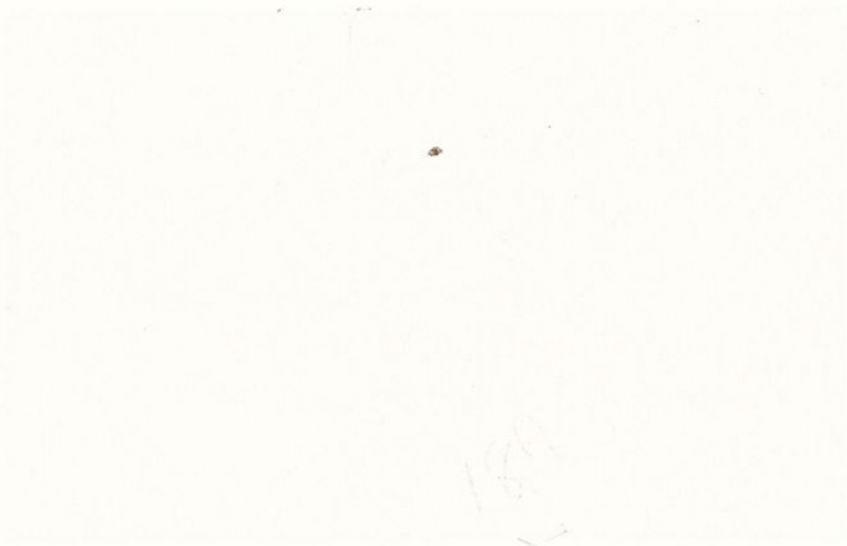


Francislaine Vicente Teixeira Basso

O Papel das Condições de Simplificação  
na Obtenção de Métodos de  
Runge—Kutta Explícitos



O PAPEL DAS CONDIÇÕES DE  
SIMPLIFICAÇÃO NA OBTENÇÃO DE  
MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA EXPLÍCITOS

O PAPEL DAS CONDIÇÕES DE  
SIMPLIFICAÇÃO NA OBTENÇÃO DE  
MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA EXPLÍCITOS

*Francislaine Vicente Teixeira Basso*  
Dissertação de Mestrado  
Pós-Graduação em Matemática Aplicada e  
Computacional.  
MAC - 026

Dissertação apresentada ao DCE/IBCE/UNESP como parte dos requisitos para  
obtenção do título de Mestre em Ciências Matemáticas - Área de Concentração em  
Matemática Aplicada e Computacional.



756/48

# O PAPEL DAS CONDIÇÕES DE SIMPLIFICAÇÃO NA OBTENÇÃO DE MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA EXPLÍCITOS

*Francislaine Vicente Teixeira Basso*

sob orientação do Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins

S.J. Rio Preto, outubro de 1997.

Dissertação apresentada ao DCCE/IBILCE/UNESP como parte dos requisitos para  
obtenção do título de Mestre em Ciências Matemáticas -Área de Concentração em  
Matemática Aplicada e Computacional.



766/98

2



*“Tal como um bebê que, aprendendo a falar balbucia  
todos os fonemas em todas as línguas,  
mas ouvindo a sua mãe aprende a distinguir  
e utilizar apenas os fonemas de sua língua materna,  
assim nós, os matemáticos,  
que balbuciamos em todos os ramos da Matemática,  
deveríamos escutar a natureza mãe para descobrir  
quais são os ramos naturais de nossa Ciência”.*

René Thom.



## Agradecimentos

Agradeço primeiramente, ao Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que com atenção, sabedoria e paciência orientou-me na elaboração deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Manoel Ferreira Borges Neto que como coordenador do curso sempre se mostrou atencioso e prestativo.

As amigas Andréia Berti, Argélia M. de Santos Caligaris e Cristiane A. Zapata pela companheirania e apoio prestado na finalização deste trabalho.

Ao meu marido Válder Basso, pelo carinho e compreensão com que ajudou-me a superar as dificuldades encontradas durante este longo período.

E, em especial, a minha irmã Gláucia, aos meus queridos pais Eunice e Milton, ao meu esposo Válder

e aos meus irmãos

dedico.

Agradeço aos demais professores, companheiros do curso, funcionários, familiares, enfim, a todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Agradeço à CAPES-PROEX, pelo auxílio financeiro.

## Agradecimentos

Agradeço primeiramente, ao Prof.Dr.Sebastião Pereira Martins que com atenção, sabedoria e paciência orientou-me na elaboração deste trabalho.

Ao Prof.Dr.Manoel Ferreira Borges Neto que como coordenador do curso sempre se mostrou atencioso e prestativo.

Às amigas Andréia Berti, Argélia M. de Santis Caligares e Cristina A. Zapata pelo companheirismo e apoio prestado na finalização deste trabalho.

Ao meu marido Válter Basso, pelo carinho e compreensão com que ajudou-me a superar as dificuldades encontradas durante este árduo período.

Em especial, a minha irmã Gislaine Teixeira Cagnim, pelo grande apoio e incentivo prestado ao ingressar-me na Universidade.

Agradeço aos demais professores, companheiros do curso de mestrado, amigos, funcionários, familiares, enfim, a todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Agradeço à CAPES-PROEX, pelo auxílio financeiro.



## Resumo

O objetivo deste trabalho é buscar caminhos mais simples para a obtenção de métodos Runge-Kutta (RK) explícitos com ordem no máximo cinco e de “pares embutidos” de métodos RK com ordens 4 e 5 respectivamente.

Através das denominadas “condições de simplificação”, propostas por Butcher [5], são definidos alguns caminhos para a obtenção tanto de métodos de RK quanto de pares embutidos de tais métodos.



## Abstract

The main purpose of this work is to find out thoughtout some “simplifying assumptions”, proposed by Butcher [5], a most simple way to obtain Runge-Kutta explicit methods with maximum order five and embedded Runge-Kutta methods with orders “four and five”.

# Índice

|     |                                                                                                   |    |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1   | Introdução                                                                                        | 1  |
| 2   | Os Métodos de Runge Kutta                                                                         | 4  |
| 2.1 | Introdução . . . . .                                                                              | 4  |
| 2.2 | Conceitos básicos . . . . .                                                                       | 5  |
| 2.3 | As Condições de Ordem . . . . .                                                                   | 7  |
| 2.4 | Par embutido de Runge-Kutta . . . . .                                                             | 9  |
| 3   | As Condições de Simplificação                                                                     | 12 |
| 3.1 | Introdução . . . . .                                                                              | 12 |
| 3.2 | Condições de Simplificação Subsidiárias . . . . .                                                 | 12 |
| 3.3 | As novas condições de ordem . . . . .                                                             | 17 |
| 3.4 | Um procedimento para obtenção de uma família de métodos RK explícitos com $p=5$ e $s=6$ . . . . . | 18 |
| 3.5 | Uma família de métodos RK explícitos com $p=5$ e $s=6$ . . . . .                                  | 20 |
| 4   | Uma nova classe de Condições de Simplificação                                                     | 22 |
| 4.1 | Introdução . . . . .                                                                              | 22 |
| 4.2 | As Novas Condições de Simplificação . . . . .                                                     | 22 |
| 4.3 | Algumas Combinações entre Condições de Ordem e Condições de Simplificação                         | 27 |
| 4.4 | Uma nova equivalência . . . . .                                                                   | 33 |
| 4.5 | Uma família de métodos de Runge-Kutta explícitos de ordem cinco e seis estágios.                  | 34 |
| 5   | A teoria de Albrecht                                                                              | 39 |



|     |                                                                   |    |
|-----|-------------------------------------------------------------------|----|
| 5.1 | Introdução . . . . .                                              | 39 |
| 5.2 | Uma formalização matricial dos métodos de Runge Kutta . . . . .   | 39 |
| 5.3 | Erro de Discretização Local . . . . .                             | 41 |
| 5.4 | Algumas Relações Importantes . . . . .                            | 43 |
| 5.5 | Uma Relação Recursiva . . . . .                                   | 47 |
| 6   | As condições de simplificação em métodos embutidos . . . . .      | 58 |
| 6.1 | Introdução . . . . .                                              | 58 |
| 6.2 | As condições de simplificação na formulação de Albrecht . . . . . | 58 |
| 6.3 | Alguns resultados . . . . .                                       | 60 |
| 7   | Considerações finais . . . . .                                    | 74 |
|     | Bibliografia . . . . .                                            | 76 |



# Capítulo 1

## Introdução

Um problema real geralmente não pode ser representado de maneira exata, em toda sua complexidade, por uma equação matemática ou um sistema de equações. No entanto, se trabalharmos com as variáveis “essenciais” do fenômeno observado, o modelo matemático que simula tal fenômeno poderá levar a soluções bastante próximas daquelas observadas na realidade.

É muito frequente, em se tratando de modelar um fenômeno ou um experimento qualquer, obtermos equações que envolvam as “variações” das variáveis presentes e consideradas essenciais.

Desta forma, as leis que regem tal fenômeno podem, para muitos problemas, definir as chamadas Equações Diferenciais Ordinárias (EDO). Estas equações, quando associadas a uma condição inicial, constituem o que denominamos “problema de valor inicial” (PVI).

Em alguns casos, não sendo possível determinarmos algebricamente a solução de um PVI, embora estejam garantidas sua existência e unicidade, surge a necessidade de se utilizar técnicas numéricas que geram aproximações para a mesma em pontos do seu intervalo de existência.

Esta necessidade tem estimulado a busca de métodos numéricos que permitem gerar, com o menor esforço computacional possível, aproximações com a precisão desejada.

Dentre estes métodos numéricos uma classe que tem se destacado bastante e a qual iremos abordar neste trabalho é a classe dos métodos de Runge-Kutta.

Um método de Runge-Kutta se caracteriza por um conjunto de coeficientes que satisfazem a um sistema de equações, a maioria delas não lineares e definem um conjunto de  $s$  derivadas



da função  $f(x, y)$ , que são combinadas para gerar a aproximação procurada para a solução exata. As  $s$  derivadas definem o número de estágios do método e estabelecem uma relação direta com sua ordem. O número de equações do sistema tem também uma relação direta com a ordem de consistência do método de Runge-Kutta, por isso são conhecidas como “condições de ordem”.

Por exemplo, na classe dos métodos de Runge-Kutta com ordem  $p = 4$  o sistema terá 8 equações, para ordem  $p = 5$  são necessárias 17 equações e, assim por diante. Assim, a obtenção de um método de Runge-Kutta explícito com ordem  $p = 5$  e um número mínimo de estágios, através das 17 equações de ordem, foi durante muito tempo uma tarefa instigante.

A busca de soluções para esses sistemas tem estimulado, nas últimas três décadas, muitas investigações, sempre procurando estabelecer caminhos mais simples para a obtenção de métodos de Runge-Kutta explícitos.

Um primeiro trabalho apresentando uma das soluções para as 17 equações, que fornecem métodos de Runge-Kutta explícitos com ordem  $p = 5$ , foi publicado por Cassity [6]. Infelizmente esse trabalho não forneceu um caminho para a implementação da busca de soluções.

Uma outra dificuldade apresentada pelos métodos de Runge-Kutta é quando se busca estimar o erro de truncamento local. Uma técnica eficiente é a utilização, em paralelo ao método de Runge-Kutta com ordem  $p$ , de um outro método de Runge-Kutta com ordem pelo menos  $p + 1$ , a partir do qual é possível estimar, a cada passo, o erro da fórmula de ordem menor.

Embora eficiente essa técnica esbarrou no custo adicional de se calcular as derivadas  $f(x, y)$ , necessárias às duas fórmulas Runge-Kutta. Assim, um passo considerável na otimização desse custo foi a obtenção de pares de métodos ditos “embutidos”, por apresentarem coeficientes em comum, o que permite considerar várias avaliações da derivada comum nos dois métodos.

Os primeiros trabalhos nessa direção foram produzidos por Fehlberg [8] e [9]. Entre os mais populares pares embutidos de fórmulas de Runge-Kutta com ordens 4 e 5 respectivamente, encontramos o par obtido por Fehlberg [8] e o obtido por Dormand-Prince [7]. Conforme Butcher [5] ou Shanks [15] o número mínimo de estágios para se obter um par RK(4,5) é



$s = 6$ .

Uma possibilidade também interessante e que tem se mostrado eficiente, Shampine [16], é a utilização, para o próximo passo de integração, da aproximação de ordem maior nas duas fórmulas de Runge-Kutta. Essa técnica é conhecida por “extrapolação local”.

Resumindo, a grande dificuldade encontrada na busca de métodos de Runge-Kutta ou de pares de métodos embutidos está na resolução do sistema constituído pelas condições de ordem. No caso de pares de métodos embutidos essa dificuldade torna-se ainda maior pois o número de equações do sistema aumenta. Por exemplo, para a obtenção de um par com ordens 4 e 5, respectivamente, devemos considerar 25 condições de ordem, em lugar das 17 necessárias para a obtenção de um método com ordem  $p = 5$ .

As chamadas “condições de simplificação” propostas por Butcher [5], tem se constituído em uma ferramenta extremamente eficiente, no sentido de minimizar o esforço necessário para a resolução do sistema constituído pelas condições de ordem. O objetivo deste trabalho é apresentar, da forma mais clara possível, a utilização das condições de simplificação e das condições de simplificação subsidiárias, com as consequências positivas dessa exploração. Isto é, gerando caminhos bem mais simples tanto para a obtenção de um método de Runge-Kutta quanto para a obtenção de um par embutido.

No capítulo 1, definiremos os principais conceitos qualitativos para a classe dos métodos de Runge-Kutta, em especial o erro de truncamento local e as condições de ordem do método. Tais conceitos estão associados a um controle de qualidade do método, buscando aproximações para a solução com uma precisão pré-fixada.

Nos capítulos 2 e 3, mostraremos como as condições de simplificação possibilitam que algumas das condições de ordem sejam descartadas do sistema.

No capítulo 4, apresentaremos uma nova formulação teórica para os métodos de Runge-Kutta, através de uma notação matricial introduzida por Albrecht, que será muito útil no desenvolvimento do capítulo 5, onde mostraremos como as condições de simplificação podem facilitar a obtenção de pares embutidos de métodos de Runge-Kutta com ordens 4 e 5, respectivamente.



## Capítulo 2

# Os Métodos de Runge Kutta

### 2.1 Introdução

Uma grande quantidade de problemas físicos, químicos e biológicos podem ser representados através de modelos matemáticos. Dentre tais modelos podemos citar as equações diferenciais ordinárias (EDO).

Em alguns casos, não é possível determinar algebricamente a solução de uma EDO associada a uma condição inicial, daí torna-se oportuna a utilização de técnicas numéricas, que geram aproximações para a mesma em pontos do seu intervalo de existência.

Dentre estas técnicas, ganham destaque duas classes de métodos que têm sido ultimamente muito investigados: métodos de passo múltiplo e métodos de Runge-Kutta(RK).

Neste capítulo, apresentaremos alguns conceitos qualitativos e resultados importantes relacionados com os métodos RK, os quais serão utilizados no desenvolvimento dos capítulos posteriores.



## 2.2 Conceitos básicos

Consideremos o problema de valor inicial (PVI) definido por:

$$y' = f(x, y) \quad (2.1)$$

$$y(a) = y_0$$

com  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$  tal que a existência e unicidade da solução  $y(x)$  num certo intervalo  $[a, b]$  esteja garantida.

Neste trabalho, visando simplificar as notações, mas sem prejuízo de qualquer resultado, vamos considerar  $m=1$ .

Consideremos uma discretização de  $[a, b]$  em pontos  $x_n$  definidos por  $x_n = x_0 + nh$  para  $n = 1, 2, \dots$ , onde  $h$  será identificado como o comprimento do passo de integração. Denotaremos por  $y_n$  a aproximação para a solução exata  $y(x)$  em  $x = x_n$ .

Vamos aqui considerar, para a obtenção de aproximações para a solução exata  $y(x)$  em pontos  $x_n \in [a, b]$ , a classe dos métodos de Runge-Kutta com  $s$  estágios que definimos a seguir.

**Definição 2.1** Dado o PVI (2.1) denominamos método de Runge-Kutta com  $s$  estágios o método numérico de passo um definido pelo seguinte algoritmo:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad (2.2)$$

$$k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j) \quad , i = 1, 2, \dots, s \quad (2.3)$$

com

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij} \quad , i = 1, 2, \dots, s \quad (2.4)$$

onde  $a_{ij}, c_i$  e  $b_i$  são constantes.

Ainda, é conveniente tomarmos  $0 \leq c_i \leq 1$  para  $i = 1, 2, \dots, s$

Podemos observar que os coeficientes  $c_i, a_{ij}$  e  $b_j$  caracterizam um método RK com  $s$  estágios. Vamos identificá-los através de uma forma matricial denominada representação de Butcher.



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

ou

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

onde:

$c = [c_1, c_2, \dots, c_s]^T$ ,  $b = [b_1, b_2, \dots, b_s]^T$  e  $A = [a_{ij}]_{s \times s}$ .

A classe dos métodos RK pode ser dividida em 3 sub-classes, em função dos valores assumidos pelos elementos da matriz  $A$ .

- Se  $a_{ij} = 0$  para  $i \leq j$ , isto é,  $A$  é estritamente triangular inferior, então teremos a sub-classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos.
- Se  $a_{ij} \neq 0$  para algum  $i < j$ , isto é,  $A$  não é triangular inferior, então teremos a sub-classe dos métodos de Runge-Kutta implícitos.
- Se  $a_{ij} = 0$  para  $i < j$  e se existir  $a_{ii} \neq 0$ , isto é,  $A$  é triangular inferior, mas não estritamente, então teremos a sub-classe dos métodos de Runge-Kutta semi-implícitos.

Todo o desenvolvimento deste trabalho será feito considerando-se apenas a sub-classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos.

Uma medida de qualidade extremamente útil ao se trabalhar com os métodos RK, é o valor  $T_{n+1}$ , que definiremos a seguir, obtido ao substituirmos em (2.2) e (2.3) as aproximações  $y_i$  por  $y(x_i)$ .

**Definição 2.2** Denominamos Erro de Truncamento Local de um Método de Runge- Kutta com  $s$  estágios, em  $x = x_{n+1}$  e denotaremos por  $T_{n+1}$ , o valor :

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \left( y(x_n) + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \right) \quad (2.5)$$

onde as avaliações  $k_i$ 's são efetuadas considerando-se a solução exata  $y(x_n)$  em lugar de  $y_n$ .

Vamos denotar por  $\tilde{y}_{n+1}$  a aproximação em  $x_{n+1}$  gerada por (2.2) e (2.3) quando admitimos a hipótese local  $y_n = y(x_n)$ . Portanto:

$$\tilde{y}_{n+1} = y(x_n) + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad (2.6)$$



De (2.5) e (2.6) obtemos que:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1} \quad (2.7)$$

Portanto, quando por hipótese admitimos que  $y_n = y(x_n)$  o Erro de Truncamento Local nada mais é do que a diferença entre a solução exata e a solução numérica no ponto  $x_{n+1}$ . Vários autores denominam o valor obtido em (2.7) de erro local.

Se considerarmos em (2.7) o desenvolvimento de  $T_{n+1}$  em série de Taylor nas vizinhanças do ponto  $x = x_n$ , vamos obter:

$$T_{n+1} = w_1 h + w_2 h^2 + w_3 h^3 + w_4 h^4 + w_5 h^5 + \dots + w_p h^p + O(h^{p+1}) \quad (2.8)$$

**Definição 2.3** Dizemos que um método RK tem ordem  $p$  se este for o maior inteiro positivo tal que:

$$T_{n+1} = O(h^{p+1}) \quad (2.9)$$

ou seja

$$w_1 = w_2 = w_3 = \dots = w_p = 0 \quad (2.10)$$

É importante registrar que os  $w_i$  são constituídos por expressões que envolvem os coeficientes do método multiplicadas por derivadas parciais da função  $f(x, y)$ . Logo, para que tenhamos  $w_i = 0$  para  $i = 1, 2, \dots, p$  (independente do  $p$ ), preciso que estas expressões sejam nulas, uma vez que não podemos impor restrições sobre  $f(x, y)$  e suas derivadas parciais.

Essas expressões às quais impomos a nulidade, constituem um conjunto de equações denominadas **Condições de Ordem do Método**. Tais equações têm os coeficientes do método como suas incógnitas e, portanto, cada solução desse conjunto de equações nos fornece um método, ou uma família de métodos, com a ordem  $p$  considerada.

## 2.3 As Condições de Ordem

Na prática, para construirmos um método de Runge-Kutta com ordem  $p$ , consideramos as expansões em Série de Taylor de  $y(x_{n+1})$  e  $\tilde{y}_{n+1}$  em potências de  $h$  numa vizinhança de  $x = x_n$ , substituímos em (2.7) e considerando (2.9) geramos as equações que os coeficientes de um método de Runge-Kutta com  $s$  estágios devem satisfazer para que este tenha ordem  $p$ .



A seguir apresentamos o sistema constituído de 17 equações, as quais um método RK explícito com  $s$  estágios deve satisfazer para que tenha ordem cinco, isto é, suas condições de ordem.

