**MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA-ROSENBROCK PARA
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS**

Valdemir Garcia Ferreira

Orientadora: Prof. Dra. Célia Maria Finazzi de Andrade

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências
Matemáticas de São Carlos, da Universidade de São
Paulo, para obtenção do Título de Mestre em
Ciências de Computação e Matemática Computacional.

São Carlos

1990

A Josepha, Clementina e Eliana

AGRADECIMENTOS

À Professora Célia Maria Finazzi de Andrade, por ter aceito a orientação do presente trabalho, por seu apoio e incentivos constantes, pelas sugestões frutíferas que foram mantidas durante sua realização e pela amizade em todos os momentos.

Aos Professores Leônidas Conceição Barroso e Aldenice Brito Pereira, por terem gentilmente concordado em participar como membros da Banca Examinadora.

Aos Professores Alagacone Sri Ranga, José Alberto Cuminato, Marielza Jorge Favaro, Marcos Nereu Arenales e Plácido Zoéga Táboas, pela amizade e pelo aprendizado durante os cursos de Pós-graduação.

Aos Professores Paulo Fernando de Arruda Mancera e Neide Maria Bertoldi Franco, pela amizade e colaboração.

Aos Amigos da UNESP de Bauru, em especial, aos Professores Antonio Roberto Balbo, Antonio César Barros e Sandra de Oliveira Vendramine, que sempre estiveram comigo nos momentos mais difíceis.

À FAPESP e UNESP pelo apoio financeiro.

**RUNGE-KUTTA-ROSENBROCK METHODS FOR
ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS**

Valdemir Garcia Ferreira

Adviser: Profa. Dra. Célia Maria Finazzi de Andrade

ABSTRACT

This work is concerned with Runge-Kutta and Rosenbrock methods for numerical solution of Ordinary Differential Equations. Special attention is devoted to an extension of the classical Rosenbrock method, namely the Rosenbrock-Wanner (ROW) methods.

A procedure for obtaining forth order A-stable ROW methods is presented and a method with these properties is exhibited. This is confirmed by numerical results.

The whole study is based on graphs theory in Butcher's like style.

RESUMO

Nesta dissertação é estudada a classe dos métodos de Runge-Kutta e também do tipo Rosenbrock para a solução de Equações Diferenciais Ordinárias. Atenção especial é dedicada aos métodos de Rosenbrock-Wanner (ROW) métodos, os quais são extensões dos métodos clássicos de Rosenbrock.

Um procedimento é apresentado para a obtenção dos métodos de Rosenbrock-Wanner de quarta ordem A-estáveis e um método com estas propriedades é mostrado. Isto é confirmado por resultados numéricos.

Todo o estudo, aqui apresentado, baseia-se na teoria dos grafos ao estilo de J.C. Butcher.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO	i
------------------	---

CAPÍTULO I - PRÉ-REQUISITOS

1.1 - Equações Diferenciais Ordinárias (E.D.O)	1
1.2 - Problema de Valor Inicial do Tipo "stiff"	2
1.3 - Alguns Resultados de Análise Matemática	4
1.4 - Uma Síntese sobre Grafos	6

CAPÍTULO II - ANÁLISE DOS MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

2.1 - A Estrutura Geral dos Métodos de Runge-Kutta	13
2.2 - Definições Preliminares Baseadas em Árvores	15
2.3 - As Derivadas da Solução verdadeira $y(x)$	16
2.4 - As Derivadas da Solução Aproximada $Y(x)$	18
2.5 - As Condições de Ordem para os Métodos de Runge-Kutta	21
2.6 - As Hipóteses Simplificadoras	22
2.7 - Construção de Alguns Métodos de Runge-Kutta	25

CAPÍTULO III - ANÁLISE DOS MÉTODOS DO TIPO ROSENBROCK

3.1 - Introdução	36
3.2 - A Estrutura Geral dos ROW-Métodos	37
3.3 - Definições Preliminares Baseadas em Árvores	38
3.4 - As Séries de Butcher	42
3.5 - As Condições de Ordem	50

CAPÍTULO IV - ROW-MÉTODOS A-ESTÁVEIS COM ESTUDO DO ERRO DE TRUNCAMENTO LOCAL

4.1 - Introdução	58
4.2 - Estudo da A-estabilidade	58
4.3 - Construção de Alguns ROW-métodos A-estáveis	65
4.4 - Estudo do Erro de Truncamento Local	75

CAPÍTULO V - APLICAÇÕES NUMÉRICAS 79

BIBLIOGRAFIA 94

INTRODUÇÃO

Resolver um Problema de Valor Inicial

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

é um dos principais problemas da Análise Numérica, considerando-se a grande variedade de situações físicas que levam a este tipo de relação, que em geral não pode ser resolvido analiticamente.

Uma maneira simples para aproximar a solução de (*), a qual foi proposta por Euler, em 1768, é fazer o uso de uma seqüência de aproximações $y_1, y_2, \dots$, de $y(x_1), y(x_2), \dots$, respectivamente, obtidas a partir de $x_0, x_1, \dots$ e da fórmula, conhecida como método Euler,

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_n), \quad n=0, 1, 2, \dots,$$

onde $h = x_{n+1} - x_n$, é denominado tamanho do passo de integração.

