera o desenvolvimento em série de Taylor das funções envolvidas na expressão do erro de truncamento local ou a proposta por Butcher [02].

A principal vantagem da utilização da técnica de Butcher, é que a partir do teorema 3.2, podemos facilmente gerar as condições de ordem, evitando cálculos complicados caso escolhêssemos trabalhar com expansões em série de Taylor.

Neste trabalho optamos por considerar o caminho proposto por Butcher [02], que considera a associação de árvores às diferenciais elementares, servindo-se para isso de conceitos da teoria dos grafos.

A leitura do capítulo 3 permite concluir que esse é um caminho muito interessante e elegante de se construir as condições de ordem.

Assim, tomando como base os conceitos do capítulo 3 e alguns teoremas formulados por Jackiewicz e Zennaro [09], utilizamos esse caminho para a construção de ordem para os métodos de Runge-Kutta de passo dois a passo de integração variável.

A associação de forma embutida de um método de Runge-Kutta de passo dois a um método de Runge-Kutta permitiu trabalhar de forma eficiente e otimizada com integração a passo variável. Essa conclusão pode ser tirada analisando-se os resultados numéricos do capítulo 7, em especial quando devemos integrar problemas com saída densa.

Finalmente, torna-se interessante registrar que apesar de ser de passo dois o método TSRK definido em (4.3) permite integrar com variação do tamanho do passo de forma eficiente e a baixo custo, o que não é uma característica dos métodos lineares de passo múltiplo de ordem elevada.

Esperamos que o trabalho por nós realizado sirva de motivação para novos estudos nessa linha. Por exemplo, considerando-se para essa classe de métodos os implícitos, que permitem integrar problemas stiff.

Alguns trabalhos nessa direção podem ser encontrados, entre os quais citamos o de Jackiewicz e Tracogna [08] e o de Tracogna [19].



REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [01] BRAUN, M. - *Differential equations and their applications*. Springer-Verlag, 1992.
- [02] BUTCHER, J. C. - *The numerical analysis of ordinary differential equations*. John Wiley & Sons, 1987.
- [03] BYRNE, G. D. - Parameters for Pseudo Runge-Kutta methods. *Communications A. C. M.*, 10, nº. 2, p. 102 – 104, 1967.
- [04] BYRNE, G. D. E LAMBERT, R. J. - Pseudo Runge-Kutta methods involving Two Points. *Journal of the A. C. M.*, v. 13, nº. 1, p. 114 -123, 1966.
- [05] FEHLBERG, E. - Classical fifth, sixth, seventh and eight order Runge-Kutta formulas with stepsize control. *NASA TR R-287*, 1968.
- [06] FEHLBERG, E. - Low order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control and their application to some heat transfer problems. *NASA TR R-315*, 1969.
- [07] JACKIEWICZ, Z., R. RENAUT E A. FELDSTEIN - Two-step Runge-Kutta methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28, p. 1165 – 1182, 1991.
- [08] JACKIEWICZ, Z., S. TRACOGNA - A general class of two-step Runge-Kutta methods for ordinary differential equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32, p. 1390 – 11427, 1995.
- [09] JACKIEWICZ, Z. E M. ZENNARO - Variable stepsize explicit two-step Runge-Kutta methods. *Mathematics of Computation*, 59, nº 200, p. 421 – 438, 1992.
- [10] LAMBERT, J. D. - *Computational methods in ordinary differential equations*. John Wiley & Sons, 1973.



- [11] LAMBERT, J. D. - *Numerical methods for ordinary differential systems: the initial value problem*. John Wiley & Sons.Ltd., 1993.
- [12] NAKASHIMA, M. - On Pseudo Runge-Kutta methods with 2 and 3 stages. *Publ. RIMS, Kyoto Univ.*, 18, p. 895 - 909, 1982.
- [13] NAKASHIMA, M. - On a Pseudo Runge-Kutta method of order 6. *Proc.Japan Acad.*, 58, p. 66 - 68, 1982.
- [14] NAKASHIMA, M. - Pseudo Runge-Kutta processes. *Publ. RIMS, Kyoto Univ.*, 23, p. 583 - 611, 1987.
- [15] ROSEN, J. S. - Mult-step Runge-Kutta methods. *NASA TND - 4400*, 1968.
- [16] SHAMPINE, L. F., H. A. WATTS E S. M. DAVENPORT - Solving non-stiff ordinary differential equations: the state of art. *SIAM Review*, 18, p. 376-411, 1976.
- [17] SHAMPINE, L. F. E H. A. WATTS - The art of writing a Runge-Kutta code, Part I. *Mathematical Software III, Academic Press*, p. 257-275, 1977.
- [18] SHAMPINE, L. F. E H. A. WATTS - The art of writing a Runge-Kutta code - Part II. *Applied Mathematics and Computation*, 5, n ° 93, p. 93-121, 1979.
- [19] TRACOGNA, S.- Implementation of two-step Runge-Kutta methods for ordinary differential equations. *J. Comp. Appl. Math.*, 76, p. 113 - 136, 1996.
- [20] ZENNARO, M. - Natural continuos extensions of Runge-Kutta methods. *Mathematics of Computation*, 46, p.119-133,1986.