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1 \quad (2.11)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i = \frac{1}{2} \quad (2.12)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3} \quad (2.13)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{1}{6} \quad (2.14)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{4} \quad (2.15)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{1}{8} \quad (2.16)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12} \quad (2.17)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k = \frac{1}{24} \quad (2.18)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^4 = \frac{1}{5} \quad (2.19)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i^2 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{1}{10} \quad (2.20)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15} \quad (2.21)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i c_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k = \frac{1}{30} \quad (2.22)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i \left( \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j \right)^2 = \frac{1}{20} \quad (2.23)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20} \quad (2.24)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k = \frac{1}{40} \quad (2.25)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60} \quad (2.26)$$

$$\sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} a_{jk} \sum_{m=2}^{k-1} a_{km} c_m = \frac{1}{120} \quad (2.27)$$



Se desse sistema excluirmos as equações de (2.19) a (2.27) então alcançaremos apenas ordem 4 para os métodos RK explícitos daí obtidos.

Se além dessas também excluirmos as equações de (2.15) a (2.18) teremos garantia, apenas, de ordem 3. Se mantivermos no sistema apenas as equações (2.11) e (2.12) teremos a classe dos métodos explícitos com ordem 2 e  $s$  estágios.

Portanto, observe que as condições para se alcançar ordem  $p$  e  $s$  estágios serão também condições necessárias para os métodos RK com ordem  $p+1$  e  $s$  estágios.

## 2.4 Par embutido de Runge-Kutta

Ao se trabalhar com um método de Runge-Kutta com ordem  $\hat{p}$ , a técnica mais eficiente e atualmente bastante considerada para se estimar o erro de truncamento local, utiliza um outro método também de Runge-Kutta mas com ordem superior a  $\hat{p}$ .

A fim de minimizar o esforço computacional dispendido a cada passo de integração no cálculo das derivadas  $f(x, y)$  podemos considerar dois métodos de Runge-Kutta tais que as derivadas do de ordem menor sejam também derivadas do de ordem maior. Para isso introduziremos o conceito de par embutido de métodos, que a seguir definimos.

**Definição 2.4** *Dados dois métodos de Runge-Kutta:  $(c, A, b^t)$  com ordem  $p$  e  $s$  estágios e  $(\hat{c}, \hat{A}, \hat{b}^t)$  com ordem  $\hat{p}$  e  $\hat{s}$  estágios, tal que  $\hat{p} < p$ , dizemos que o método com ordem  $\hat{p}$  está embutido no de ordem  $p$  se:*

$$c = \begin{pmatrix} \hat{c} \\ r \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^s \quad e \quad A = \left( \begin{array}{c|c} \hat{A} & \theta_1 \\ \hline A^* & \theta_2 \end{array} \right) \in \mathbb{R}^{s \times s}$$

com  $\theta_1$  e  $\theta_2$  vetores nulos e  $A^* \in \mathbb{R}^{(s-\hat{s}) \times \hat{s}}$ .

Em particular, torna-se de valor prático o caso  $\hat{p} = p - 1$  e  $\hat{s} = s - 1$ , com:

$$c = \begin{pmatrix} \hat{c} \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^s \quad e \quad A = \left( \begin{array}{c|c} \hat{A} & \theta \\ \hline \frac{\hat{A}}{\hat{b}^t} & 0 \end{array} \right).$$

Uma outra situação especial e que será considerada no capítulo 5 deste trabalho é quando tomamos as matrizes  $c$  e  $A$  comuns aos dois métodos, isto é  $s = \hat{s}$ , mas com:

$$c_s = 1 \tag{2.28}$$



$$b_s = 0 \quad (2.29)$$

$$a_{sj} = b_j, \quad \text{para } j = 1(1)s. \quad (2.30)$$

Como  $A = \hat{A}$  e  $c = \hat{c}$ , podemos representar o par embutido como:

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

onde  $b^t, \hat{b}^t, c \in \mathbb{R}^s$  e  $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$ .

Observe que nesse caso a última derivada avaliada no passo  $n$  será igual à primeira derivada do passo  $n+1$ , ou seja,  $k_s^{(n)} = k_1^{(n+1)}$ .

De fato:

$$k_s^{(n)} = f(x_n + c_s h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{sj} k_j) \stackrel{(2.28)}{=} \stackrel{(2.30)}{=} f(x_n + h, y_n + h \sum_{j=1}^s b_j k_j) = f(x_{n+1}, y_{n+1})$$

$$k_1^{(n+1)} = f(x_{n+1} + c_1 h, y_{n+1} + h \sum_{j=1}^s a_{1j} k_j) \stackrel{c_1=0}{=} \stackrel{a_{1j}=0}{=} f(x_{n+1}, y_{n+1})$$

Sob o ponto de vista computacional, esse par de métodos exige, a cada passo,  $s - 1$  avaliações da derivada  $f(x, y)$  e não  $s$  como em princípio poderíamos imaginar.

Um par de métodos embutidos que apresente essa característica é identificado como um par que satisfaz à estratégia FSAL (última derivada igual à primeira).

Um par de métodos de Runge-Kutta onde o de ordem  $p - 1$  está embutido no de ordem  $p$  será representado por  $RK(p - 1, p)$ .

Daremos a seguir como ilustração, o par de métodos  $RK(4,5)$  com  $s = 7$  estágios, que satisfaz à estratégia FSAL, conhecido como método DOPRI(4,5).



|                |                      |                       |                      |                    |                         |                    |                |
|----------------|----------------------|-----------------------|----------------------|--------------------|-------------------------|--------------------|----------------|
| 0              |                      |                       |                      |                    |                         |                    |                |
| $\frac{1}{5}$  | $\frac{1}{5}$        |                       |                      |                    |                         |                    |                |
| $\frac{3}{10}$ | $\frac{3}{40}$       | $\frac{9}{40}$        |                      |                    |                         |                    |                |
| $\frac{4}{5}$  | $\frac{44}{45}$      | $-\frac{56}{15}$      | $\frac{32}{9}$       |                    |                         |                    |                |
| $\frac{8}{9}$  | $\frac{19372}{6561}$ | $-\frac{25360}{2187}$ | $\frac{64448}{6561}$ | $-\frac{212}{729}$ |                         |                    |                |
| 1              | $\frac{9017}{3168}$  | $-\frac{355}{33}$     | $\frac{46732}{5247}$ | $\frac{49}{176}$   | $-\frac{5103}{18656}$   |                    |                |
| 1              | $\frac{35}{384}$     | 0                     | $\frac{500}{1113}$   | $\frac{125}{192}$  | $-\frac{2187}{6784}$    | $\frac{11}{84}$    |                |
|                | $\frac{35}{384}$     | 0                     | $\frac{500}{1113}$   | $\frac{125}{192}$  | $-\frac{2187}{6784}$    | $\frac{11}{84}$    | 0              |
|                | $\frac{5179}{57600}$ | 0                     | $\frac{7571}{16695}$ | $\frac{393}{640}$  | $-\frac{92097}{339200}$ | $\frac{187}{2100}$ | $\frac{1}{40}$ |

## 3.2 Condições de Simplificação Subsidiárias

Considerando as equações:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = \frac{1}{2} \quad i=1, 2, \dots, n \quad (3.1)$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = \frac{1}{2} \quad i=1, 2, \dots, n \quad (3.2)$$

As equações são denominadas por Butler "Condições de Simplificação" para a classe de sistemas BK explícitos com ordem  $n$  e estágio  $s$ . Conforme veremos, essas condições desempenham um papel importante quando recorremos às simplificações de ordem para a obtenção de soluções de BK.

Como veremos neste capítulo, quando lidamos com sistemas constituídos pelas equações (3.1) e (3.2) as condições de simplificação (3.1) e (3.2), algumas das condições de simplificação de ordem  $s$  são automaticamente satisfeitas e as condições de simplificação de ordem  $s$  que não são automaticamente satisfeitas são as condições de simplificação de ordem  $s$ .

## Capítulo 3

# As Condições de Simplificação

### 3.1 Introdução

A não linearidade da maioria das condições de ordem dificulta a resolução do sistema por elas constituído. Por isso, Butcher propôs algumas equações mais simples que, quando incorporadas ao sistema, tornam redundantes algumas das condições de ordem simplificando sua resolução. Tais equações são denominadas condições de simplificação subsidiárias e serão consideradas neste capítulo.

### 3.2 Condições de Simplificação Subsidiárias

Consideremos as equações:

$$\sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{c_i^2}{2} \quad i = 3, 4, \dots, s \quad (3.1)$$

$$\sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{c_i^3}{3} \quad i = 3, 4, \dots, s \quad (3.2)$$

Tais equações são denominadas por Butcher “**Condições de Simplificação**” para a classe dos métodos RK explícitos com ordem  $p$  e  $s$  estágios. Conforme veremos, essas condições desempenham um papel importante quando incorporadas às condições de ordem para a obtenção de métodos de RK.

Conforme mostraremos neste capítulo, quando incluímos ao sistema constituído pelas equações (2.11) a (2.27) as condições de simplificação (3.1) e (3.2), algumas das condições de ordem são satisfeitas automaticamente se, e somente se, forem satisfeitas as condições que



apresentaremos a seguir, que denominaremos condições de simplificação subsidiárias:

$$\sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0 \quad (3.3)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} = 0 \quad (3.4)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i a_{i3} = 0 \quad (3.5)$$

$$\sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} a_{j2} = 0 \quad (3.6)$$

$$b_2 = 0 \quad (3.7)$$

Tais equivalências serão demonstradas a seguir.

### Equivalência 1:

Se tivermos (3.1) e (2.13), então (2.14) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.7) é satisfeita.

De fato:

$$\sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j \stackrel{(3.1)}{=} \sum_{i=3}^s b_i \frac{c_i^2}{2} = \frac{1}{2} \sum_{i=3}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i=2}^s b_i c_i^2 - b_2 c_2^2 \right] \stackrel{(2.13)}{=} \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{3} - b_2 c_2^2 \right] = \frac{1}{6} \Leftrightarrow b_2 = 0.$$

### Equivalência 2:

Se tivermos (3.1) e (2.15), então (2.16) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.7) é satisfeita.

De fato:

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{i=2}^{i-1} a_{ij} c_j \stackrel{(3.1)}{=} \sum_{i=3}^s b_i c_i \frac{c_i^2}{2} = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i=2}^s b_i c_i^3 - b_2 c_2^3 \right] \stackrel{(2.15)}{=} \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{4} - b_2 c_2^3 \right] = \frac{1}{8} \Leftrightarrow b_2 = 0.$$

### Equivalência 3:

Se tivermos (3.2) e (2.15), então (2.17) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.7) é satisfeita.

De fato:

$$\sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 \stackrel{(3.2)}{=} \frac{1}{3} \sum_{i=3}^s b_i c_i^3 \stackrel{(2.15)}{=} \frac{1}{12} \Leftrightarrow b_2 = 0.$$



#### Equivalência 4:

Se tivermos (3.1) e (2.17), então (2.18) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.3) é satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned} \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k &\stackrel{(3.1)}{=} \frac{1}{2} \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 - \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2^2 \right] \\ &\stackrel{(2.17)}{=} \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{12} - \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2^2 \right] = \frac{1}{24} \Leftrightarrow \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0. \end{aligned}$$

#### Equivalência 5:

Se tivermos (3.1) e (2.19), então (2.20) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.7) é satisfeita.

De fato:

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i^2 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j \stackrel{(3.1)}{=} \sum_{i=3}^s b_i c_i^2 \frac{c_i^2}{2} = \frac{1}{2} \sum_{i=3}^s b_i c_i^4 \stackrel{(2.19)}{=} \frac{1}{10} \Leftrightarrow b_2 = 0.$$

#### Equivalência 6:

Se tivermos (3.2) e (2.19), então (2.21) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.7) é satisfeita.

De fato:

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 \stackrel{(3.2)}{=} \sum_{i=3}^s b_i c_i \frac{c_i^3}{3} = \frac{1}{3} \sum_{i=3}^s b_i c_i^4 \stackrel{(2.19)}{=} \frac{1}{15} \Leftrightarrow b_2 = 0.$$

#### Equivalência 7:

Se tivermos (3.1) e (2.21), então (2.22) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.4) é satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned} \sum_{i=4}^s b_i c_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k &\stackrel{(3.1)}{=} \frac{1}{2} \sum_{i=4}^s b_i c_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 - \left( \sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} \right) c_2^2 \right] \\ &\stackrel{(2.21)}{=} \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{15} - \left( \sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} \right) c_2^2 \right] = \frac{1}{30} \Leftrightarrow \sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} = 0. \end{aligned}$$

### Equivalência 8:

Se tivermos (3.1) e (2.19), então (2.23) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.7) é satisfeita.

De fato:

$$\sum_{i=3}^s b_i \left( \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j \right)^2 \stackrel{(3.1)}{=} \sum_{i=3}^s b_i \left( \frac{c_i^2}{2} \right)^2 = \frac{1}{4} \sum_{i=3}^s b_i c_i^4 \stackrel{(2.19)}{=} \frac{1}{20} \Leftrightarrow b_2 = 0.$$

### Equivalência 9:

Se tivermos (3.1) e (2.24), então (2.25) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.3) é satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned} \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k &\stackrel{(3.1)}{=} \frac{1}{2} \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{2} \left[ \sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^3 - \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2^3 \right] \\ &\stackrel{(2.24)}{=} \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{20} - \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2^3 \right] = \frac{1}{40} \Leftrightarrow \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0. \end{aligned}$$

### Equivalência 10:

Se tivermos (3.2) e (2.24), então (2.26) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.3) é satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned} \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k^2 &\stackrel{(3.2)}{=} \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \frac{c_j^3}{3} = \frac{1}{3} \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{3} \left[ \sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^3 - \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2^3 \right] \\ &\stackrel{(2.24)}{=} \frac{1}{3} \left[ \frac{1}{20} - \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2^3 \right] = \frac{1}{60} \Leftrightarrow \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0. \end{aligned}$$

Equivalência 11:

Se tivermos (3.1) e (2.26), então (2.27) é naturalmente satisfeita  $\Leftrightarrow$  (3.5) e (3.6) são satisfeitas.

De fato:

$$\begin{aligned} \sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} a_{jk} \sum_{m=2}^{k-1} a_{km} c_m &\stackrel{(3.1)}{=} \sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} a_{jk} \frac{c_k^2}{2} = \frac{1}{2} \sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} a_{jk} c_k^2 \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k^2 - \left[ a_{32} \left( \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} \right) + \sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} a_{j2} \right] c_2^2 \right\} \\ &\stackrel{(2.26)}{=} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{60} - \left[ a_{32} \left( \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} \right) + \sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} a_{j2} \right] c_2^2 \right\} \\ &= \frac{1}{120} \Leftrightarrow \begin{cases} \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} = 0 \text{ ou } a_{32} = 0 \\ \text{e} \\ \sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} a_{j2} = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Podemos sintetizar as onze equivalências demonstradas através da tabela que apresentaremos a seguir:

| Equivalência | Hipótese      | Tese                                   |
|--------------|---------------|----------------------------------------|
| 1            | (3.1)+(2.13)  | (2.14) $\Leftrightarrow$ (3.7)         |
| 2            | (3.1)+(2.15)  | (2.16) $\Leftrightarrow$ (3.7)         |
| 3            | (3.2)+(2.15)  | (2.17) $\Leftrightarrow$ (3.7)         |
| 4            | (3.1)+(2.17)  | (2.18) $\Leftrightarrow$ (3.3)         |
| 5            | (3.1)+(2.19)  | (2.20) $\Leftrightarrow$ (3.7)         |
| 6            | (3.2)+(2.19)  | (2.21) $\Leftrightarrow$ (3.7)         |
| 7            | (3.1)+(2.21)  | (2.22) $\Leftrightarrow$ (3.4)         |
| 8            | (3.1)+(2.19)  | (2.23) $\Leftrightarrow$ (3.7)         |
| 9            | (3.1)+(2.24)  | (2.25) $\Leftrightarrow$ (3.3)         |
| 10           | (3.2)+(2.24)  | (2.26) $\Leftrightarrow$ (3.3)         |
| 11           | (3.1)+ (2.26) | (2.27) $\Leftrightarrow$ (3.5) e (3.6) |

Tabela 3.1: Equivalências I



### 3.3 As novas condições de ordem

Conforme constatamos através das equivalências do parágrafo anterior, quando acrescentamos às condições de ordem (2.11) a (2.27) às condições de simplificação de Butcher (3.1), (3.2) e às condições de simplificação subsidiárias (3.3) a (3.7), onze das dezessete condições de ordem podem ser descartadas. Logo, o novo sistema de equações pode ser considerado sem qualquer prejuízo na obtenção dos coeficientes que garantam ao método daí obtido ordem de consistência cinco.

Observe que na verdade, substituímos 11 condições de ordem por  $2s - 4$  condições de simplificação e 5 condições de simplificação subsidiárias.

Portanto, passamos a ter, no novo conjunto,  $2s + 7$  equações que devem ser satisfeitas se desejamos obter um método RK explícito com ordem 5 e  $s$  estágios.

Notemos que para  $s > 5$ , o número de equações que devem ser satisfeitas é superior a 17, que era o número exigido de condições de ordem. No entanto, temos agora equações bem mais simples com relação à linearidade nos coeficientes  $a_{ij}$  e  $c_j$ , quando comparadas àquelas que foram descartadas. Isto é, podemos gerar métodos RK explícitos com ordem cinco e  $s$  estágios com um esforço computacional bem menor.

As equações do novo sistema são:

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1 \quad (3.8)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i = \frac{1}{2} \quad (3.9)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3} \quad (3.10)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{4} \quad (3.11)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^4 = \frac{1}{5} \quad (3.12)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20} \quad (3.13)$$

$$\sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{c_i^2}{2} \quad i = 3, 4, \dots, s \quad (3.14)$$



$$\sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{c_i^3}{3} \quad i = 3, 4, \dots, s \quad (3.15)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0 \quad (3.16)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} = 0 \quad (3.17)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i a_{i3} = 0 \quad (3.18)$$

$$\sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} a_{j2} = 0 \quad (3.19)$$

$$b_2 = 0 \quad (3.20)$$

### 3.4 Um procedimento para obtenção de uma família de métodos RK explícitos com $p=5$ e $s=6$

Um procedimento natural ao tentarmos gerar um método RK é, sempre que possível, considerarmos os coeficientes  $c_i$  como parâmetros livres, podendo assim escolhê-los convenientemente, em especial considerando a condição  $0 \leq c_i \leq 1$ , para todo  $i=1(1)s$ .

Se desejamos construir métodos RK explícitos com ordem 5 e 7 estágios, devemos resolver um sistema com 21 equações a 22 incógnitas, apenas considerando os coeficientes  $a_{ij}$ , para  $i = 3(1)s$  com  $j = 2(1)s$  e os coeficientes  $b_i$ , para  $i=1(1)s$ . Isto é, não estamos incluindo entre tais incógnitas os coeficientes  $c_i$ , para  $i = 1(2)s$ . Assim sendo, teremos liberdade para atribuir seus valores e, nem estamos incluindo os elementos da primeira coluna da matriz A, pois estes elementos serão obtidos posteriormente através da relação:

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

Daremos, a seguir, um procedimento para resolução desse sistema, que nos fornecerá uma família de métodos RK explícitos com ordem  $p = 5$  e  $s = 7$  estágios.



### Algoritmo 3.1 .:

**Passo 1:** De (3.20) temos que  $b_2 = 0$

**Passo 2:** Através de (3.9), (3.10), (3.11) e (3.12) determinamos quatro dos coeficientes  $b_i$  entre  $b_3$  e  $b_7$  em função de  $c_i$ ,  $i = 2(1)7$  e do  $b_i$  restante.

**Passo 3:** De (3.8) determinamos  $b_1$ .

**Passo 4:** Através de (3.13), (3.14), (3.15), (3.16), (3.17), (3.18) e (3.19), determinamos os coeficientes  $a_{ij}$ ,  $i = 3(1)7$  e  $j = 2(1)6$  com  $i > j$ .

Note que todos os  $a_{ij}$  são determinados em função dos  $c_i$ , aos quais atribuímos valores entre 0 e 1, e de um dos  $b_i$ , para  $3 \leq i \leq 7$ , escolhido arbitrariamente.

No entanto, não podemos pensar em considerar todos os  $c_i$  como parâmetros livres se quisermos obter métodos de RK explícitos com  $p = 5$  e  $s = 6$  estágios, pois isso nos levaria a um sistema de 19 equações a 16 incógnitas.

Portanto, precisamos considerar também três dos coeficientes  $c_i$ 's como incógnitas do sistema para que se tenha um sistema de 19 equações à 19 incógnitas. Daremos a seguir um procedimento para obtenção dos coeficientes de uma família de métodos RK explícitos com  $p = 5$  e  $s = 6$ , onde determinaremos, também,  $c_3$ ,  $c_4$  e  $c_5$ , isto é considerando-os como incógnitas do sistema.

### Algoritmo 3.2 .:

**Passo 1:** De (3.20) temos que  $b_2 = 0$ .

**Passo 2:** Através de (3.9), (3.10), (3.11) e (3.12) determinamos  $b_3$ ,  $b_4$ ,  $b_5$  e  $b_6$ .

**Passo 3:** Por (3.8) determinaremos  $b_1$ .

**Passo 4:** Determinamos  $a_{32}$  e  $c_3$  de (3.14) e (3.15) com  $i=3$ .

**Passo 5:** Determinamos  $a_{52}$  e  $a_{62}$  de (3.16) e (3.17).

**Passo 6:** Determinamos  $a_{53}$  e  $a_{54}$  de (3.14) e (3.15) com  $i=5$ .

**Passo 7:** Determinamos  $a_{64}$  e  $a_{65}$  de (3.19) e (3.13).

**Passo 8:** Determinamos  $a_{63}$  de (3.18).

**Passo 9:** Tomamos  $c_6 = 1$

**Passo 10:** Determinamos  $c_5$  através de (3.14) ou (3.15) com  $i=6$ .



**Passo 11:** Determinamos  $a_{i1}$ ,  $i = 1, 2, \dots, s$  através de (2.4).

No passo 9 tomamos  $c_6 = 1$ , por conveniência, para que as equações (3.14) e (3.15) se tornem iguais. Passamos a ter um sistema de 18 equações a 19 incógnitas, logo podemos deixar  $c_4$  ou  $c_5$  como parâmetro livre. No passo 10 optamos por deixar  $c_4$ .