A idéia de estender o método de Euler usando diversas avaliações da função f em cada passo, foi proposta inicialmente por Runge, em 1895. Mais tarde, contribuições importantes foram devidas a Heun, em 1900, e a Kutta, em 1901. Recentemente os chamados métodos de Runge-Kutta foram completamente caracterizados.

O objetivo do presente trabalho é estudar a caracterização dos métodos de Runge-Kutta, para resolver o problema (*), usando, como embasamento teórico, o conceito de árvores ao estilo de J.C. Butcher, e fazer um estudo detalhado dos métodos de Rosenbrock-Wanner, propostos por Wanner em 1973, os quais são modificações dos métodos clássicos de Rosenbrock, sugeridos por Rosenbrock em 1963.

No capítulo I estudamos alguns conceitos básicos necessários para o desenvolvimento do trabalho, apresentando uma síntese da teoria dos grafos.

O capítulo II é destinado à análise dos métodos do tipo Runge-Kutta, centralizando-nos nas condições de ordem e hipóteses simplificadoras e suas aplicações.

No capítulo III apresentamos os métodos de Rosenbrock-Wanner e os conceitos fundamentais, também baseados na teoria dos grafos, para a compreensão das condições de ordem de tais métodos e dos capítulos posteriores.

No capítulo IV estudamos o conceito da A-estabilidade para os métodos do tipo Rosenbrock e a construção desses métodos com tal propriedade, usando as hipóteses simplificadoras. Em particular, obtemos um método original de quarta ordem com quatro estágios e A-estável. Também, apresentamos o erro de truncamento local principal e uma maneira de estimá-lo utilizando a técnica de extrapolação de Richardson.

O capítulo V é reservado aos exemplos numéricos que comprovam a teoria descrita nos capítulos III e IV.

Ao final, apresentamos as referências bibliográficas utilizadas durante todo o desenvolvimento, tanto teórico como prático, deste trabalho.

CAPÍTULO I

PRÉ-REQUISITOS

Neste capítulo introduziremos alguns conceitos básicos e resultados matemáticos, os quais são de muita valia para o desenvolvimento deste trabalho.

1.1 - Equações Diferenciais Ordinárias (E.D.O)

Consideramos o sistema de equações diferenciais

$$y'(x) = f(x, y(x)), \quad (1.1.1)$$

onde $f: [x_0, x_n] \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $y: [x_0, x_n] \rightarrow \mathbb{R}^n$. Uma solução de (1.1.1) é uma função $y \in C^1([x_0, x_n], \mathbb{R}^n)$, a qual satisfaz (1.1.1) para todos os $x \in [x_0, x_n]$. Se além disso impusermos

$$y(x_0) = y_0, \quad (1.1.2)$$

teremos o par (1.1.1)-(1.1.2), o qual constitui um Problema de Valor Inicial (P.V.I).

Por um sistema autônomo de equações, entendemos uma relação do tipo (1.1.1), na qual f é independente de x , ou seja,

$$y'(x) = f(y(x)). \quad (1.1.3)$$

A exemplo do que fazem diversos autores, como por exemplo Butcher em [Butcher,87], durante todo o nosso trabalho daremos atenção aos sistemas autônomos, haja visto que eles são equivalentes aos da forma (1.1.1) (não autônomos).

A existência e unicidade de solução para o par (1.1.3)-(1.1.2) está assegurada pelo seguinte teorema, cuja demonstração é encontrada em [Butcher,87; pag.23].

Teorema 1.1.1 - Se f , dada em (1.1.3), satisfaz a condição de Lipschitz com constante L , então existe uma única solução $y(x)$ do problema (1.1.3)-(1.1.2).

1.2 - Problema de Valor Inicial do Tipo "stiff"

Os problemas chamados "stiff" são aqueles que apresentam um fenômeno matemático denominado "stiffness". Eles são importantes na Análise Numérica porque ocorrem com frequência na prática e são difíceis de serem resolvidos por métodos numéricos tradicionais. A essência desse fenômeno é que a solução a ser computada está variando lentamente, mas se existirem perturbações, estas são rapidamente amortecidas.

Para ilustrar o fenômeno "stiffness" consideramos o P.V.I (1.1.1)-(1.1.2), cuja solução exata é $y(x)$ e uma vizinhança V de $y(x)$. Em V o sistema (1.1.1) pode ser aproximado, segundo [Barcelos, 89; pag.4], pela equação variacional

$$y' - J(x)[y - y(x)] - f(x, y(x)) = 0, \quad (1.2.1)$$

onde $J(x)$ é a matriz jacobiana de f , avaliada em $(x, y(x))$, e y são soluções de (1.1.1). Se a variação de $J(x)$, para $x \in [x_0, x_n]$, é suficientemente pequena, então um sistema fundamental de (1.2.1) é aproximadamente $\{v_i \exp(\lambda_i x)\}$, $(1 \leq i \leq n)$, onde λ_i são os autovalores, assumidos distintos, de $J(x)$ e v_i os autovetores associados. Assim, a solução geral y de (1.1.1), na vizinhança V , tem a forma

$$y \approx y(x) + \sum_{i=1}^n c_i e^{\lambda_i x} v_i, \quad (1.2.2)$$

onde $c_i, (1 \leq i \leq n)$, são constantes arbitrárias.