Seguindo os passos acima encontramos uma família de métodos RK explícitos com ordem cinco e seis estágios.

### 3.5 Uma família de métodos RK explícitos com $p=5$ e $s=6$

Considerando  $c_2$  e  $c_4$  como parâmetros livres, para  $0 < c_2 \leq 1$  e  $0 < c_4 \leq 1$  mas com  $c_4$  diferente de  $\frac{1}{2}, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \frac{3c_2}{2}, \frac{12 + \sqrt{6}}{20}, \frac{12 - \sqrt{6}}{20}$ , obtivemos uma família de métodos RK explícitos com ordem cinco e seis estágios, sendo:

$$c_3 = \frac{3}{2}c_2, \quad c_5 = \frac{-3 + 5c_4}{5(-1 + 2c_4)}, \quad c_6 = 1, \quad b_2 = b_3 = 0, \quad a_{21} = c_2, \quad a_{31} = \frac{3}{8}c_2, \quad a_{32} = \frac{9}{8}c_2$$

$$b_4 = \frac{1}{12c_4(3 - 13c_4 + 20c_4^2 - 10c_4^3)}, \quad b_6 = \frac{m}{12(2 - 7c_4 + 5c_4^2)},$$

$$b_5 = \frac{125y^4}{12(18 - 135c_4 + 385c_4^2 - 500c_4^3 + 250c_4^4)}, \quad a_{41} = c_4 - \frac{5c_4^2}{6c_2} + \frac{2c_4^3}{9c_2^2}, \quad a_{42} = \frac{zc_4^2}{6c_2^2},$$

$$a_{43} = \frac{-2wc_4^2}{9c_2^2}, \quad a_{53} = \frac{-2(18c_2 - 105c_2c_4 + 45c_2^2c_4 + 150c_2c_4^2 + 20c_4^3 - 150c_2c_4^3)x}{-1125c_2^2y^3w},$$

$$a_{51} = \frac{36c_2 - 135c_2^2 - 210c_2c_4 + 900c_2^2c_4 + 495c_2c_4^2 - 2250c_2^2c_4^2 - 20c_4^3 - 300c_2c_4^3 + 1800c_2^2c_4^3)x}{2250c_2^2c_4(-1 + 2c_4)^3},$$

$$a_{52} = \frac{-c_4zx}{150c_2^2y^3}, \quad a_{54} = \frac{(-4 + 15c_2)(9 - 45c_4 + 80c_4^2 - 50c_4^3)}{-250c_4y^3w},$$

$$a_{61} = \frac{-36c_2 + 99c_2^2 + 258c_2c_4 - 702c_2^2c_4 - 717c_2c_4^2 + 1917c_2^2c_4^2 + 12c_4^3 + 825c_2c_4^3 - 2250c_2^2c_4^3 + n}{-18c_2^2xc_4m},$$

$$a_{62} = \frac{c_4z}{6c_2^2m}, \quad a_{63} = \frac{2(6c_2 - 33c_2c_4 + 9c_2^2c_4 + 45c_2c_4^2 + 4c_4^3 - 30c_2c_4^3)}{-9c_2^2wm},$$



$$a_{64} = \frac{(1 - c_4)(12 - 33c_2 - 72c_4 + 210c_2c_4 + 140c_4^2 - 450c_2c_4^2 - 80c_4^3 + 300c_2c_4^3)}{2c_4(3 - 10c_4 + 10c_4^2)wm},$$

$$a_{65} = \frac{25(-1 + c_4)y^3(-2 + 5c_4)}{-27 + 243c_4 - 870c_4^2 + 1560c_4^3 - 1400c_4^4 + 500c_4^5},$$

onde:

$$x = -3 + 5c_4,$$

$$z = 9c_2 - 4c_4,$$

$$m = 3 - 12c_4 + 10c_4^2,$$

$$y = -1 + 2c_4,$$

$$w = 3c_2 - 2c_4,$$

$$n = -10c_4^4(2 + 30c_2 - 90c_2^2).$$

## 4.1 Introdução

Conforme visto no capítulo anterior, as condições de simplificação de um sistema de equações diferenciais são determinadas por meio de um algoritmo de simplificação. Este algoritmo é baseado no método de simplificação de sistemas de equações diferenciais, proposto por R. M. M. de Almeida e J. J. Moret.

Neste capítulo, vamos apresentar o algoritmo de simplificação de sistemas de equações diferenciais, proposto por R. M. M. de Almeida e J. J. Moret. Este algoritmo é baseado no método de simplificação de sistemas de equações diferenciais, proposto por R. M. M. de Almeida e J. J. Moret.

Após a apresentação do algoritmo de simplificação de sistemas de equações diferenciais, vamos apresentar o algoritmo de simplificação de sistemas de equações diferenciais, proposto por R. M. M. de Almeida e J. J. Moret.

## 4.2 As Novas Condições de Simplificação

Conforme visto no capítulo anterior, as condições de simplificação de um sistema de equações diferenciais são determinadas por meio de um algoritmo de simplificação.

$$\sum_{i=1}^n a_i x_i = b_j (1 - c_j) \quad j = 1, 2, \dots, s. \quad (4.1)$$

Conforme visto no capítulo anterior, as condições de simplificação de um sistema de equações diferenciais são determinadas por meio de um algoritmo de simplificação. Este algoritmo é baseado no método de simplificação de sistemas de equações diferenciais, proposto por R. M. M. de Almeida e J. J. Moret.

## Capítulo 4

# Uma nova classe de Condições de Simplificação

### 4.1 Introdução

Conforme verificamos no capítulo anterior, as condições de simplificação e as condições de simplificação subsidiárias mostraram-se bastante eficientes como ferramenta auxiliar para obtenção dos coeficientes de métodos RK explícitos com ordem cinco.

Neste capítulo, introduziremos uma nova classe de condições de simplificação que, quando associadas a algumas daquelas apresentadas no capítulo 2, tornam ainda mais simples a busca de solução para o sistema.

Apresentaremos várias combinações possíveis entre condições de ordem e condições de simplificação.

### 4.2 As Novas Condições de Simplificação

Consideremos as relações:

$$\sum_{i=j+1}^s b_i a_{ij} = b_j(1 - c_j) \quad j = 2, 3, \dots, s. \quad (4.1)$$

Conforme mostraremos, se ao construirmos um método RK explícito com ordem cinco acrescentarmos ao sistema constituído pelas 17 condições de ordem as condições de simplificação (4.1), 6 das condições de ordem são automaticamente verificadas. Logo, podem ser desprezadas do sistema uma vez que as equações restantes garantem que as soluções daí obtidas fornecem métodos RK com ordem cinco.



Associando as condições de simplificação (4.1) a algumas condições de ordem do método, demonstraremos a seguir, como estas 6 condições de ordem são satisfeitas. Observe que de (4.1) para  $j = s$  temos que:

$$b_s(1 - c_s) = 0$$

o que nos leva à condição  $c_s = 1$ , pois  $b_s = 0$  nos levaria a um método RK com  $s - 1$  estágios.

Isto é, sempre que tivermos (4.1) para  $j = s$  devemos considerar  $c_s = 1$ .

### Equivalência 1:

Se tivermos (2.12), (2.13) e (4.1) satisfeitas, então, (2.14) é naturalmente satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned} \sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j &= \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2 + \left( \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} \right) c_3 + \left( \sum_{i=5}^s b_i a_{i4} \right) c_4 + \left( \sum_{i=6}^s b_i a_{i5} \right) c_5 \\ &\quad + \dots + (b_s a_{ss-1}) c_{s-1} \stackrel{(4.1)}{=} b_2(1 - c_2)c_2 + b_3(1 - c_3)c_3 + b_4(1 - c_4)c_4 \\ &\quad + b_5(1 - c_5)c_5 + b_6(1 - c_6)c_6 + \dots + b_{s-1}(1 - c_{s-1})c_{s-1} \\ &= \sum_{i=2}^{s-1} b_i c_i - \sum_{i=2}^{s-1} b_i c_i^2 \stackrel{(2.12) \text{ e } (2.13)}{=} \left( \frac{1}{2} - b_s c_s \right) - \left( \frac{1}{3} - b_s c_s^2 \right) \\ &\stackrel{c_s=1}{=} \left( \frac{1}{2} - b_s \right) - \left( \frac{1}{3} - b_s \right) = \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

### Equivalência 2:

Se tivermos (4.1), (2.13) e (2.15) satisfeitas, então, (2.17) é naturalmente satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned} \sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 &= \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2^2 + \left( \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} \right) c_3^2 + \left( \sum_{i=5}^s b_i a_{i4} \right) c_4^2 + \left( \sum_{i=6}^s b_i a_{i5} \right) c_5^2 \\ &\quad + \dots + (b_s a_{ss-1}) c_{s-1}^2 \stackrel{(3.1)}{=} b_2(1 - c_2)c_2^2 + b_3(1 - c_3)c_3^2 + b_4(1 - c_4)c_4^2 \\ &\quad + b_5(1 - c_5)c_5^2 + \dots + b_{s-1}(1 - c_{s-1})c_{s-1}^2 \\ &= \sum_{i=2}^{s-1} b_i c_i^2 - \sum_{i=2}^{s-1} b_i c_i^3 \stackrel{(2.13) \text{ e } (2.15)}{=} \left( \frac{1}{3} - b_s c_s^2 \right) - \left( \frac{1}{4} - b_s c_s^3 \right) \\ &\stackrel{c_s=1}{=} \left( \frac{1}{3} - b_s \right) - \left( \frac{1}{4} - b_s \right) = \frac{1}{12}. \end{aligned}$$



### Equivalência 3:

Se tivermos (4.1), (2.14) e (2.16) satisfeitas, então, (2.18) é naturalmente satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k &= \left( \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} \right) a_{32} c_2 + \left( \sum_{i=5}^s b_i a_{i4} \right) (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) \\
 &+ \left( \sum_{i=6}^s b_i a_{i5} \right) (a_{52} c_2 + a_{53} c_3 + a_{54} c_4) + \cdots \\
 &+ (b_s a_{ss-1}) \sum_{k=2}^{s-2} a_{s-1} c_k \\
 &\stackrel{(3.1)}{=} + b_3(1 - c_3) a_{32} c_2 + b_4(1 - c_4) (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) \\
 &+ b_5(1 - c_5) (a_{52} c_2 + a_{53} c_3 + a_{54} c_4) + \cdots \\
 &+ b_{s-1}(1 - c_{s-1}) \sum_{k=2}^{s-2} a_{s-1} c_k \\
 &= \sum_{i=3}^{s-1} \sum_{j=2}^{i-1} b_i a_{ij} c_j - \sum_{i=3}^{s-1} \sum_{j=2}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j \\
 &\stackrel{(2.14) \text{ e } (2.16)}{=} \left( \frac{1}{6} - \sum_{j=2}^{s-1} b_s a_{sj} c_j \right) - \left( \frac{1}{8} - \sum_{j=2}^{s-1} b_s c_s a_{sj} c_j \right) \\
 &\stackrel{c_s=1}{=} \left( \frac{1}{6} - \sum_{j=2}^{s-1} b_s a_{sj} c_j \right) - \left( \frac{1}{8} - \sum_{j=2}^{s-1} b_s a_{sj} c_j \right) = \frac{1}{24}.
 \end{aligned}$$

### Equivalência 4:

Se tivermos (4.1), (2.15) e (2.19) satisfeitas, então, (2.24) é naturalmente satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^3 &= \left( \sum_{i=3}^s b_i a_{i2} \right) c_2^3 + \left( \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} \right) c_3^3 + \left( \sum_{i=5}^s b_i a_{i4} \right) c_4^3 + \left( \sum_{i=6}^s b_i a_{i5} \right) c_5^3 \\
 &+ \cdots + b_s a_{ss-1} c_s^3 \stackrel{(3.1)}{=} b_2(1 - c_2) c_2^3 + b_3(1 - c_3) c_3^3 + b_4(1 - c_4) c_4^3 \\
 &+ b_5(1 - c_5) c_5^3 + \cdots + b_{s-1}(1 - c_{s-1}) c_{s-1}^3 \\
 &= \sum_{i=2}^{s-1} b_i c_i^3 - \sum_{i=2}^{s-1} b_i c_i^4 \stackrel{(2.15) \text{ e } (2.19)}{=} \left( \frac{1}{4} - b_s c_s^3 \right) - \left( \frac{1}{5} - b_s c_s^4 \right) \stackrel{c_s=1}{=} \frac{1}{20}.
 \end{aligned}$$

### Equivalência 5:

Se termos (4.1), (2.17) e (2.21) satisfeitas, então, (2.27) é naturalmente satisfeita. De

### Equivalência 5:

Se tivermos (4.1), (2.17) e (2.21) satisfeitas, então, (2.26) é naturalmente satisfeita.

De fato:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k^2 &= \left( \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} \right) a_{32} c_2^2 + \left( \sum_{i=5}^s b_i a_{i4} \right) (a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) \\
 &+ \left( \sum_{i=6}^s b_i a_{i5} \right) (a_{52} c_2^2 + a_{53} c_3^2 + a_{54} c_4^2) + \cdots \\
 &+ b_s a_{ss-1} \sum_{k=2}^{s-2} a_{s-1} c_k^2 \\
 &\stackrel{(3.1)}{=} b_3(1 - c_3) a_{32} c_2^2 + b_4(1 - c_4) (a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) \\
 &+ b_5(1 - c_5) (a_{52} c_2^2 + a_{53} c_3^2 + a_{54} c_4^2) + \cdots \\
 &+ b_{s-1}(1 - c_{s-1}) \sum_{k=2}^{s-2} a_{s-1} c_k^2 \\
 &= \sum_{i=3}^{s-1} \sum_{j=2}^{i-1} b_i a_{ij} c_j^2 - \sum_{i=3}^{s-1} \sum_{j=2}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j^2 \\
 &\stackrel{(2.17) \text{ e } (2.21)}{=} \left( \frac{1}{12} - \sum_{j=2}^{s-1} b_s a_{sj} c_j^2 \right) - \left( \frac{1}{15} - \sum_{j=2}^{s-1} b_s c_s a_{sj} c_j^2 \right) \\
 &\stackrel{c_s=1}{=} \left( \frac{1}{12} - \sum_{j=2}^{s-1} b_s a_{sj} c_j^2 \right) - \left( \frac{1}{15} - \sum_{j=2}^{s-1} b_s a_{sj} c_j^2 \right) = \frac{1}{60}.
 \end{aligned}$$

| Equivalência | Hipótese            | Tese   |
|--------------|---------------------|--------|
| 1            | (4.1)+(2.17)+(2.18) | (2.14) |
| 2            | (4.1)+(2.19)+(2.15) | (2.17) |
| 3            | (4.1)+(2.14)+(2.16) | (2.18) |
| 4            | (4.1)+(2.15)+(2.19) | (2.24) |
| 5            | (4.1)+(2.17)+(2.21) | (2.26) |
| 6            | (4.1)+(2.18)+(2.22) | (2.27) |

Tabela 4.1: Equivalência II

Portanto, podemos concluir que 5 das 17 condições de ordem, necessárias para a obtenção

de métodos de Runge-Kutta com ordem cinco, são automaticamente verificadas e podem ser

### Equivalência 6:

Se tivermos (4.1),(2.18) e (2.22) satisfeitas, então, (2.27) é naturalmente satisfeita. De fato:

$$\begin{aligned} \sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} a_{jk} \sum_{l=2}^{k-1} a_{kl} c_l &= \left( \sum_{i=5}^s b_i a_{i4} \right) a_{43} a_{32} c_2 \\ &+ \left( \sum_{i=6}^s b_i a_{i5} \right) (a_{53} a_{32} c_2 + a_{54} a_{42} c_2 + a_{54} a_{43} c_3) \\ &+ \cdots + b_s a_{ss-1} (a_{s-1s-2} a_{s-22} c_2) \\ (3.1) \quad &= b_4 (1 - c_4) a_{43} a_{32} c_2 + b_5 (1 - c_5) \\ &(a_{53} a_{32} c_2 + a_{54} a_{42} c_2 + a_{54} a_{43} c_3) \\ &+ \cdots + b_{s-1} (1 - c_{s-1}) a_{s-1s-2} a_{s-22} c_2 \\ &= \sum_{i=4}^{s-1} \sum_{j=3}^{i-1} \sum_{k=2}^{j-1} b_i a_{ij} a_{jk} c_k - \sum_{i=4}^{s-1} \sum_{j=3}^{i-1} \sum_{k=2}^{j-1} b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k \\ (2.18) \text{ e } (2.22) \quad &= \left( \frac{1}{24} - \sum_{j=3}^{s-1} \sum_{k=2}^{j-1} b_s a_{sj} a_{jk} c_k \right) - \left( \frac{1}{30} - \sum_{j=3}^{s-1} \sum_{k=2}^{j-1} b_s c_s a_{sj} a_{jk} c_k \right) \\ c_s=1 \quad &= \left( \frac{1}{24} - \sum_{j=3}^{s-1} \sum_{k=2}^{j-1} b_s a_{sj} a_{jk} c_k \right) - \left( \frac{1}{30} - \sum_{j=3}^{s-1} \sum_{k=2}^{j-1} b_s a_{sj} a_{jk} c_k \right) \\ &= \frac{1}{120}. \end{aligned}$$

As equivalências demonstradas podem ser, de forma resumida, apresentadas através da tabela:

| Equivalência | Hipótese            | Tese   |
|--------------|---------------------|--------|
| 1            | (4.1)+(2.12)+(2.13) | (2.14) |
| 2            | (4.1)+(2.13)+(2.15) | (2.17) |
| 3            | (4.1)+(2.14)+(2.16) | (2.18) |
| 4            | (4.1)+(2.15)+(2.19) | (2.24) |
| 5            | (4.1)+(2.17)+(2.21) | (2.26) |
| 6            | (4.1)+(2.18)+(2.22) | (2.27) |

Tabela 4.1: Equivalências II

Portanto, podemos concluir que 6 das 17 condições de ordem, necessárias para a obtenção de métodos de Runge-Kutta com ordem cinco, são automaticamente verificadas e podem ser



desprezadas do sistema sem qualquer prejuízo quando consideramos as condições de simplificação (4.1).

Podemos, então, obter uma família de métodos RK explícitos com ordem cinco, a partir da resolução do sistema de equações:

$$\sum_{i=j+1}^s b_i a_{ij} = b_j(1 - c_j) \quad j = 2, \dots, s \quad (4.2)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^k = \frac{1}{k+1} \quad k = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (4.3)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{1}{8} \quad (4.4)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i^2 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{1}{10} \quad (4.5)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15} \quad (4.6)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i c_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k = \frac{1}{30} \quad (4.7)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i \left( \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j \right)^2 = \frac{1}{20} \quad (4.8)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k = \frac{1}{40} \quad (4.9)$$

### 4.3 Algumas Combinações entre Condições de Ordem e Condições de Simplificação

As condições de simplificação (3.1), (3.2), as condições de simplificação subsidiárias (3.3), (3.4), (3.5), (3.6), (3.7) e as condições de simplificação (4.1), podem ser associadas às condições de ordem (2.11) a (2.27) de diferentes maneiras.

A partir dos resultados já obtidos e sintetizados através das tabelas 3.1 e 4.1, vamos considerar algumas combinações possíveis entre as condições de simplificação e as condições de simplificação subsidiárias, observando as consequências dessas combinações sobre as 17 condições de ordem que devem ser satisfeitas para obtenção de métodos RK com ordem cinco.

Apresentaremos, a seguir, três casos distintos de sistemas que podem gerar famílias de



métodos RK explícitos com ordem cinco.

**Primeiro caso:**

Consideremos as condições de simplificação (3.1), (3.2), as condições de simplificação subsidiárias (3.3), (3.4), (3.7) (4.1) e as condições de ordem (2.11) a (2.27).

Conforme demonstramos no capítulo anterior e apresentamos de forma resumida através da tabela 3.1, podem ser eliminadas do sistema as condições (2.14), (2.16), (2.17), (2.18), (2.20), (2.21), (2.22), (2.23), (2.25) e (2.26) e, ainda assim, garantir ordem cinco ao método RK daí obtido. Se, em lugar das condições de simplificação acima consideradas, utilizarmos as condições de simplificação (4.1) juntamente com algumas condições de ordem, conforme tabela 3.1, podem agora ser eliminadas do sistema as condições (2.14), (2.17), (2.18), (2.24) e (2.26).

Portanto, se considerarmos ao mesmo tempo os dois conjuntos de condições de simplificação associados às condições de ordem constatamos que das 17 equações de ordem originais devemos considerar no novo conjunto apenas as condições (2.11), (2.12), (2.13), (2.15) e (2.19).

Observe que a condição de ordem (2.27) pode ser eliminada tanto pelas condições de simplificação (3.5) e (3.6), quanto pela condição (4.1), o que pode ser constatado através da análise dos resultados apresentados nas tabelas 3.1 e 4.1. Isto justifica não termos aqui considerado, entre as condições de simplificação subsidiárias, as condições (3.5) e (3.6).

Por outro lado, a condição de ordem (2.24) somente é eliminada quando consideramos (4.1).

Podemos sintetizar esses resultados através da tabela que apresentamos a seguir:



| Condições de Ordem | Condições Eliminadas |            | Condições Restantes |
|--------------------|----------------------|------------|---------------------|
|                    | Tabela 3.1           | Tabela 4.1 |                     |
| (2.11)             |                      |            | (2.11)              |
| (2.12)             |                      |            | (2.12)              |
| (2.13)             |                      |            | (2.13)              |
| (2.14)             | X                    | X          |                     |
| (2.15)             |                      |            | (2.15)              |
| (2.16)             | X                    |            |                     |
| (2.17)             | X                    | X          |                     |
| (2.18)             | X                    | X          |                     |
| (2.19)             |                      |            | (2.19)              |
| (2.20)             | X                    |            |                     |
| (2.21)             | X                    |            |                     |
| (2.22)             | X                    |            |                     |
| (2.23)             | X                    |            |                     |
| (2.24)             |                      | X          |                     |
| (2.25)             | X                    |            |                     |
| (2.26)             | X                    | X          |                     |
| (2.27)             |                      | X          |                     |

Tabela 4.2: Primeiro caso

Na primeira coluna da tabela 4.2 temos as condições de ordem do sistema original para obtenção de um método RK com ordem cinco, na segunda coluna as condições de ordem que foram descartadas conforme tabela 3.1, na terceira coluna as condições de ordem que foram descartadas conforme tabela 4.1 e finalmente na quarta coluna as condições de ordem que restaram no sistema.

**Conclusão:**

Podemos gerar métodos RK explícitos com ordem cinco e s estágios considerando, em lugar do sistema original constituído pelas 17 condições de ordem, o seguinte sistema simplificado:

$$\sum_{j=3}^{i-1} a_{ij}c_j = \frac{c_i^2}{2}, \quad i = 3, 4, \dots, s \tag{4.10}$$

$$\sum_{j=3}^{i-1} a_{ij}c_j^2 = \frac{c_i^3}{3}, \quad i = 3, 4, \dots, s \tag{4.11}$$

$$\sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0 \tag{4.12}$$



$$\sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} = 0 \quad (4.13)$$

$$b_2 = 0 \quad (4.14)$$

$$\sum_{i=j+1}^s b_i a_{ij} = b_j(1 - c_j), \quad j = 3, \dots, s \quad (4.15)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (4.16)$$

É importante observar que se tomarmos  $b_2 = 0$ , a equação (4.1) para  $j=2$  será a mesma que (3.3).

## Segundo caso:

Consideremos as condições de ordem (2.11) a (2.27), as condições de simplificação (3.1) e as condições de simplificação subsidiárias (3.3), (3.4) e (3.7).

Conforme tabela 3.1, podem ser eliminadas do sistema as condições (2.14), (2.16), (2.18), (2.20), (2.22), (2.23) e (2.25).

Se, em lugar das condições de simplificação acima consideradas, utilizarmos as condições de simplificação (4.1) juntamente com as condições de ordem, conforme tabela 3.1, podemos eliminar do sistema as condições (2.14), (2.16), (2.18), (2.20), (2.22), (2.23) e (2.25).

Portanto, se considerarmos ao mesmo tempo os dois conjuntos de condições de simplificação associadas às condições de ordem, constatamos que das 17 condições originais devemos considerar, no novo conjunto, apenas (2.11), (2.12), (2.13), (2.15), (2.19) e (2.21).

Observe que, neste caso, não consideramos as condições de simplificação (3.2). Portanto, não poderíamos descartar (2.21), (2.26) e (2.17) que são as únicas que dependem de (3.2) como podemos constatar na tabela 3.1.

Porém, podemos descartar (2.26) e (2.17) quando consideramos as condições de simplificação (4.1), restando apenas (2.21) que não pode ser descartada.

Não se faz necessário considerar as condições de simplificação (3.5) e (3.6) uma vez que as mesmas são necessárias apenas para descartar (2.27), conforme podemos verificar em tabela 3.1, e já temos (2.27) descartada quando consideramos as condições de simplificação (4.1), conforme podemos observar na tabela 4.1.

Para uma melhor compreensão, apresentamos todos estes resultados através da tabela 4.3



que apresentaremos a seguir:

| Condições de Ordem | Condições Eliminadas |            | Condições Restantes |
|--------------------|----------------------|------------|---------------------|
|                    | Tabela 3.1           | Tabela 4.1 |                     |
| (2.11)             |                      |            | (2.11)              |
| (2.12)             |                      |            | (2.12)              |
| (2.13)             |                      |            | (2.13)              |
| (2.14)             | X                    | X          |                     |
| (2.15)             |                      |            | (2.15)              |
| (2.16)             | X                    |            |                     |
| (2.17)             |                      | X          |                     |
| (2.18)             | X                    | X          |                     |
| (2.19)             |                      |            | (2.19)              |
| (2.20)             | X                    |            |                     |
| (2.21)             |                      |            | (2.21)              |
| (2.22)             | X                    |            |                     |
| (2.23)             | X                    |            |                     |
| (2.24)             |                      | X          |                     |
| (2.25)             | X                    |            |                     |
| (2.26)             |                      | X          |                     |
| (2.27)             |                      | X          |                     |

Tabela 4.3: Segundo Caso

Conclusão:

O sistema original constituído pelas 17 condições de ordem pode ser substituído pelo sistema simplificado, que apresentaremos a seguir, e que também irá gerar métodos de RK explícitos com ordem cinco e s estágios.

$$\sum_{j=3}^{i-1} a_{ij}c_j = \frac{c_i^2}{2}, \quad i = 3, 4, \dots, s \tag{4.17}$$

$$\sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0 \tag{4.18}$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} = 0 \tag{4.19}$$

$$b_2 = 0 \tag{4.20}$$

$$\sum_{i=j+1}^s b_i a_{ij} = b_j(1 - c_j) \quad j = 3, \dots, s \tag{4.21}$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4. \tag{4.22}$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15}. \tag{4.23}$$



**Terceiro caso:**

Consideremos as condições de ordem (2.11) a (2.27), as condições de simplificação (3.1) e as condições de simplificação subsidiárias (3.1), (3.3), (3.4), (3.5), (3.6) e (3.7).

Conforme a tabela 3.1, podem ser eliminadas do sistema as condições (2.14), (2.16), (2.18), (2.20), (2.22), (2.23), (2.25) e (2.27).

Observe que, neste caso, não estamos considerando as condições de simplificação (3.2), portanto não podemos descartar (2.17), (2.21) e (2.26). Porém, como estamos considerando (3.5) e (3.6) podemos descartar (2.27) (veja tabela 3.1), mesmo não estando considerando as condições de simplificação (4.1).

Portanto constatamos que das 17 equações originais devemos considerar no novo conjunto apenas as condições (2.11), (2.12), (2.13), (2.15), (2.17), (2.19), (2.21), (2.24) e (2.26).

Sintetizaremos estes resultados através da tabela 4.4 que apresentamos a seguir:

| Condições de Ordem | Condições Eliminadas | Condições Restantes |
|--------------------|----------------------|---------------------|
|                    | Tabela 3.1           |                     |
| (2.11)             |                      | (2.11)              |
| (2.12)             |                      | (2.12)              |
| (2.13)             |                      | (2.13)              |
| (2.14)             | X                    |                     |
| (2.15)             |                      | (2.15)              |
| (2.16)             | X                    |                     |
| (2.17)             |                      | (2.17)              |
| (2.18)             | X                    |                     |
| (2.19)             |                      | (2.19)              |
| (2.20)             | X                    |                     |
| (2.21)             |                      | (2.21)              |
| (2.22)             | X                    |                     |
| (2.23)             | X                    |                     |
| (2.24)             |                      | (2.24)              |
| (2.25)             | X                    |                     |
| (2.26)             |                      | (2.26)              |
| (2.27)             | X                    |                     |

Tabela 4.4: Terceiro Caso

**Conclusão:**

Um novo sistema pode ser considerado em lugar do sistema original que irá gerar métodos



RK com ordem cinco e s estágios. As equações desse sistema são:

$$\sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{c_i^2}{2}, \quad i = 3, 4, \dots, s \quad (4.24)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0 \quad (4.25)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} = 0 \quad (4.26)$$

$$b_2 = 0 \quad (4.27)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i a_{i3} = 0 \quad (4.28)$$

$$\sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} a_{j2} = 0 \quad (4.29)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (4.30)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12} \quad (4.31)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15} \quad (4.32)$$

$$\sum_{i=3}^s b_i \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20} \quad (4.33)$$

$$\sum_{i=4}^s b_i \sum_{j=3}^{i-1} a_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60}. \quad (4.34)$$

## 4.4 Uma nova equivalência

Em [5], Butcher trabalha com as condições consideradas no segundo caso, substituindo por conveniência a equação (4.19) pela diferença entre (4.18) e (4.19). Isto é, utilizando a equação:

$$\sum_{i=3}^s b_i (1 - c_i) a_{i2} = 0 \quad (4.35)$$

Ainda, a equação (4.23) é substituída por:

$$\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i (1 - c_i) a_{ij} c_j (c_j - c_3) = \frac{1}{60} - \frac{c_3}{24} \quad (4.36)$$

considerando a equivalência existente entre ambas, ou seja:

$$\sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15} \iff \sum_{i=3}^s \sum_{j=2}^{i-1} b_i (1 - c_i) a_{ij} c_j (c_j - c_3) = \frac{1}{60} - \frac{c_3}{24} \quad (4.37)$$



De fato:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i (1 - c_i) a_{ij} c_j (c_j - c_3) &= \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i a_{ij} c_j^2 - b_i a_{ij} c_j c_3 - b_i c_i a_{ij} c_j^2 + b_i c_i a_{ij} c_j c_3 \\
 &= \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i a_{ij} c_j^2 - c_3 \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i a_{ij} c_j \\
 &\quad - \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j^2 + c_3 \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j \\
 &\stackrel{(2.17), (2.14), (2.16)}{=} \frac{1}{12} - \frac{1}{6} c_3 - \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j^2 + \frac{1}{8} c_3 \\
 &= \frac{1}{12} - \frac{c_3}{24} - \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j^2.
 \end{aligned}$$

Logo, podemos escrever a seguinte igualdade :

$$- \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i (1 - c_i) a_{ij} c_j (c_j - c_3) - \frac{c_3}{24} + \frac{1}{12} = \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j^2$$

Então, temos que:

$$\sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15} \iff - \sum_{i=3j=2}^s \sum_{i=1}^{i-1} b_i (1 - c_i) a_{ij} c_j (c_j - c_3) - \frac{c_3}{24} + \frac{1}{12} = \frac{1}{15}$$

Portanto, temos a equivalência (4.37)

## 4.5 Uma família de métodos de Runge-Kutta explícitos de ordem cinco e seis estágios.

Considerando as equações do segundo caso, se tomarmos em particular método de RK com seis estágios, a equação (4.36) se reduz a:

$$b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3) = \frac{1}{60} - \frac{c_3}{24} \quad (4.38)$$



De fato

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=3}^6 \sum_{j=2}^{i-1} b_i (1 - c_i) a_{ij} c_j (c_j - c_3) &= b_3 (1 - c_3) a_{32} c_2 (c_2 - c_3) + b_4 (1 - c_4) a_{42} c_2 (c_2 - c_3) \\
 &\quad + b_5 (1 - c_5) a_{52} c_2 (c_2 - c_3) + b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3) \\
 &= [(b_3 a_{32} + b_4 a_{42} + b_5 a_{52}) - (b_3 c_3 a_{32} + b_4 c_4 a_{42} + b_5 c_5 a_{52})] \\
 &\quad c_2 (c_2 - c_3) + b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3) \\
 &= \left[ \left( \sum_{i=3}^6 b_i a_{i2} - b_6 a_{62} \right) - \left( \sum_{i=3}^6 b_i c_i a_{i2} - b_6 c_6 a_{62} \right) \right] c_2 (c_2 - c_3) \\
 &\quad + b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3) \\
 &\stackrel{c_6=1}{=} \sum_{i=3}^6 b_i a_{i2} - \sum_{i=3}^6 b_i c_i a_{i2} + b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3) \\
 &= \sum_{i=3}^6 b_i (1 - c_i) a_{i2} + b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3) \\
 &\stackrel{(4.35)}{=} b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3)
 \end{aligned}$$

Portanto, temos que:

$$\sum_{i=3}^6 \sum_{j=2}^{i-1} b_i (1 - c_i) a_{ij} c_j (c_j - c_3) = b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3). \quad (4.39)$$

De (4.39) e (4.36), temos (4.38).

Logo, o sistema obtido no segundo caso, quando consideramos métodos RK com ordem cinco e seis estágios pode ser substituído por:

$$\sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{c_i^2}{2}, \quad i = 3, 4, \dots, 6 \quad (4.40)$$

$$\sum_{i=3}^6 b_i (1 - c_i) a_{i2} = 0 \quad (4.41)$$

$$b_2 = 0 \quad (4.42)$$

$$\sum_{i=j+1}^6 b_i a_{ij} = b_j (1 - c_j), \quad j = 2, 3, \dots, 6 \quad (4.43)$$

$$\sum_{i=2}^s b_i c_i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (4.44)$$

$$b_5 (1 - c_5) a_{54} c_4 (c_4 - c_3) = \frac{1}{60} - \frac{c_3}{24} \quad (4.45)$$

A resolução desse sistema nos fornece uma família de métodos RK com ordem cinco e seis estágios e pode ser obtida através dos seguintes passos:



#### Algoritmo 4.1 .:

**Passo 1:** Considere  $c_2, c_3, c_4$  e  $c_5$  como parâmetros livres, excluindo durante o processo valores que provocam divisão por zero. De (4.43) para  $j = 6$  temos que  $c_6 = 1$ .

**Passo 2:** De (4.44) com  $k = 1, 2, 3$  e  $4$ ; determinamos  $b_3, b_4, b_5$  e  $b_6$ .

**Passo 3:** De (4.44) com  $k = 0$ , determinamos  $b_1$ .

**Passo 4:** De (4.45) determinamos  $a_{54}$ .

**Passo 5:** De (4.40)  $i = 3, 4$ ; determinamos  $a_{32}$  e  $a_{42}$ .

**Passo 6:** De (4.41) determinamos  $a_{52}$ .

**Passo 7:** De (4.40)  $i = 5$ ; determinamos  $a_{53}$ .

**Passo 8:** De (4.43)  $j = 2, 3, 4$  e  $5$ ; determinamos  $a_{62}, a_{63}, a_{64}$  e  $a_{65}$ .

**Passo 9:** Determinamos  $a_{i1}, i = 1(1)6$ , da relação  $\sum_{i=1}^s a_{ij} = c_i$  dada pela própria definição do método.

Seguindo os passos acima obtemos a seguinte família de métodos RK com ordem cinco e seis estágios:

$$a_{32} = \frac{c_3^2}{2c_2}, \quad a_{42} = \frac{-2a_{43}c_3 + c_4^2}{2c_2},$$

$$a_{52} = \frac{c_5(-6a_{43}c_3^2 + 10a_{43}c_3^3 - 5c_3^2c_4^2 + 5c_3c_4^3 + 6a_{43}c_3c_5 - 20a_{43}c_3^3c_5 + 3c_3c_4c_5 - 3c_4^2c_5 + t_1)}{2c_2(c_3 - c_4)c_4R},$$

$$a_{62} = \frac{6a_{43}c_3 - 16a_{43}c_3^2 + 10a_{43}c_3^3 + 3c_3c_4 - 3c_4^2 - 5c_3^2c_4^2 + 5c_3c_4^3 - 10a_{43}c_3c_5 + 30a_{43}c_3^3c_5 + t_2}{2c_2(c_3 - c_4)c_4P},$$

$$a_{53} = \frac{c_5(-c_3 + c_5)(6a_{43}c_3 - 10a_{43}c_3^2 + 2c_4^2 - 5c_4^3 - 10a_{43}c_3c_5 + 20a_{43}c_3^3c_5 - 2c_4c_5 + 5c_4^2c_5)}{2c_3c_4(-c_3 + c_4)R},$$

$$a_{63} = \frac{-(-1 + c_3)(-6a_{43}c_3^2 + 10a_{43}c_3^3 - 6c_4 + 2c_3c_4 + 16c_4^2 - 7c_3c_4^2 - 10c_4^3 + 5c_3c_4^3 + 6a_{43}c_3c_5 + t_3)}{2c_3(c_3 - c_4)c_4(c_3 - c_5)P},$$

$$a_{54} = \frac{(2 - 5c_3)c_5(-c_3 + c_5)(-c_4 + c_5)}{2c_4(-c_3 + c_4)R},$$

$$a_{64} = \frac{(-1 + c_3)(-1 + c_4)(6 - 10c_3 - 2c_4 + 5c_3c_4 - 14c_5 + 25c_3c_5 + 10c_5^2 - 20c_3c_5^2)}{2(c_3 - c_4)c_4(c_4 - c_5)P},$$

$$a_{65} = \frac{(-1 + c_3)(-1 + c_4)(-1 + c_5)R}{c_5(-c_3 + c_5)(-c_4 + c_5)P},$$

$$b_1 = \frac{-(R - 5c_5 + 10c_3c_5 + 10c_4c_5 - 30c_3c_4c_5)}{60c_3c_4c_5}, \quad b_2 = 0,$$

$$b_3 = \frac{3 - 5c_4 - 5c_5 + 10c_4c_5}{60(-1 + c_3)c_3(-3 + c_4)(c_3 - c_5)},$$

$$b_4 = \frac{3 - 5c_3 - 5c_5 + 10c_3c_5}{60(-1 + c_4)c_4(-c_3 + c_4)(-c_4 + c_5)},$$

$$b_5 = \frac{-3 + 5c_3 + 5c_4 - 10c_3c_4}{60(-1 + c_5)c_5(-c_3 + c_5)(-c_4 + c_5)},$$

$$b_6 = \frac{P}{60(-1 + c_3)(-1 + c_4)(-1 + c_5)},$$

$$a_{11} = 0,$$

$$a_{21} = c_2,$$

$$a_{31} = c_3 - a_{32},$$

$$a_{41} = c_4 - (a_{42} + a_{43}),$$

$$a_{51} = c_5 - (a_{52} + a_{53} + a_{54}),$$

$$a_{61} = c_6 - (a_{62} + a_{63} + a_{64} + a_{65}),$$

onde:

$$t_1 = 10c_3^2c_4^2c_5 - 10c_3c_4^3c_5 - 10a_{43}c_3c_5^2 + 20a_{43}c_3^2c_5^2 - 5c_3c_4c_5^2 + 5c_4^2c_5^2,$$

$$t_2 = -20a_{43}c_3^3c_5 - 5c_3c_4c_5 + 5c_4^2c_5 + 10c_3^2c_4^2c_5 - 10c_3c_4^3c_5,$$

$$t_3 = -20a_{43}c_3^3c_5 + 14c_4c_5 - 39c_4^2c_5 + 25c_4^3c_5 - 10a_{43}c_3c_5^2 + 20a_{43}c_3^2c_5^2 - 10c_4c_5^2 + 30c_4^2c_5^2 - 20c_4^3c_5^2,$$

$$R = 3 - 5c_3 - 5c_4 + 10c_3c_4,$$

$$P = -12 + 15c_3 + 15c_4 - 20c_3c_4 + 15c_5 - 20c_3c_5 - 20c_4c_5 + 30c_3c_4c_5.$$

Note que  $c_2$ ,  $c_3$ ,  $c_4$ ,  $c_5$  e  $a_{43}$  ficaram como parâmetros livres. Além disso, sabemos que  $c_1 = 0$  e  $c_6 = 1$ .

Escolhendo  $c_3 = \frac{1}{4}$ ,  $c_4 = \frac{1}{2}$ ,  $c_5 = \frac{3}{4}$ ,  $c_2 = u$  ( $u \neq 0$ ) e  $a_{43} = v$ , vamos obter a seguinte sub-família de métodos RK explícitos com ordem cinco e seis estágios, tendo  $u$  e  $v$  como parâmetros livres:



|               |                                                   |                        |                      |                 |                 |                |
|---------------|---------------------------------------------------|------------------------|----------------------|-----------------|-----------------|----------------|
| 0             |                                                   |                        |                      |                 |                 |                |
| $u$           | $u$                                               |                        |                      |                 |                 |                |
| $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{4} - \frac{1}{32u}$                     | $\frac{1}{32u}$        |                      |                 |                 |                |
| $\frac{1}{2}$ | $\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{8u}\right)(1 - 2v)$ | $\frac{1}{8u}(1 - 2v)$ | $v$                  |                 |                 |                |
| $\frac{3}{4}$ | $\frac{3(1-3u-v+4uv)}{16u}$                       | $\frac{3(-1+v)}{16u}$  | $\frac{3}{4}(1 - v)$ | $\frac{9}{16}$  |                 |                |
| 1             | $\frac{11-12v}{7} - \frac{7-6v}{14u}$             | $\frac{7-6v}{14u}$     | $\frac{12v}{7}$      | $\frac{-12}{7}$ | $\frac{8}{7}$   |                |
|               | $\frac{7}{90}$                                    | 0                      | $\frac{32}{90}$      | $\frac{12}{90}$ | $\frac{32}{90}$ | $\frac{7}{90}$ |

É interessante registrar que essa sub-família é apresentada por Butcher em [5], p.199, mas com incorreção nos valores atribuídos aos elementos  $a_{51}$  e  $a_{52}$ , o que faz com que os métodos de Butcher não tenham ordem cinco para todo valor de  $u$  e  $v$ .