Observamos a partir de (1.2.2) o fenômeno "stiffness". De fato, a presença das exponenciais $e^{\lambda_i x}$ caracterizam a resposta

(local) do sistema (1.1.1) para pequenas variações ou perturbações sobre a solução particular $y(x)$ e quando $\text{Re}(\lambda_1) \ll 0$, estas exponenciais decaem rapidamente com o crescimento de x , ou seja, são rapidamente amortecidas. O exemplo que segue, extraído de [Lambert,73;pag.229], ilustra claramente o fenômeno "stiffness".

Exemplo 1.2.1 - Consideramos o P.V.I

$$\begin{cases} y_1' = -21y_1 + 19y_2 - 20y_3, & y_1(0) = 1 \\ y_2' = 19y_1 - 21y_2 + 20y_3, & y_2(0) = 0 \\ y_3' = 40y_1 - 40y_2 - 40y_3, & y_3(0) = -1 \end{cases},$$

cuja solução exata é $\mathbf{y}^T(x) = (y_1(x), y_2(x), y_3(x))$ com

$$y_1(x) = 0.5\exp(-2x) + 0.5\exp(-40x)[\cos(40x) + \sin(40x)],$$

$$y_2(x) = 0.5\exp(-2x) - 0.5\exp(-40x)[\cos(40x) + \sin(40x)],$$

$$y_3(x) = -\exp(-40x)[\cos(40x) - \sin(40x)].$$

Os gráficos de y_1 , y_2 e y_3 são mostrados na figura abaixo, para $x \in [0, 1]$.

Observamos que a presença do fator $\exp(-40x)$ carrega rapidamente as componentes de $\mathbf{y}^T(x)$ para zero, quando $x \geq 0.1$.

Em suma, podemos dizer que os sistemas do tipo "stiff" são aqueles cujas soluções contém componentes com rápido decaimento, tais como as exponenciais.

1.3 - Alguns Resultados de Análise Matemática

Em [Lima,70] encontramos bem explicadas as considerações sobre diferenciais a seguir apresentadas.

Sejam U um aberto do $\mathbb{R}^m$ e $f: U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ $(r-1)$ -vezes diferenciável. A $(r-1)$ -ésima derivada de f é uma aplicação de U sobre o espaço das aplicações $(r-1)$ -lineares de $\mathbb{R}^m$ em $\mathbb{R}^n$, isto é,

$$f^{(r-1)}: U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow L_{r-1}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n) = L(\mathbb{R}^m \times \dots \times \mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n).$$

Quando a aplicação $f^{(r-1)}$ for diferenciável em um ponto x de U , diremos que f é r vezes diferenciável em x e identificaremos $f^{(r)}(x)$, a derivada de $f^{(r-1)}$ em x , com uma aplicação r -linear de $\mathbb{R}^m$ em $\mathbb{R}^n$, a qual chamaremos de r -ésima derivada de f no ponto x . Esta identificação é perfeitamente justificada pelo isomorfismo canônico

$$L(\mathbb{R}^m, L_{r-1}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)) \approx L_r(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n).$$

Em resumo, a derivada $f^{(r)}$ em $x \in U$ pode ser "pensada" como um operador, a valores em $\mathbb{R}^n$, cujo argumento é um vetor do produto cartesiano $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \times \dots \times \mathbb{R}^m$ (r fatores) e linear em cada variável.

Seja S um conjunto finito arbitrário. Denotaremos por $\#S$ a cardinalidade de S , e por $P(S)$ o conjunto de todas as partições de S . Assim, se $p \in P(S)$ então $p = \{p_1, p_2, \dots\}$, onde $p_1, p_2, \dots$ são distintos do vazio, dois a dois disjuntos e $\bigcup_i p_i = S$. Também, denotaremos por $\#p$ o número de elementos da partição p .

Em [Butcher,87] são provados os lemas a seguir.

Lema 1.3.1 - (uma versão da regra da cadeia) - Se $y(x)$ satisfazendo (1.1.3), é $\#S$ vezes diferenciável em x e f é $\#S$ vezes diferenciável em $y(x)$, então $(f \circ y)(x)$ é $\#S$ vezes diferenciável em x e

$$(f \circ y)^{(\#S)}(x) = \sum_{p \in P(S)} f^{(\#p)}(y(x)) \cdot (y^{(\#p_1)}(x), y^{(\#p_2)}(x), \dots). \quad (1.3.1)$$

Lema 1.3.2 - Sejam U e V matrizes quadradas de ordem 3 tais que

$$UV = \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{com } \det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \neq 0.$$

Então ou a terceira linha de U é nula, ou a terceira coluna de V é nula.

O teorema que segue, demonstrado em [Ahlfors,79; pag.134], conhecido como Princípio do Módulo Máximo para funções analíticas, tem fundamental importância no estudo da A-estabilidade de métodos numéricos.

Teorema 1.3.3 - Seja G uma região do plano complexo. Se $f: G \rightarrow \mathbb{C}$ é analítica e não constante em G , então $|f(z)|$ não assume máximo em G .

Usaremos, com frequência, a notação

$$f(h) = O(h^p), \quad h \rightarrow 0,$$

para expressar que existe uma constante positiva K tal que, para h nas vizinhanças do zero,

$$|f(h)| \leq Kh^p,$$

onde $h > 0$ será, para nós, o tamanho do passo do método numérico.

1.4 - Uma Síntese Sobre Grafos

Os conceitos aqui apresentados são baseados em [Berge,62], [Butcher,87; cap.1] e [Hairer,87].

Entendemos por grafo um par (V,A) , onde V é um conjunto finito arbitrário e $A \subseteq \{\{x,y\}; x,y \in V \text{ com } x \neq y\}$. Os elementos de V e de A são, respectivamente, chamados de vértices e arestas do grafo (V,A) . Representamos um grafo usando pontos em um diagrama para representar os vértices e segmentos unindo vértices para representar as arestas. Assim, o grafo (V,A) onde $V=\{1,2,3\}$ e $A=\{\{1,2\},\{2,3\}\}$ pode ser representado, por exemplo, como

Definição 1.4.1 - Uma cadeia é definida como uma seqüência de arestas distintas $a_1, a_2, \dots, a_n$ tais que $a_i = \{v_{i-1}, v_i\}$, com v_{i-1}, v_i em V , $(1 \leq i \leq n)$. Neste caso, dizemos que tal cadeia vai de v_0 a v_n . Uma cadeia que vai de v_j a v_j é chamada um circuito.

Definição 1.4.2 - Dois vértices, em um grafo, são chamados conectados se existe uma cadeia que vai de um ao outro. Um grafo é chamado conexo se quaisquer dois de seus vértices são conectados.

Definição 1.4.3 - Todo grafo (V,A) conexo e sem circuitos é chamado uma árvore sem raiz.

Definição 1.4.4 - Uma árvore com raiz é uma terna (V,A,r) , onde (V,A) é uma árvore sem raiz e $r \in V$, distinguido dos demais vértices, é a raiz.

Exemplo 1.4.5 - Os grafos mostrados abaixo são árvores com raízes.

Definição 1.4.6 - Um grafo direcionado é um par (V, R) , onde V é um conjunto finito arbitrário e $R \subseteq \{(x, y) \in V \times V; x \neq y\}$.

Da mesma forma como em grafos, V é o conjunto dos vértices, mas os elementos de R serão chamados de arcos do grafo direcionado. Se $(x, y) \in R$, chamaremos y de sucessor de x e x de predecessor de y . Diagramaticamente, um arco (x, y) pode ser representado por

Definição 1.4.7 - Dizemos que um grafo direcionado é injetivo, se todo vértice possui no máximo um predecessor.

Definição 1.4.8 - Um caminho é uma seqüência de arcos distintos $r_1, r_2, \dots, r_n$, tais que $r_i = (v_{i-1}, v_i)$, com v_{i-1}, v_i em V , $(1 \leq i \leq n)$. Neste caso dizemos que tal caminho vai de v_0 a v_n . Um caminho que vai v_j a v_j é chamado um ciclo.

Definição 1.4.9 - Dois vértices v_1 e v_2 em um grafo são ditos conectados a partir de baixo, se existe um caminho que vai de v_1 a v_2 , ou um caminho que vai de v_2 a v_1 , ou ainda um caminho que vai de v_0 a v_1 e um caminho que vai de v_0 a v_2 , onde v_0 é algum outro vértice. Um grafo direcionado é dito conexo a partir de baixo, se quaisquer dois de seus vértices são conectados a partir de baixo.

Exemplo 1.4.10 - Os grafos mostrados abaixo são conectados a partir de baixo.

Definição 1.4.11 - Um grafo direcionado (V,R) é ordenado se existe uma ordem total em V tal que se $r_1, r_2 \in V$ e $(r_1, r_2) \in R$ então $r_1 < r_2$.

Definição 1.4.12 - Uma árvore direcionada é um grafo direcionado injetivo, ordenado e conexo a partir de baixo. O menor elemento de V será a raiz da árvore direcionada.

Nós, agora, enunciaremos dois resultados importantes, cujas demonstrações encontram-se em [Butcher, 87; pag. 84], os quais estabelecem uma relação entre os conceitos de árvores direcionadas e árvores com raízes.

Teorema 1.4.13 - Seja (V,R) uma árvore direcionada e r sua raiz. Definindo $A = \{(x,y); (x,y) \in R\}$, então (V,A,r) é uma árvore com raiz.

Teorema 1.4.14 - Seja (V,A,r) uma árvore com raiz. Definindo $RSV \times V$ como $(x,y) \in R \leftrightarrow$ existe uma cadeia que vai de r a y , cujo último elemento é $\{x,y\}$, então (V,R) é uma árvore direcionada com raiz r .