O resultado principal deste capítulo, será uma relação de recorrência a partir da qual podem ser geradas algumas condições de ortogonalidade do método, equivalentes às condições de ordem definidas por Butcher.

## 5.2 Uma formalização matricial dos métodos de Runge Kutta

Em (2.2) e (2.3) introduzimos a classe dos métodos de RK que considera o cada passo de integração e avaliações da função  $f(x, y)$  em pontos  $(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j)$ ,  $i = 1, \dots, s$ .

Podemos considerar o valor gerado por  $y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j$  como uma aproximação para a solução exata  $y(x)$  em  $x = x_n + c_i h$ , que denotamos por  $y_{n,i}$ .

Logo é:

$$y_{n,i} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j, \text{ para } i = 1(1)s$$

Daí, as derivadas  $K_i$  definidas em (2.3) podem ser escritas como:

$$K_i = f(x_n + c_i h, y_{n,i}).$$

## Capítulo 5

# A teoria de Albrecht

### 5.1 Introdução

Neste capítulo, apresentaremos uma outra formalização para a classe dos métodos de Runge-Kutta desenvolvida por Albrecht [2]. Através desta, podemos interpretar as derivadas calculadas a cada passo de integração como aproximações para a solução em pontos internos ao passo, denominadas estágios intermediários do método.

O resultado principal deste capítulo, será uma relação de recorrência a partir da qual podem ser geradas algumas condições de ortogonalidade do método, equivalentes às condições de ordem definidas por Butcher.

### 5.2 Uma formalização matricial dos métodos de Runge Kutta

Em (2.2) e (2.3) introduzimos a classe dos métodos de RK que considera a cada passo de integração  $s$  avaliações da função  $f(x, y)$  em pontos  $(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j)$ ,  $i = 1(1)s$ .

Podemos considerar o valor gerado por  $y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j$  como uma aproximação para a solução exata  $y(x)$  em  $x = x_n + c_i h$ , que denotaremos por  $y_{n+c_i}$ .

Isto é,

$$y_{n+c_i} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j \text{ para } i = 1(1)s.$$

Daí, as derivadas  $K_i$  definidas em (2.3) podem ser escritas como:

$$K_i = f(x_n + c_i h, y_{n+c_i}).$$



Assim sendo, podemos definir a classe dos métodos de RK através da seguinte representação linear:

$$y_{n+c_i} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(x_n + c_j h, y_{n+c_j}), \quad i = 1(1)s \quad (5.1)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(x_n + c_j h, y_{n+c_j}), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.2)$$

onde as aproximações  $y_{n+c_i}$  podem ser interpretadas como estágios intermediários do método e a aproximação procurada  $y_{n+1}$  como o estágio final.

No que segue vamos considerar  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , apenas para simplificar certas representações e desenvolvimentos, mas todos os resultados serão também válidos com pequenos ajustes para  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ .

Representando matricialmente as equações (5.1) e (5.2), respectivamente, temos:

$$\begin{pmatrix} y_{n+c_1} \\ y_{n+c_2} \\ y_{n+c_3} \\ \vdots \\ y_{n+c_s} \end{pmatrix} = y_n \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1s} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2s} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & a_{s3} & \dots & a_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(x_n + c_1 h, y_{n+c_1}) \\ f(x_n + c_2 h, y_{n+c_2}) \\ f(x_n + c_3 h, y_{n+c_3}) \\ \vdots \\ f(x_n + c_s h, y_{n+c_s}) \end{pmatrix}$$

e

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 b_2 \dots b_s) \begin{pmatrix} f(x_n + c_1 h, y_{n+c_1}) \\ f(x_n + c_2 h, y_{n+c_2}) \\ f(x_n + c_3 h, y_{n+c_3}) \\ \vdots \\ f(x_n + c_s h, y_{n+c_s}) \end{pmatrix}, \quad n = 0, 1, \dots$$

ou ainda,

$$y_{n+c} = y_n e + h A f(x_{n+c}, y_{n+c}) \in \mathbb{R}^s \quad (5.3)$$

$$y_{n+1} = y_n + h b^t f(x_{n+c}, y_{n+c}) \in \mathbb{R}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.4)$$

onde,

$e = (1, 1, \dots, 1)^t \in \mathbb{R}^s$ ;  $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{s \times s}$ ;  $b^t = (b_1 b_2 \dots b_s)$ ;  $y_{n+c} = (y_{n+c_1}, \dots, y_{n+c_s})^t$  e

$f(x_{n+c}, y_{n+c}) = [f(x_n + c_1 h, y_{n+c_1}), \dots, f(x_n + c_s h, y_{n+c_s})]^t$ .

## 5.3 Erro de Discretização Local

Considerando a substituição em (5.3) das aproximações  $y_{n+c}$  pela correspondente solução exata  $y(x)$  em  $x = x_n + ch$  e a substituição em (5.4) de  $y_{n+1}$  por  $y(x)$  em  $x = x_n + h$ , obtemos:

$$y(x_n + ch) = y(x_n)e + hAf(x_{n+c}, y(x_n + ch)) + hd_{n+c} \quad (5.5)$$

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hb^t f(x_{n+c}, y(x_n + ch)) + h\hat{d}_{n+1} \quad (5.6)$$

onde  $y(x_n + ch) = [y(x_n + c_1h), \dots, y(x_n + c_sh)]^t$ .

**Definição 5.1 :** Denominamos erro de discretização local dos estágios internos do método RK ao valor  $d_{n+c} \in \mathbb{R}^s$  e erro de discretização local do estágio final ao valor  $\hat{d}_{n+1} \in \mathbb{R}$ .

O erro de discretização dos estágios intermediários e do estágio final são expressos da seguinte forma:

$$d_{n+c} = \sum_{l=1}^{p+1} \gamma_l y^{(l)}(x_n) h^{l-1} + O(h^{p+1}) \quad (5.7)$$

$$\hat{d}_{n+1} = \sum_{l=1}^{p+1} \hat{\gamma}_l y^{(l)}(x_n) h^{l-1} + O(h^{p+1}), \quad (5.8)$$

com

$$\gamma_l = \frac{1}{l!} c^j - \frac{1}{(l-1)!} A c^{l-1}$$

$$\hat{\gamma}_l = \frac{1}{l!} - \frac{1}{(l-1)!} b^T c^{l-1}, \text{ com } c^l = (c_1^l, c_2^l, \dots, c_s^l)^t.$$

De fato:

De (5.6) temos:

$$h\hat{d}_{n+1} = y(x_n + h) - y(x_n) - h[b_1 y'(x_n + c_1h) + b_2 y'(x_n + c_2h) + b_3 y'(x_n + c_3) + \dots + b_s y'(x_n + c_sh)]$$

Considerando a expansão em série de Taylor na vizinhança de  $x = x_n$  obtemos:

$$h\hat{d}_{n+1} = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!} y''(x_n) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_n) + \dots - y(x_n)$$

$$-h \left[ b_1 \left( y'(x_n) + c_1 h y''(x_n) + \frac{(c_1 h)^2}{2!} y'''(x_n) + \frac{(c_1 h)^3}{3!} y^{(4)}(x_n) + \dots \right) \right.$$

$$\begin{aligned}
& +b_2 \left( y'(x_n) + c_2 h y''(x_n) + \frac{(c_2 h)^2}{2!} y'''(x_n) + \frac{(c_2 h)^3}{3!} y^{(4)}(x_n) + \dots \right) \\
& +b_3 \left( y'(x_n) + c_3 h y''(x_n) + \frac{(c_3 h)^2}{2!} y'''(x_n) + \frac{(c_3 h)^3}{3!} y^{(4)}(x_n) \right) \\
& +\dots \dots +b_s \left( y'(x_n) + c_s h y''(x_n) + \frac{(c_s h)^2}{2!} y'''(x_n) + \frac{(c_s h)^3}{3!} y^{(4)}(x_n) + \dots \right) \Big]
\end{aligned}$$

$$= [1 - (b_1 + b_2 + b_3 + \dots + b_s)] y'(x_n) h$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ \frac{1}{2!} - \frac{1}{1!} (b_1 c_1 + b_2 c_2 + \dots + b_s c_s) \right] y''(x_n) h^2 \\
& + \left[ \frac{1}{3!} - \frac{1}{2!} (b_1 c_1^2 + b_2 c_2^2 + \dots + b_s c_s^2) \right] y'''(x_n) h^3 + \dots
\end{aligned}$$

Isto é,

$$\begin{aligned}
\hat{d}_{n+1} &= \left[ \frac{1}{1!} - \frac{1}{0!} (b_1 + b_2 + \dots + b_s) \right] y'(x_n) \\
&+ \left[ \frac{1}{2!} - \frac{1}{1!} (b_1 c_1 + b_2 c_2 + \dots + b_s c_s) \right] y''(x_n) h \\
&+ \left[ \frac{1}{3!} - \frac{1}{2!} (b_1 c_1^2 + b_2 c_2^2 + \dots + b_s c_s^2) \right] y'''(x_n) h^2 + \dots,
\end{aligned}$$

ou seja:

$$\hat{d}_{n+1} = \sum_{l=1}^{p+1} \hat{\gamma}_l y^{(l)}(x_n) h^{l-1} + O(h^{p+1}),$$

onde

$$\hat{\gamma}_l = \frac{1}{l!} - \frac{1}{(l-1)!} b^t c^{l-1}, \quad c^l = (c_1^l c_2^l \dots c_s^l)^t.$$

Utilizando um procedimento análogo, temos que

$$d_{n+c} = \sum_{l=1}^{p+1} \gamma_l y^{(l)}(x_n) h^{l-1} + O(h^{p+1})$$

onde

$$\gamma_l = \frac{1}{l!} c^l - \frac{1}{(l-1)!} A c^{l-1}.$$

**Definição 5.2** Dizemos que os estágios internos (5.3) são consistentes se, e somente se,  $\gamma_1 = 0$ , isto é se, e somente se,  $c = Ae$ .

**Definição 5.3** O estágio final tem ordem de consistência  $q \in \mathbb{N}$  se, e somente se,  $\hat{\gamma}_l = 0$  ( $l = 1, \dots, q$ ) e  $\hat{\gamma}_{q+1} \neq 0$ , isto é se, e somente se

$$b^t c^{l-1} = \frac{1}{l}, \quad (l = 1, \dots, q) \text{ e}$$

$$b^t c^q \neq \frac{1}{q+1}.$$

**Definição 5.4** Os estágios intermediários tem ordem de consistência  $q$  se, e somente se,  $\gamma_l = 0$  ( $l = 1, \dots, q$ ) e  $\gamma_{q+1} \neq 0$ , isto é

$$A c^{l-1} = \frac{1}{l} c^l, \quad (l = 1, \dots, q) \text{ e}$$

$$A c^q \neq \frac{1}{q+1}.$$

**Definição 5.5** Se o estágio final e os estágios intermediários tiverem ordem de consistência  $q$  então dizemos que o método de RK tem ordem de convergência  $q$ .

## 5.4 Algumas Relações Importantes

Neste parágrafo, procuraremos estabelecer algumas relações importantes, que irão permitir determinar uma relação de recorrência geradora de condições de ordem para os métodos de Range-Kutta.



Subtraindo (5.3) e (5.4) de (5.5) e (5.6), respectivamente, obtemos:

$$[y(x_n + ch) - y_{n+c}] = [y(x_n) - y_n]e + hA[f(x_{n+c}, y(x_n + ch)) - f(x_{n+c}, y_{n+c})] + hd_{n+c}$$

$$[y(x_n + h) - y_{n+1}] = [y(x_n) - y_n] + hb^t[f(x_{n+c}, y(x_n + ch)) - f(x_{n+c}, y_{n+c})] + h\hat{d}_{n+1}.$$

Sejam:

$$q_{n+c} = y(x_n + ch) - y_{n+c} \in \mathbb{R}^s; \quad \hat{q}_{n+1} = y(x_n + h) - y_{n+1} \in \mathbb{R};$$

$$t_{n+c} = f[x_{n+c}, y(x_n + ch)] - f(x_{n+c}, y_{n+c}) \in \mathbb{R}^s.$$

Então podemos escrever

$$q_{n+c} = \hat{q}_n e + hd_{n+c} + hAt_{n+c} \quad (5.9)$$

$$\hat{q}_{n+1} = \hat{q}_n + h\hat{d}_{n+1} + hb^t t_{n+c} \quad \hat{q}_0 = 0 \quad (5.10)$$

De (5.10), temos:

$$\hat{q}_1 = \hat{q}_0 + h\hat{d}_{0+1} + hb^t t_{0+c} = h\hat{d}_1 + hb^t t_c$$

$$\hat{q}_2 = \hat{q}_1 + h\hat{d}_2 + hb^t t_{1+c} = h\hat{d}_1 + hb^t t_c + h\hat{d}_2 + hb^t t_{1+c} = h(\hat{d}_1 + \hat{d}_2) + h(b^t t_c + b^t t_{1+c})$$

$$\hat{q}_3 = \hat{q}_2 + h\hat{d}_3 + hb^t t_{2+c} = h(\hat{d}_1 + \hat{d}_2 + \hat{d}_3) + h(b^t t_{0+c} + b^t t_{1+c} + b^t t_{2+c})$$

$\vdots$

$$\hat{q}_{n+1} = h(\hat{d}_1 + \hat{d}_2 + \dots + \hat{d}_{n+1}) + h(b^t t_{0+c} + b^t t_{1+c} + \dots + b^t t_{n+c})$$

Isto é:

$$\hat{q}_{n+1} = h \sum_{l=0}^n \hat{d}_{l+1} + h \sum_{l=0}^n b^t t_{l+c} \quad \text{com} \quad (5.11)$$

$$t_{n+c} = f(x_{n+c}, y(x_n + ch)) - f(x_{n+c}, y_{n+c}) \in \mathbb{R}^s. \quad (5.12)$$

**Teorema 5.1** Se o estágio final tem ordem de consistência  $p \geq 3$  (isto é,  $\hat{d}_n = O(h^p)$ ) então, o método RK converge com ordem  $p$  (isto é,  $\hat{q}_n = O(h^p)$ ), se, e somente se,

$$b^t t_{n+c} = O(h^p) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.13)$$

Isto acontece se, e somente se

$$q_{n+c} = O(h^p) + hd_{n+c} + hAt_{n+c} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.14)$$

com

$$hd_{n+c} = \sum_{i=2}^{p+1} \gamma_i y^{(i)}(x_n) h^i + O(h^{p+2}). \quad (5.15)$$

De fato

Se  $\hat{d}_{n+1} = O(h^p)$  e  $h \sum_{l=1}^n \hat{d}_{l+1} = O(h^p)$ , usando (5.9) e (5.11) teremos a demonstração do teorema.

A relação (5.13) é a condição de ordem geral para a classe dos métodos de RK, porém, ela não será útil sob o ponto de vista prático, pois não temos um caminho para a obtenção dos coeficientes do método com convergência de ordem  $p$  garantida.

Expandindo em série de Taylor a diferença  $t_{n+c}$  em (5.12), temos que podemos expressá-la em potências de  $q_{n+c}$  como mostra o lema a seguir.

**Lema 5.1** Para  $f : [a, b] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  suficientemente diferenciável podemos escrever:

$$t_{n+c} = G_1(x_n)q_{n+c} + G_2(x_n)q_{n+c}^2 + G_3(x_n)q_{n+c}^3 + \dots \quad (5.16)$$

com

$$G_l = \text{diag} (g_l(x_n + c_1 h), \dots, g_l(x_n + c_s h)) = g_l(x_n)I + h D g'_l(x_n) + \frac{1}{2} h^2 D^2 g''_l(x_n) + \dots \quad (5.17)$$

onde

$$g_l(x) = \frac{(-1)^{l+1}}{l!} f(x, y(x)) \text{ e } D = \text{diag} (c_1, c_2, \dots, c_s) \in \mathbb{R}^{s \times s}$$

De fato:

Expandindo por Taylor  $y(x_n + c_i h)$  temos de [2] que:

$$-f(x_n + c_i h, y_n + c_i) = -f(x_n + c_i h, y(x_n + c_i h)) + \sum_{j=1}^p g_j(x_n + c_i h) (y(x_n + c_i h) - y_{n+c_i})^j + \dots$$

e usando (5.12) podemos escrever:

$$t_{n+c_i} = \sum_{j=1}^p g_j(x_n + c_i h) q_{n+c_i}^j + \dots$$

onde  $q_{n+c_i}$  é a  $i^{th}$  componente de  $q_{n+c} \in \mathbb{R}^s$ , logo:

$$t_{n+c_1} = g_1(x_n + c_1h)q_{n+c_1} + g_2(x_n + c_1h)q_{n+c_1}^2 + g_3(x_n + c_1h)q_{n+c_1}^3 + \dots$$

$$t_{n+c_2} = g_1(x_n + c_2h)q_{n+c_2} + g_2(x_n + c_2h)q_{n+c_2}^2 + g_3(x_n + c_2h)q_{n+c_2}^3 + \dots$$

$$t_{n+c_3} = g_1(x_n + c_3h)q_{n+c_3} + g_2(x_n + c_3h)q_{n+c_3}^2 + g_3(x_n + c_3h)q_{n+c_3}^3 + \dots$$

$\vdots$

$$t_{n+c_s} = g_1(x_n + c_sh)q_{n+c_s} + g_2(x_n + c_sh)q_{n+c_s}^2 + g_3(x_n + c_sh)q_{n+c_s}^3 + \dots$$

ou seja,

$$\begin{pmatrix} t_{n+c_1} \\ t_{n+c_2} \\ t_{n+c_3} \\ \vdots \\ t_{n+c_s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1(x_n + c_1h) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & g_1(x_n + c_2h) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & g_1(x_n + c_3h) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & g_1(x_n + c_sh) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{n+c_1} \\ q_{n+c_2} \\ q_{n+c_3} \\ \vdots \\ q_{n+c_s} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_2(x_n + c_1h) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & g_2(x_n + c_2h) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & g_2(x_n + c_3h) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & g_2(x_n + c_sh) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{n+c_1}^2 \\ q_{n+c_2}^2 \\ q_{n+c_3}^2 \\ \vdots \\ q_{n+c_s}^2 \end{pmatrix} + \dots$$

ou seja,

$$t_{n+c} = G_1 q_{n+c} + G_2 q_{n+c}^2 + G_3 q_{n+c}^3 + \dots$$

onde

$$G_l = \text{diag} (g_l(x_n + c_1h), \dots, g_l(x_n + c_sh))$$

Então temos,

$$\begin{aligned}
G_l &= \begin{pmatrix} g_l(x_n + c_1 h) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & g_l(x_n + c_2 h) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & g_l(x_n + c_3 h) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & g_l(x_n + c_s h) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} g_l(x_n) + (c_1 h)g'_l(x_n) + \frac{1}{2!}(c_1 h)^2 g''_l + \frac{1}{3!}(c_1 h)^3 g'''_l + \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & g_l(x_n) + (c_2 h)g'_l(x_n) + \frac{1}{2!}(c_2 h)^2 g''_l + \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & g_l(x_n) + (c_s h)g'_l(x_n) + \frac{1}{2!} + \dots \end{pmatrix} \\
&= g_l(x_n) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & c_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_s \end{pmatrix} g'_l(x_n) \\
&\quad + \frac{1}{2!} h^2 \begin{pmatrix} c_1^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & c_3^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_s^2 \end{pmatrix} g''_l(x_n)
\end{aligned}$$

ou seja,

$$G_l = g_l(x_n)I + hDg'_l(x_n) + \frac{1}{2!}h^2 D^2 g''_l(x_n) + \dots$$

## 5.5 Uma Relação Recursiva

Pelo Teorema da função implícita, podemos garantir a existência e unicidade das soluções  $q_{n+c}(h)$  e  $t_{n+c}(h)$ , respectivamente de (5.14) e (5.16), logo, podemos considerar as seguintes expansões de Taylor:

$$q_{n+c}(h) = r_2(x_n)h^2 + r_3(x_n)h^3 + \dots + r_{p-1}(x_n)h^{p-1} + O(h^p) \quad (5.18)$$

$$t_{n+c}(h) = w_2(x_n)h^2 + w_3(x_n)h^3 + \dots + w_{p-1}(x_n)h^{p-1} + O(h^p). \quad (5.19)$$

Agora a condição  $b^t t_{n+c} = 0(h^p)$  do Teorema 5.1, se reduz à seguinte condição de ortogonalidade:

$$b^t w_i(x_n) = 0, \quad i = 2, \dots, p-1. \quad (5.20)$$

**Lema 5.2 :**

$r_i(x_n)$  e  $w_i(x_n) \in \mathbb{R}^s$ , são obtidos através das seguintes recursões:

$$r_i(x_n) = \gamma_i y^{(i)}(x_n) + Aw_{i-1}(x_n); \quad w_1(x_n) = 0; \quad i = 2, 3, \dots, p-1 \quad (5.21)$$

$$w_i(x_n) = \sum_{l=0}^{i-2} D^l \left[ \frac{1}{l!} g_1^{(l)}(x_n) r_{i-l}(x_n) + \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+l=i}} \frac{1}{l!} g_2^{(l)}(x_n) r_m(x_n) r_n(x_n) + \right. \\ \left. + \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+l=i}} \frac{1}{l!} g_3^{(l)}(x_n) r_m(x_n) r_n(x_n) r_s(x_s) + \dots \right] \quad (5.22)$$

Observe que o segundo somatório em (5.22) existe para  $i \geq 4$  ( $m+n+l=i$  com  $m, n \geq 2$  é possível somente para  $i \geq 4$ ), o terceiro somatório existe somente para  $i \geq 6$ , e assim por diante.

De fato:

De (5.14) e (5.15) podemos escrever:

$$q_{n+c} = O(h^p) + [\gamma_2 y^{(2)}(x_n) h^2 + \gamma_3 y^{(3)}(x_n) h^3 + \gamma_4 y^{(4)}(x_n) h^4 + \dots + \gamma_{p+1} y^{(p+1)}(x_n) h^{p+1} \\ + O(h^{p+2})] + hA[w_2(x_n) h^2 + w_3(x_n) h^3 + \dots + w_{p-1}(x_n) h^{p-1} + O(h^p)] \\ q_{n+c} = \gamma_2 y^{(2)}(x_n) h^2 + [\gamma_3 y^{(3)}(x_n) + Aw_2(x_n)] h^3 + [\gamma_4 y^{(4)}(x_n) + Aw_3(x_n)] h^4 + \dots \quad (5.23) \\ + [\gamma_{p-1} y^{(p-1)}(x_n) + Aw_{p-2}(x_n)] h^{p-1} + O(h^p)$$

De (5.23) e (5.18), comparando termo a termo, obtemos:

$$\begin{aligned} r_2(x_n) &= \gamma_2 y^{(2)}(x_n) \\ r_3(x_n) &= \gamma_3 y^{(3)}(x_n) + Aw_2(x_n) \\ r_4(x_n) &= \gamma_4 y^{(4)}(x_n) + Aw_3(x_n) \\ &\vdots \\ r_{p-1}(x_n) &= \gamma_{p-1} y^{(p-1)}(x_n) + Aw_{p-2}(x_n) \end{aligned}$$

ou seja

$$r_i(x_n) = \gamma_i y^{(i)}(x_n) + Aw_{i-1}(x_n), \quad i = 2, 3, \dots, p-1.$$

De (5.16) e (5.18), temos:

$$t_{n+c} = G_1 \sum_{t=2}^{p-1} r_t h^t + G_2 \left( \sum_{t=2}^{p-1} r_t h^t \right)^2 + G_3 \left( \sum_{t=2}^{p-1} r_t h^t \right)^3 + \dots$$

$$t_{n+c} = \left[ G_1 \sum_{t=2}^i r_t h^t + G_2 \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n \leq i}} r_m r_n h^{m+n} + G_3 \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+s \leq i}} r_m r_n h^{m+n+s} + \dots \right]$$

$$+ O(h^{i+1}).$$

Usando então o desenvolvimento de  $G_j$ , considerado no lema 5.1, temos:

$$t_{n+c} = \left[ (g_1(x_n)I + hDg'_1(x_n) + \frac{1}{2!}h^2D^2g''_1(x_n) + \dots) \sum_{t=2}^i r_t h^t + \right.$$

$$+ (g_2(x_n)I + hDg'_2(x_n) + \frac{1}{2!}h^2D^2g''_2(x_n) + \dots) \left( \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n \leq i}} r_m r_n h^{m+n} \right) +$$

$$+ (g_3(x_n)I + hDg'_3(x_n) + \frac{1}{2!}h^2D^2g''_3(x_n) + \dots) \left( \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+s \leq i}} r_m r_n r_s h^{m+n+s} \right) + \dots \left. \right]$$

$$+ O(h^{i+1}).$$

De (5.19) sabemos que  $t_{n+c} = w_2(x_n)h^2 + w_3(x_n)h^3 + \dots + w_{p-1}(x_n)h^{p-1} + O(h^p)$ .

Comparando termo a termo com o resultado obtido acima temos que:

$$w_i(x_n) = \sum_{l=0}^{i-2} \frac{1}{l!} D^l g_1^{(l)}(x_n) r_{i-l} + \sum_{l=0}^{i-2} \frac{1}{l!} D^l g_2^{(l)}(x_n) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+l=i}} r_m r_n$$

$$+ \sum_{l=0}^{i-2} \frac{1}{l!} D^l g_3^{(l)}(x_n) \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+l=i}} r_m r_n r_s + \dots$$

$$\begin{aligned}
w_i(x_n) &= \left( \frac{1}{0!} D^0 g_1^{(0)}(x_n) r_{i-0} + \frac{1}{1!} D^1 g_1^{(1)}(x_n) r_{i-1} + \frac{1}{2!} D^2 g_1^{(2)}(x_n) r_{i-2} + \dots \right) \\
&+ \left( \frac{1}{0!} D^0 g_2^{(0)}(x_n) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+0=i}} r_m r_n + \frac{1}{1!} D^1 g_2^{(1)}(x_n) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+1=i}} r_m r_n + \frac{1}{2!} D^2 g_2^{(2)}(x_n) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+2=i}} r_m r_n + \dots \right) \\
&+ \left( \frac{1}{0!} D^0 g_3^{(0)}(x_n) \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+0=i}} r_m r_n r_s + \frac{1}{1!} D^1 g_3^{(1)}(x_n) \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+1=i}} r_m r_n r_s + \frac{1}{2!} D^2 g_3^{(2)}(x_n) \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+2=i}} r_m r_n r_s + \dots \right) \\
&+ \dots \\
w_i(x_n) &= \left( \frac{1}{0!} D^0 g_1^{(0)}(x_n) r_{i-0} + \frac{1}{0!} D^0 g_2^{(0)}(x_n) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+0=i}} r_m r_n + \frac{1}{0!} D^0 g_3^{(0)}(x_n) \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+0=i}} r_m r_n r_s + \dots \right) \\
&+ \left( \frac{1}{1!} D^1 g_1^{(1)}(x_n) r_{i-1} + \frac{1}{1!} D^1 g_2^{(1)}(x_n) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+1=i}} r_m r_n + \frac{1}{1!} D^1 g_3^{(1)}(x_n) \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+1=i}} r_m r_n r_s + \dots \right) \\
&+ \left( \frac{1}{2!} D^2 g_1^{(2)}(x_n) r_{i-2} + \frac{1}{2!} D^2 g_2^{(2)}(x_n) \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+2=i}} r_m r_n + \frac{1}{2!} D^2 g_3^{(2)}(x_n) \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+2=i}} r_m r_n r_s + \dots \right) \\
&+ \dots
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
w_i(x_n) &= \sum_{l=0}^{i-2} D^l \left[ \frac{1}{l!} g_1^{(l)}(x_n) r_{i-l} + \sum_{\substack{m, n \geq 2 \\ m+n+l=i}} \frac{1}{l!} g_2^{(l)}(x_n) r_m(x_n) r_n(x_n) + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\substack{m, n, s \geq 2 \\ m+n+s+l=i}} \frac{1}{l!} g_3^{(l)}(x_n) r_m(x_n) r_n(x_n) r_s(x_n) + \dots \right].
\end{aligned}$$

De (5.21) e (5.22), temos:



$$r_2 = \gamma_2 y''$$

$$w_2 = g_1 r_2 \Rightarrow w_2 = g_1 \gamma_2 y'' \Rightarrow w_2 = \gamma_2 g_1 y''$$

$$r_3 = \gamma_3 y''' + A w_2 \Rightarrow r_3 = \gamma_3 y''' + A \gamma_2 g_1 y''$$

$$w_3 = g_1 r_3 + D g_1' r_2 = g_1 (\gamma_3 y''' + A \gamma_2 g_1 y'') + D g_1' \gamma_2 y'' = \gamma_3 g_1 y''' + A \gamma_2 g_1^2 y'' + D \gamma_2 g_1' y'' \quad (5.24)$$

$$r_4 = \gamma_4 y^{(4)} + A w_3 = \gamma_4 y^{(4)} + A (\gamma_3 g_1 y''' + A \gamma_2 g_1^2 y'' + D \gamma_2 g_1' y'')$$

$$= \gamma_4 y^{(4)} + A \gamma_3 g_1 y''' + A^2 \gamma_2 g_1^2 y'' + A D \gamma_2 g_1' y''$$

$$w_4 = g_1 r_4 + g_2 r_2 r_2 + D g_1' r_3 + D^2 \frac{1}{2!} g_1'' r_2 = g_1 (\gamma_4 y^{(4)} + A \gamma_3 g_1 y''' + A^2 \gamma_2 g_1^2 y'' + A D \gamma_2 g_1' y'')$$

$$+ g_2 \gamma_2^2 y''^2 + D g_1' (\gamma_3 y''' + A \gamma_2 g_1 y'') + D^2 \frac{1}{2!} g_1'' \gamma_2 y''$$

$$= \gamma_4 g_1 y^{(4)} + A \gamma_3 g_1^2 y''' + A^2 \gamma_2 g_1^3 y'' + A D \gamma_2 g_1 g_1' y'' + D \gamma_3 g_1' y''' + D A \gamma_2 g_1' g_1 y'' + D^2 \gamma_2 \frac{1}{2} g_1'' y'' + \gamma_2^2 g_2 y'' y''$$

Sejam:

$$\begin{array}{llll} \alpha_{41} = \gamma_4 & e_{41} = g_1 y^{(4)} & \alpha_{42} = A \gamma_3 & e_{42} = g_1^2 y''' \\ \alpha_{43} = A^2 \gamma_2 & e_{43} = g_1^3 y'' & \alpha_{44} = A D \gamma_2 & e_{44} = g_1 g_1' y'' \\ \alpha_{45} = D \gamma_3 & e_{45} = g_1' y''' & \alpha_{46} = D A \gamma_2 & e_{46} = g_1' g_1 y'' \\ \alpha_{47} = D^2 \gamma_2 & e_{47} = \frac{1}{2} g_1'' y'' & \alpha_{48} = \gamma_2^2 & e_{48} = g_2 y'' y'' \end{array}$$

então temos:

$$w_4(x_n) = \alpha_{41} e_{41} + \alpha_{42} e_{42} + \alpha_{43} e_{43} + \alpha_{44} e_{44} + \alpha_{45} e_{45} + \alpha_{46} e_{46} + \alpha_{47} e_{47} + \alpha_{48} e_{48}$$



Na verdade, podemos escrever qualquer  $w_i(x_n)$  ( $i = 2, \dots, p-1$ ) como somatório do tipo:

$$w_i(x_n) = \sum_{l=1}^{m_i} \alpha_{il} e_{il}(x_n) .$$

Com isso a condição  $b^t w_i(x_n) = 0$  de (5.20) pode ser substituída por:

$$b^t \alpha_{il} = 0 , \quad i = 2, \dots, p-1 \text{ e } l = 1, \dots, m_i$$

pois, temos:

$$b^t \alpha_{il} = 0; \quad i = 2(1)p-1 \implies b^t w_i = 0 , \quad (5.24)$$

De fato:

$$\begin{aligned} b^t w_i &= b^t (\alpha_{i1} e_{i1} + \alpha_{i2} e_{i2} + \alpha_{i3} e_{i3} + \dots + \alpha_{im_i} e_{im_i}) = \\ &= b^t \alpha_{i1} e_{i1} + b^t \alpha_{i2} e_{i2} + b^t \alpha_{i3} e_{i3} + \dots + b^t \alpha_{im_i} e_{im_i} \stackrel{b^t \alpha_{il} = 0}{=} 0 . \end{aligned}$$

Podemos reescrever a recursão (5.21) e (5.22) na forma vetorial através da seguinte recursão:

### Recursão 1

$$\begin{aligned} R_i^\alpha &= \{\gamma_i\} \cup \{AW / W \in W_{i-1}^\alpha; W_1^\alpha = \emptyset \quad i = 2, 3, \dots; \\ W_i^\alpha &= \{D^l r / r \in R_{i-l}^\alpha; l = 0, \dots, i-2\} \\ &\cup \{D^l r u / r \in R_m^\alpha, u \in R_n^\alpha; l = 0, \dots, i-2; l+m+n = i\} \\ &\cup \{D^l r u v / r \in R_m^\alpha, u \in R_n^\alpha, v \in R_s^\alpha; l = 0, \dots, i-2; l+m+n+s = i\} \\ &\cup \dots etc. \end{aligned}$$

onde os elementos de  $W_i^\alpha$  são os vetores recursivos  $\alpha_{il} \in \mathbb{R}^s$  ( $l = 1, \dots, m_i$ ).

Ilustrando, seguem alguns dos conjuntos gerados através da Recursão 1 :



### Exemplo

$$R_2^\alpha = \{\gamma_2\}$$

$$W_2^\alpha = \{r/r \in R_2^\alpha\} = \{\gamma_2\}$$

$$R_3^\alpha = \{\gamma_3 \cup AW_2^\alpha\} = \{\gamma, A\gamma_2\}$$

$$W_3^\alpha = \{r/r \in R_3^\alpha, Dr/r \in R_2^\alpha\} = \{\gamma_3, A\gamma_2, D\gamma_2\}$$

$$R_4^\gamma = \{\gamma_4 \cup AW/W \in W_3^\alpha\} = \{\gamma_4, A\gamma_3, A^2\gamma_2, AD\gamma_2\}$$

$$W_4^\alpha = \{r/r \in R_4^\alpha, Dr/r \in R_3^\alpha, D^2r/r \in R_2^\alpha, r.u/r \in R_2^\alpha, u \in R_2^\alpha\}$$

$$= \{\gamma_4, A\gamma_3, A^2\gamma_2, AD\gamma_2, D\gamma_3, DA\gamma_2, D^2\gamma_2, \gamma_2\gamma_2\} \text{ etc...}$$

Os resultados apresentados nos permitem enunciar o teorema a seguir, que fornece a condição de ortogonalidade necessária para a garantia de convergência do método RK com ordem  $p$ .

**Teorema 5.2** *Sejam  $\alpha_{il} \in \mathbb{R}^s$  ( $l = 1, \dots, m_i$ ) obtidos através da recursão 1. O método de Runge-Kutta (5.3) e (5.4) então converge com ordem  $p \geq 3$ , se o estágio final tem ordem de consistência  $p$ , isto é,  $b^t c^{l-1} = \frac{1}{l}$  ( $l = 1, \dots, p$ ) e se  $b^t \alpha_{il} = 0$  ( $i = 2, \dots, p-1$ ;  $l = 1, \dots, m_i$ ).*



## Exemplo

Um método de R.K. tem ordem de convergência  $p = 5$  se as 17 equações que seguem abaixo são satisfeitas:

$$b^t c^{l-1} = \frac{1}{l}, \quad l = 1(1)5; \quad (5.25)$$

$$\begin{aligned} b^t \gamma_2 &= b^t \gamma_3 = b^t A \gamma_2 = b^t D \gamma_2 \\ &= b^t \gamma_4 = b^t A \gamma_3 = b^t A^2 \gamma_2 \\ &= b^t A D \gamma_2 = b^t D \gamma_3 = b^t D A \gamma_2 \\ &= b^t D^2 \gamma_2 = b^t \gamma_2^2 \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.26)$$

As equações (5.25) são chamadas “condições de consistência” e as equações (5.26) “condições de ordem ortogonais”.



Substituindo os vetores  $\gamma_l = \frac{1}{l!}c^l - \frac{1}{(l-1)!}Ac^{l-1}$  e considerando as condições de consistência (5.25) satisfeitas, obtemos as seguintes implicações:

$$b^t\gamma_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad b^tAc = \frac{1}{6} \quad (a)$$

$$b^t\gamma_3 = 0 \quad \Rightarrow \quad b^tAc^2 = \frac{1}{12} \quad (b)$$

$$b^tA\gamma_2 = 0 \quad \text{com (b)} \quad \Rightarrow \quad b^tA^2c = \frac{1}{24} \quad (c)$$

$$b^tD\gamma_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad b^tDAc = \frac{1}{8} \quad (d)$$

$$b^t\gamma_4 = 0 \quad \Rightarrow \quad b^tAc^3 = \frac{1}{20} \quad (e)$$

$$b^tA\gamma_3 = 0 \quad \text{com (e)} \quad \Rightarrow \quad b^tA^2c^2 = \frac{1}{60} \quad (f)$$

$$b^tA^2\gamma_2 = 0 \quad \text{com (f)} \quad \Rightarrow \quad b^tA^3c = \frac{1}{120} \quad (g)$$

$$b^tAD\gamma_2 = 0 \quad \text{com (e)} \quad \Rightarrow \quad b^tADAc = \frac{1}{40} \quad (h)$$

$$b^tD\gamma_3 = 0 \quad \Rightarrow \quad b^tDAc^2 = \frac{1}{15} \quad (i)$$

$$b^tDA\gamma_2 = 0 \quad \text{com (i)} \quad \Rightarrow \quad b^tDA^2c = \frac{1}{30} \quad (j)$$

$$b^tD^2\gamma_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad b^tD^2Ac = \frac{1}{10} \quad (k)$$

$$b^t(\gamma_2 = 0)^2 \quad \text{com (k)} \quad \Rightarrow \quad b^t(Ac.Ac) = \frac{1}{20} \quad (l)$$

As condições do lado direito são as condições de ordem de Butcher, mas escritas numa forma compacta.

A seguir mostraremos como as implicações apresentadas acima são obtidas.



$$\begin{aligned} \text{a) } b^t \gamma_2 = 0 &\Rightarrow b^t \left( \frac{1}{2!} c^2 - Ac \right) = 0 \Rightarrow b^t \frac{1}{2!} c^2 - b^t Ac = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{b^t c^2}{2} = b^t Ac \stackrel{(5.25)}{\Rightarrow} b^t Ac = \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

$$\text{b) } b^t \gamma_3 = 0 \Rightarrow b^t \left( \frac{1}{3!} c^3 - \frac{1}{2} Ac^2 \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^t Ac^2}{2} = \frac{b^t c^3}{6} \stackrel{(5.25)}{\Rightarrow} \frac{b^t Ac^2}{2} = \frac{1}{24} \Rightarrow b^t Ac^2 = \frac{1}{12}$$

$$\text{c) } b^t A \gamma_2 = 0 \Rightarrow b^t A \left( \frac{1}{2} c^2 - Ac \right) = 0 \Rightarrow b^t A^2 c = \frac{b^t Ac^2}{2} \stackrel{(b)}{\Rightarrow} b^t A^2 c = \frac{1}{24}.$$

$$\begin{aligned} \text{d) } b^t D \gamma_2 = 0 &\Rightarrow b^t D \left( \frac{1}{2} c^2 - Ac \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^t D c^2}{2} - b^t D A c = 0 \Rightarrow \\ b^T D A c &= \frac{b^T D^2 c}{2} \Rightarrow b^t D A c = \frac{b^t c^3}{2} \stackrel{(5.25)}{\Rightarrow} b^t D A c = \frac{1}{8} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{e) } b^t \gamma_4 = 0 &\Rightarrow b^t \left( \frac{1}{4!} c^4 - \frac{1}{3!} Ac^3 \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^t c^4}{24} - \frac{b^t Ac^3}{6} = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{b^t c^4}{24} = \frac{b^t Ac^3}{6} \Rightarrow \frac{b^t c^4}{24} = \frac{b^t Ac^3}{6} \stackrel{(5.25)}{\Rightarrow} b^t Ac^3 = \frac{1}{20}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{f) } b^t A \gamma_3 = 0 &\Rightarrow b^t A \left( \frac{1}{3!} c^3 - \frac{1}{2!} Ac^2 \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^T Ac^3}{6} = \frac{b^t A^2 c^2}{2} \stackrel{(e)}{\Rightarrow} \\ &\Rightarrow \frac{1}{120} = \frac{b^t A^2 c^2}{2} \Rightarrow b^t A^2 c^2 = \frac{1}{60}. \end{aligned}$$

$$\text{g) } b^t A^2 \gamma_2 = 0 \Rightarrow b^t A^2 \left( \frac{1}{2!} c^2 - Ac \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^t A^2 c^2}{2} - b^t A^3 c = 0 \stackrel{(f)}{\Rightarrow} b^t A^3 c = \frac{1}{120}$$

$$\begin{aligned} \text{h) } b^t A D \gamma_2 = 0 &\Rightarrow b^t A D \left( \frac{1}{2} c^2 - Ac \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^t A D c^2}{2} - b^t A D A c = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{b^t A D c^2}{2} = b^t A D A c \Rightarrow \frac{b^t A c^3}{2} = b^t A D A c \stackrel{(e)}{\Rightarrow} b^t A D A c = \frac{1}{40}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{i) } b^t D \gamma_3 = 0 &\Rightarrow b^t D \left( \frac{1}{3!} c^3 - \frac{1}{2!} Ac^2 \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^t D c^3}{6} - \frac{b^t D A c^2}{2} = 0 \Rightarrow \frac{b^t D c^3}{6} = \frac{b^t D A c^2}{2} \Rightarrow \\ \frac{b^t c^4}{6} &= \frac{b^t D A c^2}{2} \stackrel{(5.25)}{\Rightarrow} b^t D A c^2 = \frac{1}{15}. \end{aligned}$$

$$\text{j) } b^t D A \gamma_2 = 0 \Rightarrow b^t D A \left( \frac{1}{2} c^2 - Ac \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^t D A c^2}{2} - b^t D A^2 c = 0 \stackrel{(i)}{\Rightarrow} b^t D A^2 c = \frac{1}{30}.$$

$$\begin{aligned} \text{l) } b^t D^2 \gamma_2 = 0 &\Rightarrow b^t D^2 \left( \frac{1}{2!} c^2 - Ac \right) = 0 \Rightarrow \frac{b^t D^2 c^2}{2} - b^t D^2 A c = 0 \Rightarrow \frac{b^t c^4}{2} = b^t D^2 A c \Rightarrow \\ &\stackrel{(5.25)}{\Rightarrow} b^t D^2 A c = \frac{1}{10}. \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 \text{m) } b^t \gamma_2^2 = 0 &\Rightarrow b^t \left( \frac{1}{2!} c^2 - Ac \right)^2 = 0 \Rightarrow b^t \left( \frac{c^4}{4} - c^2 Ac + A^2 c^2 \right) = 0 \Rightarrow \\
 &\Rightarrow \frac{b^t c^4}{4} - b^t c^2 Ac + b^t Ac \cdot Ac = 0 \Rightarrow b^t (Ac \cdot Ac) = b^t c^2 Ac - \frac{b^t c^4}{4} \Rightarrow \\
 &\Rightarrow b^t (Ac \cdot Ac) \stackrel{(5.25)}{=} b^t c^2 Ac - \frac{1}{20} \Rightarrow b^t (Ac \cdot Ac) = \frac{1}{10} - \frac{1}{20} = \frac{1}{20}.
 \end{aligned}$$

Portanto, podemos observar que a Recursão 1 nos fornece as condições de ordem para a classe dos métodos de RK de uma maneira bastante simples. Ainda, podemos constatar a dependência entre o erro local dos estágios intermediários e o erro global do último estágio.