Daqui em diante chamaremos uma árvore direcionada ou uma árvore com raiz, simplesmente por árvore. Usualmente denotaremos os arcos de uma árvore por arestas. O símbolo τ será reservado para denotar a árvore com exatamente um vértice e o símbolo $\emptyset$ denotará a árvore sem nenhum vértice. Usaremos também a letra A para denotar o conjunto de todas as árvores.

Sejam $t_1, t_2, \dots, t_n \in A$ tais que $t_i = (V_i, R_i)$, $t_i \neq \emptyset$, $(1 \leq i \leq n)$. Se $r_i \in V_i$, $(1 \leq i \leq n)$, é a raiz da árvore t_i , então podemos ver facilmente que, sendo $V = \{r\} \cup V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_n$, com $r \notin V_i, (1 \leq i \leq n)$, e $R = \{(r, r_1), (r, r_2), \dots, (r, r_n)\} \cup R_1 \cup R_2 \cup \dots \cup R_n$, a árvore $t = (V, R)$ também está em A e denotaremos esta árvore como

$$t = [t_1 t_2 \dots t_n]. \quad (1.4.1)$$

Dada $t \in A$, com $t \neq \tau$ e $t \neq \emptyset$, podemos obter uma decomposição do tipo (1.4.1), simplesmente removendo a raiz de t e todos os arcos que partem dela e identificando $t_1, t_2, \dots, t_n$ como os diagramas separados que restaram. Se ocorrerem repetições entre as árvores $t_1, t_2, \dots, t_n$, denotaremos (1.4.1) como $t = [t_1^{x_1} t_2^{x_2} \dots t_n^{x_n}]$, onde x_j , ($1 \leq j \leq n$), são os números de repetições de t_j . Quando ocorrer justaposição do símbolo $[$, ou do símbolo $]$, numa decomposição do tipo (1.4.1), usaremos a notação $[_n$ (respectivamente $]_n$) para indicar o número de repetições desses símbolos. Assim, podemos escrever $[[[\tau] \tau]]$ também como $[_2[\tau] \tau]_2$, mas nunca como $[_3\tau] \tau]_2$.

Levando em conta as notações introduzidas acima, podemos expressar qualquer árvore como uma sequência de símbolos τ , $[$ e $]$. Como exemplo, consideramos a seguinte árvore

a qual pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 t &= \left[\begin{array}{c} \text{tree diagram} \end{array} \right] = [[\tau^2 \begin{array}{c} \text{tree diagram} \end{array}]] = [[\tau^2 [\tau^2 \begin{array}{c} \text{tree diagram} \end{array}]]] = [[\tau^2 [\tau^2 [\tau^2]]]] \\
 &= [_2 \tau^2 [\tau^2 [\tau^2]]]_2.
 \end{aligned}$$

Vamos agora introduzir algumas funções definidas em A e algumas maneiras de nomear $t \in A$, as quais têm grande utilidade nos capítulos seguintes.

Seja $t = (V, R) \in A$, com $t \neq \emptyset$. A cardinalidade de V será denotada por $r(t)$. A densidade Γ de uma árvore t , $\Gamma(t)$, é calculada

associando, inicialmente, o valor 1 a todos os vértices terminais de t e o valor $1+i$ aos não terminais, onde i é a soma dos inteiros associados aos sucessores do vértice de valor $1+i$. $\Gamma(t)$ será então o produto dos inteiros associados a cada vértice da árvore. Como exemplo, consideramos a árvore

A densidade de t será então, $\Gamma(t)=8.7.4.2.1$. Mais exemplos podem ser encontrados na tabela 1.1 ao final deste capítulo.

Se $t \in A$, com $t \neq \emptyset$, $\beta(t)$ denotará o número de maneiras de nomear t com $r(t)$ nomes distintos. $\beta_n(t)$, $n > 0$, denotará o número de maneiras de nomear n vértices de t , com n nomes distintos, sob a condição de que todo vértice terminal deve ser nomeado. Como exemplo, consideramos a seguinte árvore:

$$t = [\tau\tau\tau] = [\tau^3] = \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \end{array} . \text{ Então,}$$

$$\beta(t) = \# \left\{ \begin{array}{c} b \quad c \quad d \quad a \\ \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ a \end{array} , \begin{array}{c} a \quad c \quad d \quad a \\ \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ b \end{array} , \begin{array}{c} a \quad b \quad d \quad a \\ \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ c \end{array} , \begin{array}{c} a \quad b \quad c \quad a \\ \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ d \end{array} \right\} = 4,$$

$$\beta_3(t) = \# \left\{ \begin{array}{c} \quad b \quad \\ \diagdown \quad \diagup \quad \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ a \quad c \end{array} \right\} = 1.$$

Mais exemplos estão na tabela 1.1 ao final deste capítulo.