Essa nova formalização para as condições de ordem será considerada no próximo capítulo.

## 6.1 Introdução

Neste capítulo procuramos estabelecer um caminho mais simples para a obtenção de pares embutidos de métodos de RK com ordens 4 e 5 respectivamente. Sabemos que sem a utilização de condições de simplificação devemos resolver um sistema não linear constituído por 25 condições de ordem, para determinação de tais pares de métodos.

## 6.2 As condições de simplificação na formulação de Albrecht

Dado um vetor  $v$ , representaremos por  $v_{(i,j)}$  o valor constituído pelos elementos das componentes  $i$  até  $j$  de  $v$  e por  $v_i$  a  $i$ -ésima componente do vetor  $v$ .

Utilizando a teoria desenvolvida por Albrecht e apresentada no capítulo anterior, substituímos as condições de simplificação e as condições de simplificação subsidiárias pelas suas respectivas representações matriciais.



## Capítulo 6

# As condições de simplificação em métodos embutidos

### 6.1 Introdução

Neste capítulo procuramos estabelecer um caminho mais simples para a obtenção de pares embutidos de métodos de RK com ordens 4 e 5 respectivamente. Sabemos que sem a utilização de condições de simplificação devemos resolver um sistema não linear constituído por 25 condições de ordem, para determinação de tais pares de métodos.

### 6.2 As condições de simplificação na formulação de Albrecht

Dado um vetor  $v$ , representaremos por  $v_{(i,j)}$  o vetor constituído pelos elementos das componentes  $i$  até  $j$  de  $v$  e por  $v_i$  a  $i$ -ésima componente do vetor  $v$ .

Utilizando a teoria desenvolvida por Albrecht e apresentada no capítulo anterior, substituiremos as condições de simplificação e as condições de simplificação subsidiárias pelas suas respectivas representações matriciais.



$$\sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j = \frac{c_i^2}{2} \quad i = 3, 4, \dots, s \quad - \quad \left( Ac - \frac{c^2}{2} \right)_{(3,s)} = 0$$

$$\sum_{i=j+1}^s b_i a_{ij} = b_j (1 - c_j) \quad j = 2, 3, \dots, s \quad - \quad b^t (A + D - I) = 0$$

$$\sum_{i=3}^s b_i a_{i2} = 0 \quad - \quad (bA)_2 = 0$$

$$\sum_{i=3}^s b_i c_i a_{i2} = 0 \quad - \quad (bDA)_2 = 0$$

$$\sum_{i=4}^s b_i a_{i3} = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{i=5}^s b_i \sum_{j=4}^{i-1} a_{ij} a_{j2} = 0 \quad - \quad (bA^2)_2 = 0$$

Observe que:

$$(bA^2)_2 = \left( \sum_{i=4}^s b_i a_{i3} \right) a_{32} + \sum_{i=5}^s \sum_{j=4}^{i-1} b_i a_{ij} a_{j2}$$

Através desta notação e das implicações (a)-(1) vistas no capítulo 4, podemos agora mostrar a necessidade de se utilizar as condições de simplificação subsidiárias, para que as 17 condições de ordem, que permitem alcançarmos ordem cinco sejam satisfeitas.

Consideremos satisfeitas as seguintes condições de simplificação:

$$\left( Ac - \frac{c^2}{2} \right)_{(3,s)} = 0 \quad (6.1)$$

Podemos mostrar que sob a hipótese (6.1) algumas das condições ortogonais de (5.26) são satisfeitas, se e somente se, as condições de simplificação subsidiárias forem satisfeitas.

De fato, como:

$$\gamma_2 = Ac - \frac{c^2}{2} = \begin{pmatrix} 0 \\ a_{21}c_1 - \frac{c_2^2}{2} \\ a_{31}c_1 + a_{32}c_2 - \frac{c_3^2}{2} \\ a_{41}c_1 + a_{42}c_2 + a_{43}c_3 - \frac{c_4^2}{2} \\ \vdots \\ a_{s1}c_1 + a_{s2}c_2 + \dots + a_{ss-1}c_{s-1} - \frac{c_s^2}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{c_2^2}{2} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Observamos que apenas a segunda componente do vetor  $\gamma_2$  não é nula, pois devemos tomar  $c_2 \neq 0$ . Com isso, sob a hipótese (6.1), toda vez que queremos efetuar o produto de um vetor qualquer por  $\gamma_2$ , basta determinarmos a segunda componente do vetor resultante.

Assim sendo temos:

$$b^t \gamma_2 = 0 \Leftrightarrow b_2 \cdot \left( -\frac{c_2^2}{2} \right) = 0 \stackrel{c_2 \neq 0}{\Leftrightarrow} b_2 = 0$$

$$b^t A \gamma_2 = 0 \Leftrightarrow (b^t A)_2 \left( -\frac{c_2^2}{2} \right) = 0 \Leftrightarrow (b^t A)_2 = 0$$

$$b^t D A \gamma_2 = 0 \Leftrightarrow (b^t D A)_2 = 0$$

$$b^t A^2 \gamma_2 \Leftrightarrow (b^t A^2)_2 = 0$$

Se além das condições de simplificação (6.1), considerarmos as condições de consistência (5.25) e as condições ortogonais (5.26), são válidas as implicações (a)-(1) vistas no capítulo 4 e daí podemos concluir que as condições de ordem necessárias para obtermos métodos RK com ordem cinco também o serão.

O sistema apresentado no capítulo 3 como terceiro caso, cuja solução nos fornece métodos com ordem cinco e  $s$  estágios, pode então ser reescrito através da seguinte representação matricial:

$$\left( A c - \frac{c^2}{2} \right)_{(3,s)} = 0 \quad (6.2)$$

$$(bA)_2 = 0 \quad (6.3)$$

$$(bDA)_2 = 0 \quad (6.4)$$

$$b_2 = 0 \quad (6.5)$$

$$(bA^2)_2 = 0 \quad (6.6)$$

$$b^t c^i = \frac{1}{i+1}, \quad i = 0(1)4 \quad (6.7)$$

$$bAc^2 = \frac{1}{12} \quad (6.8)$$

$$bDAc^2 = \frac{1}{15} \quad (6.9)$$

$$bAc^3 = \frac{1}{20} \quad (6.10)$$

$$bA^2c^2 = \frac{1}{60} \quad (6.11)$$

## 6.3 Alguns resultados

Consideraremos o par de métodos de RK explícitos caracterizado por:

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

onde  $b^t, \hat{b}^t, c \in \mathbb{R}^s$  e  $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$  é estritamente triangular inferior. Os vetores  $\hat{b}^t$  e  $b^t$  caracterizam dois métodos de Rk com ordem  $p$  e  $q$  respectivamente ( $p \leq q$ ) que representamos por  $RK(p, q)$ , conforme introduzimos no capítulo 1. Observe que  $A$  e  $c$  são comuns a ambos os métodos.

No que segue apresentamos alguns resultados propostos por Papakostas e Papageorgiou [13] que vão nos permitir definir caminhos mais simples para a obtenção de pares embutidos de métodos  $RK(4, 5)$  com  $s = 7$  estágios.

**Lema 6.1** *Seja o par de métodos  $RK(4, 5)$  com  $s = 7$  estágios, satisfazendo a estratégia FSAL caracterizado pelas matrizes  $A, b^t, \hat{b}^t$  e  $c$ .*

*Então, o sistema simplificado de equações equivalente ao sistema original para obtermos os coeficientes do par de métodos embutidos será:*

$$\left( Ac - \frac{1}{2}c^2 \right)_{(3,6)} = 0 \quad (6.12)$$

$$b^t c^i = \frac{1}{i+1}, \quad i = 0(1)4 \quad (6.13)$$

$$b_2 = 0 \quad (6.14)$$

$$(bA)_2 = 0 \quad (6.15)$$

$$(bA^2)_2 = 0 \quad (6.16)$$

$$(bDA)_2 = 0 \quad (6.17)$$

$$bAc^2 = \frac{1}{12} \quad (6.18)$$

$$bAc^3 = \frac{1}{20} \quad (6.19)$$

$$bDAc^2 = \frac{1}{15} \quad (6.20)$$

$$bA^2c^2 = \frac{1}{60} \quad (6.21)$$

$$\hat{b}c^i = \frac{1}{i+1}, \quad 0(1)3 \quad (6.22)$$

$$\hat{b}_2 = 0 \quad (6.23)$$

$$(\hat{b}A)_2 = 0 \quad (6.24)$$

$$\hat{b}Ac^2 = \frac{1}{12} \quad (6.25)$$

As equações de (6.12) a (6.21) são as condições de ordem necessárias para obtermos métodos com ordem cinco e as de (6.22) a (6.25) para obtermos métodos com ordem quatro.

Como estamos considerando  $s=7$  estágios, seria natural que tivéssemos no sistema,

$$\left(Ac - \frac{1}{2}c^2\right)_{(3,7)} = 0$$

o que é desnecessário, pois:

$$\begin{aligned} \left(Ac - \frac{1}{2}c^2\right)_7 &= a_{71}c_1 + a_{72}c_2 + a_{73}c_3 + a_{74}c_4 + a_{75}c_5 + a_{76}c_6 - \frac{c_7^2}{2} = \\ &\stackrel{FSAL}{=} b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3 + b_4c_4 + b_5c_5 + b_6c_6 - \frac{1}{2} \stackrel{(6.13)}{=} 0 \end{aligned}$$

Portanto, em se tratando de métodos  $RK(4, 5)$  com  $s = 7$  estágios que satisfaz a estratégia FSAL, a última componente do vetor

$$\left(Ac - \frac{1}{2}c^2\right)_{(3,7)}$$

será sempre nula.

A demonstração do Lema 6.1 foi efetuada no capítulo 3, quando determinamos o terceiro caso de métodos RK com ordem cinco e  $s$  estágios. Por isso deixamos de agora refazê-la para a representação matricial dos resultados.

A proposição 6.1 e os Lemas 6.2 a 6.4, que apresentaremos a seguir, são ferramentas importantes para concluirmos nos Lemas 6.5, 6.6 e 6.7 que sob algumas restrições feitas aos coeficientes do par de métodos que desejamos obter, podemos eliminar algumas das condições de ordem que constituem o sistema apresentado no Lema 6.1, simplificando assim o processo de obtenção de pares embutidos de métodos.

**Proposição 6.1** *Seja o método RK com  $s$ -estágios, caracterizado pelas matrizes  $(A, b, c)$  para o qual se verificam as condições de consistência  $bc^i = \frac{1}{i+1}$ ,  $i = 0(1)p$ , com  $p \geq 3$ .*

*Para  $k, \ell$  inteiros não negativos tal que  $k + \ell \leq p - 3$  e  $i = 1(1)s$ , sejam:*

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \left( b \left( D^k \left( A + \frac{1}{k+1} D \right) - \frac{1}{k+1} I \right) \right)_i \\ \beta_i &= \left( Ac^\ell - \frac{1}{\ell+1} c^{\ell+1} \right)_i \end{aligned}$$



Se  $2s - 1$  das relações  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  são nulas e  $\alpha_r$  ou  $\beta_r$  é a relação restante, então, ela também será nula se  $b_r c_r \neq 0$ .

De fato:

$$\begin{aligned}
 c_r^\ell \alpha_r &= \left( b \left( D^k \left( A + \frac{D}{k+1} \right) - \frac{I}{k+1} \right) \right)_r c_r^\ell = \\
 &= \left( b \left( D^k \left( A + \frac{D}{k+1} \right) - \frac{I}{k+1} \right) \right) c^\ell = \\
 &= b D^k A c^\ell + \frac{1}{k+1} b D^{k+1} c^\ell - \frac{1}{k+1} b c^\ell = \\
 &= b D^k \left( A c^\ell - \frac{c^{\ell+1}}{\ell+1} \right) + \frac{1}{\ell+1} b D^k c^{\ell+1} + \frac{1}{k+1} b D^{k+1} c^\ell - \frac{1}{k+1} b c^\ell = \\
 &= b D^k \left( A c^\ell - \frac{c^{\ell+1}}{\ell+1} \right) + \frac{1}{(k+\ell+2)(\ell+1)} + \frac{1}{(k+\ell+2)(k+1)} - \frac{1}{(k+1)(\ell+1)} = \\
 &= (b D^k)_r \left( A c^\ell - \frac{c^{\ell+1}}{\ell+1} \right)_r = \\
 &= b_r c_r^k \beta_r
 \end{aligned}$$

É importante registrar que o resultado da proposição 6.1 é válido para ambos os métodos RK, quando consideramos um par de métodos embutidos.

**Lema 6.2** Suponhamos um par de métodos RK(4,5), com  $s = 7$  estágios e caracterizado pela matrizes  $A, b^t, \hat{b}^t, c$ , satisfazendo a estratégia FSAL, e a condição (6.1) para  $s = 6$ .

Sejam

$$\begin{aligned}
 v &= \left( A \left( A c - \frac{c^2}{2} \right) \right)_{(3,6)} \\
 S^i &= \{c, c^2, v^3\}_{(3,i)} \quad e \quad T^i = S^i \cup \left\{ A \left( A c - \frac{c^2}{2} \right) \right\}_{(3,i)}, \quad i = 3, 4, \dots, 7.
 \end{aligned}$$

Então, se  $\hat{b}_7 \neq 0$ , temos que:  $b(A + D + I) = 0$

Demonstração:

Pelo lema 6.1 temos que a segunda componente do vetor  $b(A + D - I)$  será nula.

$$(b(A + D - I))_2 = (bA)_2 = 0$$

Por outro lado, como temos por hipótese um par FSAL sabemos que  $b_7 = 0$ , portanto:

$$b(A + D - I)_7 = b_7(c_7 - 1) = 0$$



Para concluir a nulidade de  $b(A + D - I)_{(3,6)}$  consideremos os conjuntos:

$$T^7 = \{c, c^2, c^3, A(Ac - \frac{c^2}{2})\}_{(3,7)} \text{ e } \{b - \hat{b}, b(A + c - I)\}_{(3,7)}$$

De [2] temos que os vetores de  $T^7$  são linearmente independentes e então, utilizando algumas das condições de ordem, entre as 17 necessárias para alcançarmos ordem 5, podemos demonstrar que os vetores  $(b - \hat{b})_{(3,7)}$  e  $(b(A + D - I))_{3,7}$  são ortogonais aos vetores de  $T^7$ .

Portanto, esses dois vetores são linearmente dependentes, isto é, podemos escrever:

$$b(A + D - I)_{(3,7)} = \alpha(b - \hat{b})_{(3,7)}$$

para algum  $\alpha \in \mathbb{R}$ .

Daí, considerando a última componente desses vetores temos que:

$$0 = b_7(c_7 - 1) = \alpha(b_7 - \hat{b}_7)$$

Logo,  $\alpha = 0$  pois  $b_7 - \hat{b}_7 \neq 0$ , uma vez que  $b_7 = 0$  e  $\hat{b}_7 \neq 0$ .

Isto nos permite concluir que as demais componentes do vetor  $b(A + D - I)_{(3,7)}$  serão também nulas.

Portanto, só nos resta mostrar a nulidade da primeira componente do vetor  $b(A + D - I)$ , o que é imediato se considerarmos a proposição 6.1, completando assim a demonstração.

**Definição 6.1** Dado um par embutido de métodos de  $RK(p, q)$  com  $p < q$ , se os coeficientes da parcela de ordem  $p+1$  na expressão do erro de truncamento local não forem todas diferentes de zero, então teremos um par de **métodos de quadratura defectivos** ou simplesmente **métodos defectivos**.

Um exemplo de pares defectivos são os produzidos por Fehlberg [8] e [9]. Tais métodos falham no controle do erro quando aplicados a problemas de quadratura.

**Lema 6.3** Seja o par de métodos  $RK(4, 5)$  com  $s=7$  estágios, satisfazendo a estratégia FSAL, caracterizado pelas matrizes  $A, b^t, \hat{b}^t$  e  $c$ .

Se o par de métodos satisfaz (6.1), mas não satisfaz a condição:

$$c_i \neq c_j, \quad c_i \neq 0 \text{ para } i, j = 3, 4, 5, 6 \quad (6.26)$$

então eles constituem um par de métodos de Quadratura Defectivos.

## Demonstração

Inicialmente observe que independente do valor assumido por  $\hat{b}_7$ , do lema 6.2 e da hipótese FSAL, temos que:

$$((c - c_6e)c)_i = 0 \quad \text{para } i = 1, 6, 7.$$

Daí, usando (6.26) podemos escrever que:

$$((c - c_je)(c - c_ue)(c - c_6e)c)_{3,7} = 0$$

para convenientes valores de  $c_j$  e  $c_u$ .

Portanto:

$$(b - \hat{b})(c - c_je)(c - c_6e)c = 0$$

de onde obtemos que  $\hat{b}c^4 = \frac{1}{5}$ , o que é uma contradição pois o método tem ordem 4.

Logo concluímos a tese.

**Lema 6.4** *Se além das hipóteses do lema 6.3 tivermos satisfeita também a condição*

*$c_i \neq c_j$ ,  $c_i \neq 0$  para  $i, j = 3, 4, 5, 6$  temos:*

$$(i) \text{ Se } \hat{b}_7 = 0 \text{ então } c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)}.$$

$$(ii) \text{ Se } c_6 = 1, \text{ então } b(A + D - I) = 0.$$

## Demonstração

(i) Sejam  $u = (A(D - c_3I)c)_{(3,6)}, S^6$  e  $v$  definido como no lema 6.2.

Como  $\hat{b}_7 = 0$  então, de [2], temos que os vetores de  $U_\eta^6 = S^6 \cup \{u + \eta v\} = \{c, c^2, c^3, u + \eta v\}_{(3,6)}$  são linearmente dependentes para qualquer valor de  $\eta$ .

Logo, podemos escrever o vetor  $u + \eta v$  como combinação linear dos demais vetores, ou seja, existem  $k$ ,  $\lambda$  e  $\mu$  (não todos nulos) tal que:

$$u + \eta v = (kc + \lambda c^2 + \mu c^3)_{(3,6)}$$

ou seja,

$$(A(D - c_3I)c)_{(3,6)} + \eta(A(Ac^2 - \frac{c^2}{2}))_{(3,6)} = (kc + \lambda c^2 + \mu c^3)_{(3,6)} \quad (6.27)$$

Multiplicando pela esquerda os vetores da equação (6.27) respectivamente por  $b_{(3,6)}$  e  $(bD)_{(3,6)}$  e utilizando algumas das 17 condições de ordem necessárias para alcançarmos ordem

cinco e as de simplificação (6.1) obtemos:

$$\frac{1}{12} - \frac{c_3}{6} = \frac{k}{2} + \frac{\lambda}{3} + \frac{\mu}{4} \quad (6.28)$$

$$\frac{1}{15} - \frac{c_3}{8} = \frac{k}{3} + \frac{\lambda}{4} + \frac{\mu}{5} \quad (6.29)$$

Tomando  $\eta = \frac{2(c_2 - c_3)}{c_2}$  e utilizando as condições de simplificação (6.1), podemos concluir que as duas primeiras componentes de (6.27) são:

$$0 = kc_3 + \lambda c_3^2 + \mu c_3^3 \quad (6.30)$$

$$0 = kc_4 + \lambda c_4^2 + \mu c_4^3 \quad (6.31)$$

As equações (6.28), (6.29), (6.30) e (6.31) devem ser satisfeitas simultaneamente, portanto, considerando como incógnitas  $\lambda, \mu, c_4$  e  $k$  determinamos  $\lambda$  e  $\mu$  de (6.28) e (6.29) e substituindo em (6.30) e (6.31) obtemos como resultado os possíveis valores para  $c_4$ :

$$c_4 = 0, c_4 = c_3 \text{ e } c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)}$$

Considerando que por hipótese  $c_i \neq c_j$  e  $c_i \neq 0$  para  $i = 3, 4, 5, 6$ , concluímos que

$$c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)}.$$

(ii) Utilizando algumas das 17 condições de ordem, podemos demonstrar que o vetor  $(b(A + D - I))_{(3,5)}$  é ortogonal aos três vetores linearmente independentes de  $S_5 = \{c, c^2, c^3\}_{(3,5)}$ .