Para cada conjunto S de inteiros consideramos o conjunto A_S formado por todas as árvores com exatamente $\#S$ vértices, cada vértice nomeado com um elemento de S , tal que ao longo de cada

arco os nomes estejam em ordem crescente. Dada $u \in A_S$, denotaremos por $|u|$ o correspondente elemento de A formado por simples remoção dos nomes de u . Assim se $t \in A$, com $r(t) = \#S$, definimos, para cada $t \in A$, $\alpha(t) = \#\{u \in A_S; |u| = t\}$. Como exemplo, consideramos $S = \{1, 2, 3, 4\}$. Então, A_S torna-se

Assim, se $t = [\tau \mid \tau] = \text{diagram}$, $\alpha(t) = 3$.

Mais exemplos podem ser encontrados na tabela 1.1 ao final deste capítulo.

Observação 1.4.15 - Quando $t = \emptyset$, convencionaremos que

$$\Gamma(\emptyset) = \beta(\emptyset) = \beta_n(\emptyset) = \alpha(\emptyset) = 1.$$

Com a finalidade de analisar os métodos do tipo Rosenbrock, capítulo III, vamos definir AN como sendo o conjunto de todas as árvores nomeadas, incluindo a árvore $\emptyset$, tal que ao longo de cada arco os nomes estejam na ordem crescente. Observamos que, suprimindo os nomes de todas as árvores de AN , obtemos o conjunto de todas as árvores não nomeadas A .

Propriedades 1.4.16 - Dada $t \in A$, $t \neq \emptyset$, vale:

- i) $r([t_1 t_2 \dots t_n]) = 1 + r(t_1) + \dots + r(t_n)$,
- ii) $\Gamma(t) = \Gamma([t_1 t_2 \dots t_n]) = r(t) \Gamma(t_1) \dots \Gamma(t_n)$,
- iii) $\Gamma(t) = \beta(t) / \alpha(t)$.

Tabela 1.1: Algumas funções definidas sobre A

t		$r(t)$	$\Gamma(t)$	$\alpha(t)$	$\beta(t)$
τ	1	1	1	1
$[\tau]$	2	2	1	2
$[\tau^2]$	3	3	1	3
$[_2\tau]_2$	3	6	1	6
$[\tau^3]$	4	4	1	4
$[\tau[\tau]]$	4	8	3	24
$[_2\tau^2]_2$	4	12	1	12
$[_3\tau]_3$	4	24	1	24
$[\tau^2[\tau]]$	5	10	6	60
$[\tau[\tau^2]]$	5	15	4	60

CAPÍTULO II

ANÁLISE DOS MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

A análise feita neste capítulo segue a linha de J.C. Butcher e os resultados apresentados são baseados em [Butcher,87; cap.3], [Dekker-Verwer,84; cap.3] e [Hairer,87; cap.2].

2.1 - A estrutura Geral dos Métodos de Runge-Kutta

Seja y_n uma aproximação para $y(x_n)$, onde y satisfaz o sistema de equações (1.1.3). Um método geral de Runge-Kutta tem a forma, apresentada por Butcher em [Butcher,63],

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(Y_i), \quad (n \geq 0), \quad (2.1.1)$$

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j), \quad (1 \leq i \leq s), \quad (2.1.2)$$

onde $h > 0$ é o tamanho do passo. As constantes reais b_i e a_{ij} distinguem diferentes processos deste tipo. O par de fórmulas (2.1.1)-(2.1.2) é chamado método de Runge-Kutta de s estágios, pois ele baseia-se em s avaliações da função f . Se para $j \geq 1$ $a_{ij} = 0$, então o vetor Y_i , ($1 \leq i \leq s$), pode ser computado explicitamente a partir de $Y_1, Y_2, \dots, Y_{i-1}$. Nesse caso (2.1.1)-(2.1.2) é chamado método explícito de Runge-Kutta. No caso de $a_{ij} = 0$, $j > i$, e $a_{ii} \neq 0$, para algum i então, $Y_1, Y_2, \dots, Y_s$ são definidos implicitamente por (2.1.2). Tais processos são chamados de métodos semi-implícitos de Runge-Kutta. Se um tal método não for explícito nem semi-implícito, ele será chamado de método implícito de Runge-Kutta.

Desde que $Y_1, Y_2, \dots, Y_s$ são definidos implicitamente por (2.1.2), é natural perguntar se este conjunto de equações

simultâneas tem solução e, em caso positivo, se é única. Sob a hipótese de que para $h>0$, $hL \leq 1/\|A\|$, onde h é o tamanho do passo, L a constante de Lipschitz e $A=(a_{ij})$ a matriz dos coeficientes do método, este sistema de equações tem solução única [Butcher,87; pag.213]]. Para os problemas "stiff", onde em geral a constante L é grande, não podemos garantir a existência e unicidade de (2.1.2) sem requerer hipóteses adicionais sobre f e o próprio método. Se este for o caso, (2.1.2) terá solução única [Butcher,87; pag.274] se:

- A é definida positiva;
- f satisfaz a condição uni-lateral de Lipschitz

$$(f(u)-f(v))^t(u-v) \leq \lambda \|u-v\|^2, \quad \forall u,v \in \mathbb{R}^n,$$

onde $\lambda \in \mathbb{R}$ é chamada constante uni-lateral de Lipschitz.

Convencionaremos para o par (2.1.1)-(2.1.2), $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$,

($1 \leq i \leq s$). Também representaremos um método de Runge-Kutta de forma mais compacta, como aparece em [Butcher,64],

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

Com a finalidade de introduzir as condições de ordem para os métodos de Runge-Kutta, vamos redefinir o par (2.1.1)-(2.1.2) para computar $Y(x)$ como uma aproximação de $y(x)$, a partir do valor conhecido $y(x_n)$, por:

$$Y(x) = y(x_n) + (x-x_n) \sum_{i=1}^s b_i f(Y_i(x)), \quad (2.1.3)$$

$$Y_i(x) = y(x_n) + (x-x_n) \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j(x)), \quad (1 \leq i \leq s). \quad (2.1.4)$$

2.2- Definições Preliminares Baseadas em Árvores

Seja $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ suficientemente diferenciável. Levando em conta que $f^{(r)}(y(x))$ pode ser interpretada como um operador r -linear (ver isomorfismo canônico na seção 1.3), definimos a diferencial elementar de f , com respeito a $t \in A$, como sendo a função $F(t): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal que, $\forall y \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{cases} F(\emptyset)(y) = y, \\ F(\tau)(y) = f(y), \\ F([t_1 \dots t_r])(y) = f^{(r)}(y) \cdot (F(t_1)(y), \dots, F(t_r)(y)). \end{cases} \quad (2.2.1)$$

Dada $t \in A$, com $t \neq \emptyset$, vamos definir certos polinômios nos parâmetros de um método de Runge-Kutta, os quais têm grande utilidade no estudo das condições de ordem. Formalmente, o peso elementar $\phi_i(t)$, com respeito a $t \in A$, é definido recursivamente por

$$\begin{aligned} \phi_i(\tau) &= c_i, \quad (1 \leq i \leq s), \\ \phi_i([t_1 t_2 \dots t_m]) &= \sum_{j=1}^s a_{ij} \phi_j(t_1) \dots \phi_j(t_m), \quad (1 \leq i \leq s+1). \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Na segunda igualdade acima, quando $i=s+1$, denotaremos $\phi_{s+1}(t)$ simplesmente por $\phi(t)$.

O polinômio particular $\phi(t)$ tem fundamental importância no desenvolvimento dos métodos de Runge-Kutta, em particular nas condições de ordem apresentadas na seção 2.5. Butcher, em

[Butcher,87; pag.132], apresenta uma regra muito simples para obter $\phi(t)$, para $t \in A$ com $t \neq \emptyset$: à raiz r fixamos o nome i e para os demais vértices associamos $j, k, l, \dots$. Para cada arco escrevemos, no sentido do arco orientado, o fator a_{xy} onde x, y são os vértices que compõem o arco. $\phi(t)$ será então, a soma em $i, j, k, \dots$, ($1 \leq i, j, k, \dots, \leq s$), dos produtos dos fatores $b_i \prod a_{xy}$. Por exemplo, para a árvore

$$\phi(t) = \sum_{i,j,\dots,p,q=1}^s b_i a_{ij} a_{jo} a_{jp} a_{jq} a_{ik} a_{km} a_{kl} a_{ln}.$$

Levando-se em conta que $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$, podemos expressar $\phi(t)$ numa forma mais compacta

$$\phi(t) = \sum_{i,j,k,l=1}^s b_i a_{ij} c_j^3 a_{jk} c_k a_{kl} c_l.$$

Observamos que os fatores c_j , c_k e c_l foram associados aos arcos terminais da árvore. Mais exemplos estão na tabela 2.1 ao final deste capítulo.

2.3 - As Derivadas da Solução Verdadeira $y(x)$

Nesta seção vamos buscar uma fórmula para $y^{(r)}(x)$, onde $y(x)$ satisfaz (1.1.3), em termos de diferenciais elementares de f com respeito a $t \in A$.

Lema 2.3.1 - Seja S um conjunto arbitrário finito e diferente de $\emptyset$. Se f é $\#S-1$ vezes diferenciável em $y(x)$ e $y'(x)=(f \circ y)(x)$, então $y(x)$ é $\#S$ vezes diferenciável em x e

$$y^{(\#S)}(x) = \sum_{u \in A_S} F(|u|)(y(x)),$$

onde $|u|$ e A_S estão definidos na seção 1.4.

Prova: (indução sobre $\#S$). Se $\#S=1$, $A_S=\{\tau\}$ e $|u|=\tau$. Assim,

$$y'(x)=f(y(x))=F(\tau)(y(x)).$$

Seja $S=\{s\} \cup S_0$, onde s é menor que cada elemento de S_0 . Então, usando a relação (1.3.1), levando em conta a r -linearidade de $f^{(r)}(y(x))$ e que $p_1, p_2, \dots$ são elementos de uma mesma partição p , temos

$$\begin{aligned} y^{(\#S)}(x) &= y^{(\#S_0+1)}(x) = (f \circ y)^{(\#S_0)}(x) \\ &= \sum_{p \in P(S_0)} f^{(\#p)}(y(x)) \cdot (y^{(\#p_1)}(x), y^{(\#p_2)}, \dots) \\ &= \sum_{p \in P(S_0)} f^{(\#p)}(y(x)) \cdot \left\{ \sum_{u_1 \in A_{p_1}} F(|u_1|)(y(x)), \sum_{u_2 \in A_{p_2}} F(|u_2|)(y(x)), \dots \right\} \\ &= \sum_{p \in P(S_0)} \left\{ \sum_{u_1 \in A_{p_1}} \sum_{u_2 \in A_{p_2}} \dots \right\} F(|u_1| |u_2| \dots)(y(x)) \\ &= \sum_{u \in A_S} F(|u|)(y(x)). \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Usando o lema 2.3.1 e que $\alpha(t)=\#\{u \in A_S; |u|=t\}$, para $t \neq \emptyset$, podemos enunciar, com prova imediata, o resultado central desta seção que é o teorema que segue.