Portanto os vetores  $(b(A + D - I))_{(3,5)}, c, c^2$  e  $c^3$  são linearmente dependentes, ou seja, existem  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$  tal que

$$x = (b(A + D - I))_{(3,5)} = \alpha c + \beta c^2 + \gamma c^3$$

Logo  $\langle x, x \rangle = \alpha \langle c, x \rangle + \beta \langle c^2, x \rangle + \gamma \langle c^3, x \rangle = 0$ , pois:

$$\langle c, x \rangle = \langle c^2, x \rangle = \langle c^3, x \rangle = 0$$

Portanto temos que  $(b(A + D - I))_{(3,5)} = 0$ .

Por outro lado, usando as hipóteses temos:

$$(b(A + D - I))_6 = b_6(c_6 - 1) \stackrel{c_6=1}{=} 0$$

$$(b(A + D - I))_2 = (bA)_2 \stackrel{\text{lema 6.1}}{=} 0$$

$$(b(A + D - I))_7 = b_7(c_7 - 1) \stackrel{b_7=0(FSAL)}{=} 0$$



Portanto:

$$(b(A + D - I))_{(2,7)} = 0 \xrightarrow{\text{proposição 6.1}} (b(A + D - I))_1 = 0$$

o que nos permite concluir que:  $b(A + D - I) = 0$ .

**Corolário 6.1** *Um par de métodos RK(4,5) com seis estágios e não defectivo deve satisfazer às relações:*

$$\hat{b}_7 \neq 0 \text{ e } b(A + D - I) = 0$$

ou

$$\hat{b}_7 = 0 \text{ e } c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)}$$

**Lema 6.5** *Assumindo que  $c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)}$ , temos garantia de que a equação  $bA^2c^2 = \frac{1}{60}$  é satisfeita quando as demais equações do Lema 6.1 são satisfeitas.*

Demonstração:

Multiplicando  $(b(A + D - I))_{(3,6)}$  à esquerda da equação (6.27) do Lema 6.4 e utilizando a equação (6.12) do Lema 6.1 obtemos a relação:

$$(bA + bD - bI)_{(3,6)}(A(D - c_3I)c)_{(3,6)} = (bA + bD - bI)_{(3,6)}(kc + \lambda c^2 + \mu c^3)_{(3,6)}$$

ou seja,

$$bA^2Dc + bDADC - bADc - c_3bAc - c_3bDc + c_3bc = kbAc + \lambda bAc^2 + \mu bAc^3 + kbDc + \lambda bDc^2 + \mu bDc^3 - kbc - \lambda bc^2 - \mu bc^3$$

$$bA^2c^2 + bDAc^2 - bAc^2 - c_3bAc - c_3bc^2 + c_3bc = kbAc + \lambda bAc^2 + \mu bAc^3 + kbc^2 + \lambda bc^3 + \mu bc^4 - kbc - \lambda bc^2 - \mu bc^3$$

Utilizando as equações do Lema 6.1, concluímos que:

$$bA^2c^2 = \frac{1}{60}$$

**Lema 6.6** Seja  $c_6 = 1$ . As condições  $bA^2c^2 = \frac{1}{60}$  e  $(bA^2)_2 = 0$  são consequência imediata das demais equações do Lema 6.1.

Demonstração

$$c_6 = 1 \xrightarrow{\text{Lema 6.4, (ii)}} b(A + D - I) = 0$$

Multiplicando  $Ac^2$  a direita de  $b(A + D - I) = 0$  temos que

$$bA^2c^2 + bDAc^2 - bAc^2 = 0$$

Pelo lema 6.1:

$$bA^2c^2 + \frac{1}{15} - \frac{1}{12} = 0 \Rightarrow bA^2c^2 = \frac{1}{60}$$

Multiplicando, agora,  $A^2$  à direita de  $b(A + D - I) = 0$  temos:

$$bA^2 + bDA - bA = 0 \Rightarrow (bA^2)_2 + (bDA)_2 - (bA)_2 = 0 \xrightarrow{\text{Lema 6.1}} (bA^2)_2 = 0$$

**Lema 6.7** Seja  $c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)}$ . As equações  $\hat{b}Ac^2 = \frac{1}{12}$  e  $(bA^2)_2 = 0$  são consequência imediata das demais equações do Lema 6.1.

De fato

$$c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)} \xrightarrow{(6.27)} \exists k, \lambda \text{ e } \mu / (A(D - c_3I)c)_{(3,6)} + \eta(A(Ac^2 - \frac{c^2}{2}))_{(3,6)} = (kc + \lambda c^2 + \mu c^3)_{(3,6)}$$

Multiplicando  $(b - \hat{b})$  a esquerda da equação (6.27) temos:

$$(b - \hat{b})[(A(D - c_3I) + \eta(A(Ac^2 - \frac{c^2}{2})))] = (b - \hat{b})(kc + \lambda c^2 + \mu c^3)_{(3,6)}$$

$$bADc - c_3bc - \hat{b}ADc + c_3\hat{b}c = kbc + \lambda bc^2 + \mu bc^3 - k\hat{b}c - \lambda \hat{b}c^2 - \mu \hat{b}c^3$$

$$bAc^2 - c_3bc - \hat{b}Ac^2 + c^3\hat{b}c = kbc + \lambda bc^2 + \mu bc^3 - k\hat{b}c - \lambda \hat{b}c^2 - \mu \hat{b}c^3$$

Pelo lema 6.1

$$\frac{1}{12} - c_3\frac{1}{2} - \hat{b}Ac^2 + c_3\frac{1}{2} = k\frac{1}{2} + \lambda\frac{1}{3} + \mu\frac{1}{4} - k\frac{1}{2} - \lambda\frac{1}{3} - \mu\frac{1}{4}$$

$$\hat{b}Ac^2 = \frac{1}{12}.$$

Para demonstrarmos que  $(bA^2)_2 = 0$  consideramos dois casos distintos

$$1^{\circ} \text{ caso: } c_6 = 1 \xrightarrow{\text{Lema 6.6}} (bA^2)_2 = 0$$

$$2^{\circ} \text{ caso: } c_6 \neq 1$$

Os vetores  $\{b(A + D - I), b - \hat{b}\}_{(3,6)}$  são ortogonais aos vetores de  $S_6 = \{c, c^2, c^3\}_{(3,6)}$  e consequentemente são linearmente dependentes, ou seja,  $\exists k / b(A + D - I) = k(b - \hat{b})_{(3,6)}$ . Multiplicando  $(A)_{(3,6)}$  à direita da equação temos:

$$bA^2 + bDA - bA = kbA - k\hat{b}A \Rightarrow (bA^2)_2 + (bDA)_2 - (bA)_2 = k(bA)_2 - k(\hat{b}A)_2$$

$$\xrightarrow{\text{Lema 6.1}} (bA^2)_2 = 0.$$

Considerando os resultados dos Lemas 6.4, 6.5 e 6.6, podemos identificar algumas possibilidades de caminhos a serem utilizados na busca de métodos embutidos  $RK(4, 5)$  com  $s = 7$ . No que segue apresentaremos dois casos distintos de conjunto de condições de ordem , equivalentes ao conjunto de equações apresentado no Lema 6.1.

$$1^{\circ} \text{ caso: } \hat{b}_7 \neq 0$$

$$c_6 = 1 \quad (6.32)$$

$$\left( Ac - \frac{1}{2}c^2 \right)_{(3,6)} = 0 \quad (6.33)$$

$$b^t c^i = \frac{1}{i+1}, \quad i = 0(1)4 \quad (6.34)$$

$$b_2 = 0 \quad (6.35)$$

$$(bA)_2 = 0 \quad (6.36)$$

$$(bDA)_2 = 0 \quad (6.37)$$

$$bAc^2 = \frac{1}{12} \quad (6.38)$$

$$bAc^3 = \frac{1}{20} \quad (6.39)$$

$$bDAc^2 = \frac{1}{15} \quad (6.40)$$

$$\hat{b}c^i = \frac{1}{i+1}, \quad 0(1)3 \quad (6.41)$$

$$\hat{b}_2 = 0 \quad (6.42)$$

$$(\hat{b}A)_2 = 0 \quad (6.43)$$

$$\hat{b}Ac^2 = \frac{1}{12} \quad (6.44)$$

2º caso:  $\hat{b}_7 = 0$

$$c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)} \quad (6.45)$$

$$\left( Ac - \frac{1}{2}c^2 \right)_{(3,6)} = 0 \quad (6.46)$$

$$b^t c^i = \frac{1}{i+1}, \quad i = 0(1)4 \quad (6.47)$$

$$b_2 = 0 \quad (6.48)$$

$$(bA)_2 = 0 \quad (6.49)$$

$$(bDA)_2 = 0 \quad (6.50)$$

$$bAc^2 = \frac{1}{12} \quad (6.51)$$

$$bAc^3 = \frac{1}{20} \quad (6.52)$$

$$bDAc^2 = \frac{1}{15} \quad (6.53)$$

$$\hat{b}c^i = \frac{1}{i+1}, \quad 0(1)3 \quad (6.54)$$

$$\hat{b}_2 = 0 \quad (6.55)$$

$$(\hat{b}A)_2 = 0 \quad (6.56)$$

# Algoritmo para a construção de pares de métodos embutidos RK(4,5).

**1º caso:**  $\hat{b}_7 \neq 0$  (FSAL)

Escolha  $c_2 \neq 0$  e  $c_3, c_4, c_5$  arbitrariamente, mas todos distintos e não nulos. Tome  $c_6 = 1$ .

Faça:  $a_{71} = b_1, a_{72} = b_2, a_{73} = b_3, a_{74} = b_4, a_{75} = b_5, a_{76} = b_6$

Determine  $K_1, K_2, K_3, K_4, L_1$  e  $L_2$  de:

$$K_1 = 1440b_4b_5\hat{b}_7c_4c_5(c_5 - c_6)(c_4 - c_5)(c_3^2 - c_3(c_4 + c_5) + c_4c_5)$$

$$K_2 = 1440b_5^2\hat{b}_7c_5^2(c_5 - c_6)(c_4 - c_5)(c_3^2 - 2c_3c_5 + c_5^2)$$

$$K_3 = 120b_5c_5(c_5 - c_6)(c_4 - c_5)(c_3 - c_5)(12b_6\hat{b}_7c_6(c_3 - c_6) - 2c_3 + 1)$$

$$K_4 = (5c_3(4c_6 - 3) - 2(5c_6 - 4))(12\hat{b}_7(c_4 - 1)(c_3 - 1) - 2c_3(3c_4 - 2) + 4c_4 - 3)$$

$$L_1 = b_5c_5(c_4 - c_5)(5c_3^2(4c_5 - 3) - c_3(20c_5^2 - 5c_5 - 8) + 2c_5(5c_5 - 4))$$

$$L_2 = b_6c_6(c_4 - c_6)(5c_3^2(4c_6 - 3) - c_3(20c_6^2 - 5c_6 - 8) + 2c_6(5c_6 - 4))$$

e substitua em

$$\hat{b}_6 = -\frac{b_6(K_1 + K_2 + K_3 + K_4)}{12(L_1 + L_2)}$$

**2º caso:**  $\hat{b}_7 = 0$  (Não FSAL)

Faça  $c_7 = 0$  e  $a_{7i} = 0$   $i = (1)6$

Escolha  $c_2 \neq 0$  e  $c_3, c_5, c_6$  arbitrariamente, mas todos distintos e não nulos (Se  $c_6 = 1$ , escolha  $c_3 \neq \frac{1}{2}$ ). Faça  $c_4 = \frac{c_3}{2(5c_3^2 - 4c_3 + 1)}$ .

## Em ambos os casos:

$$b_7 = 0$$

$$\hat{b}_5 = -\frac{12\hat{b}_6c_6(c_4 - c_6)(c_3 - c_6) + 12\hat{b}_7(c_4 - 1)(c_3 - 1) - 2c_3(3c_4 - 2) + 4c_4 - 3}{12c_5(c_3 - c_5)(c_4 - c_5)}$$

$$\hat{b}_4 = -\frac{6\hat{b}_5c_5(c_3 - c_5) + 6\hat{b}_6c_6(c_3 - c_6) + 6\hat{b}_7(c_3 - 1) - 3c_3 + 2}{6c_4(c_3 - c_4)}$$

$$\hat{b}_3 = -\frac{2\hat{b}_4c_4 + 2\hat{b}_5c_5 + 2\hat{b}_6c_6 + 2\hat{b}_7 - 1}{2c_3}$$

$$a_{32} = \frac{c_3^2}{2c_2}$$

$$a_{62} = -\frac{a_{32}(b_3(\hat{b}_4\hat{b}_5(c_3 - c_4) + \hat{b}_5\hat{b}_4(c_5 - c_3)) + b_4b_5\hat{b}_3(c_4 - c_5))}{b_4(b_5\hat{b}_6(c_4 - c_5) + \hat{b}_6\hat{b}_5(c_6 - c_4)) + b_5b_6\hat{b}_4(c_5 - c_6)}$$

$$a_{52} = \frac{a_{32}b_3(c_3 - c_4) + a_{62}b_6(c_6 - c_4)}{b_5(c_4 - c_5)}$$

$$a_{42} = -\frac{a_{32}b_3 + a_{52}b_5 + a_{62}b_6}{b_4}$$

$$a_{65} = \frac{5c_3(2c_4 - 1) - 5c_4 + 3}{60b_6c_5(c_3 - c_5)(c_4 - c_5)}$$

$$a_{64} = -\frac{60a_{54}b_5c_4(c_4 - c_5)(c_3 - c_4) + 5c_3(2c_5 - 1) - 5c_5 + 3}{60b_6c_4(c_3 - c_4)(c_4 - c_5)}$$

$$a_{54} = -\frac{5c_3(4c_6 - 3) - 2(5c_6 - 4)}{120b_5c_4(c_3 - c_4)(c_5 - c_6)}$$

$$a_{43} = -\frac{2a_{42}c_2 - c_4^2}{2c_3}$$

$$a_{53} = -\frac{2a_{52}c_2 + 2a_{54}c_4 - c_5^2}{2c_3}$$

$$a_{63} = -\frac{2a_{62}c_2 + 2a_{64}c_4 + 2a_{65}c_5 - c_6^2}{2c_3}$$

$$b_1 = 1 - b_3 - b_4 - b_5 - b_6 \quad \hat{b}_1 = 1 - \hat{b}_3 - \hat{b}_4 - \hat{b}_5 - \hat{b}_6 - \hat{b}_7$$

$$a_{21} = c_2 \quad a_{31} = c_3 - a_{32} \quad a_{41} = c_4 - a_{42} - a_{43}$$

$$a_{51} = c_5 - a_{52} - a_{53} - a_{54} \quad a_{61} = c_6 - a_{62} - a_{63} - a_{64} - a_{65}$$

$$b_2 = 0 \text{ e } \hat{b}_2 = 0$$

$$b_6 = \frac{5c_3(2c_4(3c_5 - 2) - 4c_5 + 3) - 5c_4(4c_5 - 3) + 3(5c_5 - 4)}{60c_6(c_3 - c_6)(c_4 - c_6)(c_5 - c_6)}$$

$$b_5 = -\frac{12b_6c_6(c_4 - c_6(c_3 - c_6) - 2c_3(3c_4 - 2) + 4c_4 - 3)}{12c_5(c_3 - c_5)(c_4 - c_5)}$$

$$b_4 = -\frac{6b_5c_5(c_3 - c_5) + 6b_6c_6(c_3 - c_6) - 3c_3 + 2}{6c_4(c_3 - c_4)}$$

$$b_3 = -\frac{2b_4c_4 + 2b_5c_5 + 2b_6c_6 - 1}{2c_3}$$



## Capítulo 7

### Considerações finais

A leitura deste trabalho permite perceber as dificuldades encontradas na obtenção de métodos de RK com ordem cinco, devido a não linearidade da maioria das condições de ordem que compõe o sistema com 17 equações .

Como podemos constatar no capítulo 2, estas dificuldades foram bastante minimizadas, a partir da introdução ao sistema constituído pelas condições de ordem das condições de simplificação propostas por Butcher, sendo que algumas destas são subsidiárias de outras.

Como principal resultado deste capítulo mostramos como as condições de simplificação associadas a algumas das condições de ordem permitem que 11 das condições de ordem sejam satisfeitas automaticamente, se forem também satisfeitas algumas condições de ordem subsidiárias.

Em outras palavras, se incorporarmos ao sistema as condições de simplificação e as condições de simplificação subsidiárias, podemos eliminar 11 das 17 condições de ordem.

É bem verdade que, em alguns casos, o número de condições de simplificação acrescentadas ao sistema é superior ao número de condições de ordem eliminadas, no entanto são equações bem mais simples do ponto de vista de não linearidade, tornando bem mais simples a resolução do sistema.

A utilização destas condições de simplificação na obtenção de métodos de RK, tem sido uma constante nos últimos anos porém, não encontramos nenhum trabalho onde fosse possível perceber com clareza a influência delas em cada uma das condições de ordem.

A partir deste trabalho, temos clareza da possibilidade de se efetuar várias combinações entre condições de ordem e de simplificação, uma vez que sabemos as implicações em cada



uma das condições de ordem, decorrentes da inclusão de cada condição de simplificação ao sistema.

No capítulo 3, consideramos uma outra classe de condições de simplificação e mostramos algumas combinações possíveis com aquelas já introduzidas no capítulo 2 e com algumas condições de ordem.

A formulação teórica dos métodos de RK construída por Albrecht considerando uma representação matricial, possibilitou algumas explorações interessantes do ponto de vista teórico.

Albrecht obteve uma relação de recorrência geradora das chamadas condições ortogonais, que permitiu estabelecer uma relação de equivalência entre as condições ortogonais e as condições de ordem do método. Consideramos esse resultado extremamente importante, em especial para o objetivo central deste trabalho.

Estas equivalências nos possibilitaram mostrar no capítulo 5, de uma maneira muito mais simples que aquela desenvolvida no capítulo 2, a necessidade das condições de simplificação subsidiárias sob a hipótese de algumas condições de simplificação e de ordem.

Além disso, desenvolvemos um estudo da influência de algumas condições de simplificação e subsidiárias na obtenção de pares embutidos de métodos de RK, que satisfazem a estratégia FSAL.

Isto nos permitiu concluir que, sob algumas restrições a mais impostas aos coeficientes dos métodos, podemos eliminar algumas condições subsidiárias do sistema simplificado, cuja solução nos fornece os coeficientes de pares de métodos de RK(4,5).

No final do capítulo 5, apresentamos dois casos distintos de condições que permitem gerar pares desses métodos.

Esperamos ter elaborado um trabalho que possa contribuir com os interessados em aprofundar investigações na resolução do sistema constituído pelas condições de ordem e sua interação com as condições de simplificação e as condições de simplificação subsidiárias.

Ainda, produzimos caminhos simplificados não apenas para a obtenção de métodos RK explícitos com ordem até cinco, mas também para a obtenção de pares embutidos de métodos RK com ordens 4 e 5 respectivamente.



# Bibliografia

- [1] Albrecht, P., *A new theoretical approach to Runge-Kutta methods*, SIAM Journal on Num. Analysis, 24, pp. 391-406, 1987.
- [2] Albrecht, P., *The Runge-Kutta theory in a nutshell*, SIAM J. on Num. Analysis, v.33,5, pp.1712-1735, 1996.
- [3] Basso, F.V.T. e Martins, S.P., *Condições para a obtenção de métodos de Runge-Kutta explícitos com ordem cinco*, resumos do XIX CNMAC, pp. 326-327, Goiânia-GO, 1996.
- [4] Butcher, J.C., *On Runge-Kutta processes of high order*, J. Austral. Math. Soc. 4, pp. 179-194, 1964.
- [5] Butcher, J.C., *The numerical analysis of ordinary differential equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*, Chichester West Sussex, England, John Wiley & Sons Ltda., 1987.
- [6] Cassity, C.R., *The complete solution of the fifth order Runge-Kutta equations*, SIAM J. Numer. Anal. 6, pp.432-436, 1969.
- [7] Dormand, J.R., Price, P.J., *A family of embedded Runge Kutta formulae*, J. Comput. Math. 6, pp19-26, 1980.
- [8] Fehlberg, F., *Low order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control and their application to some heat-transfer problems*, TRR-315, Nasa, 1969.
- [9] Fehlberg, E., *Classical fifth, sixth, seventh, and eight order Runge-Kutta formulas with step-size control*, TRR-287, Nasa, 1968.



- [10] Hairer, E., Norsett, S.P., Wanner, G., *Solving O.D.E: nonstiff problems*, Springer-Verlag, 1987.
- [11] Horn, M.K., *Fourth and fifth-order scaled Runge-Kutta algorithms for treating dense output*, SIAM J. Numer. Anal., vol 20, pp. 559-569, 1983.
- [12] Lambert, J.D., *Numerical methods for ordinary differential systems*, John Wiley & Sons, 1993.
- [13] Papakostas, S.N. e Papageorgiou, G., *A family of fifth-order Runge-Kutta pairs*, *Mathematics of Computation*, vol 65, pp. 1165-1181, 1996.
- [14] Papakostas, S.N., Tsitouras, C.H. e Papageorgiou G., *A general family of explicit Runge-Kutta pairs of orders 6(5)*, SIAM J. Numer. Anal., vol33, pp. 917-936, 1996.
- [15] Shanks, B.E., *Solutions of differential equations by evaluation of functions*, Math. Comp. 20, pp. 21-38, 1966.
- [16] Shampine, L.F., *Local extrapolation in the solution on ODE*, Math. Comp. 27, pp.91-97, 1973.