Teorema 2.3.2 - Se f é $r-1$ vezes diferenciável em $y(x)$ e $y'(x) = f(y)(x)$, então y é r vezes diferenciável em x e

$$y^{(r)}(x) = \sum_{r(t)=r} \alpha(t) F(t)(y(x)). \quad (2.3.1)$$

2.4 - As Derivadas da Solução Aproximada $Y(x)$

Como na seção anterior, apresentaremos agora uma expressão para $Y^{(r)}(x)$.

Sejam $Y_i(x)$, $(1 \leq i \leq s)$, e $Y_{s+1}(x) = Y(x)$ definidas em (2.1.4) e (2.1.3), respectivamente. Definimos $\bar{y} : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{n(s+1)}$ e $\bar{f} : \mathbb{R}^{n(s+1)} \rightarrow \mathbb{R}^{n(s+1)}$, respectivamente, por

$$\bar{y}(x) = [Y_1(x), Y_2(x), \dots, Y_{s+1}(x)]^T,$$

$$\bar{f}([z_1, \dots, z_{s+1}]^T) = \left[\sum_{j=1}^s a_{1j} f(z_j), \dots, \sum_{j=1}^s a_{s+1,j} f(z_j) \right]^T,$$

onde f é dada em (1.1.3).

Definindo também, $P_i : \mathbb{R}^{n(s+1)} \rightarrow \mathbb{R}^n$, $(1 \leq i \leq s+1)$, por

$$P_i([z_1, z_2, \dots, z_{s+1}]^T) = z_i, \quad (2.4.1)$$

temos que $\bar{f}$ e f satisfazem à relação

$$P_i(\bar{f}(z)) = \sum_{j=1}^s a_{ij} f(P_j(z)), \quad (1 \leq i \leq s+1), \quad (2.4.2)$$

onde $z = (z_1, z_2, \dots, z_{s+1})^T$.

Usando diferenciais elementares de $\bar{f}$, com respeito a t , podemos enunciar o próximo lema, cuja demonstração baseia-se em diferenciabilidade para a função $\bar{f}$.

Lema 2.4.1 - Se f é n vezes diferenciável em cada ponto $P_1(z)$, $P_2(z), \dots, P_{s+1}(z)$, então $\bar{f}$, da relação (2.4.2), é n vezes diferenciável em z e dados $k_1, k_2, \dots, k_n$ em $\mathbb{R}^{n(s+1)}$ vale, para $(1 \leq i \leq s+1)$,

$$\begin{aligned} P_i(\bar{f}^{(n)}(z) \cdot (k_1, k_2, \dots, k_n)) \\ = \sum_{j=1}^s a_{ij} f^{(n)}(P_j(z)) \cdot (P_j(k_1), \dots, P_j(k_n)). \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

Lema 2.4.2 - Se para alguma $t \in A$, com $t \neq \emptyset$, existe a diferencial elementar de f , com respeito a t , e se $z \in \mathbb{R}^{n(s+1)}$ é tal que $P_j(z) = y_n$, $(1 \leq j \leq s)$, então a diferencial elementar de $\bar{f}$, com respeito a t , também existe e

$$P_i(F(t)(z)) = \phi_i(t) F(t)(y_n), \quad (1 \leq i \leq s+1), \quad (2.4.4)$$

Prova: Se $t = \tau$ e levando-se em conta a relação (2.4.2) temos

$$P_i(\bar{f}(z)) = \sum_j a_{ij} f(P_j(z)) = c_i f(y_n) = \phi_i(\tau) F(\tau)(y_n).$$

No caso de $t = [t_1 t_2 \dots t_m]$, levando-se em conta a definição (2.2.2), a relação (2.4.3) e que (2.4.4) vale para $t = t_k$, $(1 \leq k \leq m)$, temos

$$\begin{aligned} P_i(F(t)(z)) &= P_i \left[\bar{f}^{(m)}(z) \cdot (F(t_1)(z), \dots, F(t_m)(z)) \right] \\ &= \sum_{j=1}^s a_{ij} f^{(m)}(P_j(z)) \cdot (P_j(F(t_1)(z)), \dots, P_j(F(t_m)(z))) \\ &= \sum_{j=1}^s a_{ij} f^{(m)}(y_n) \cdot (\phi_j(t_1) F(t_1)(y_n), \dots, \phi_j(t_m) F(t_m)(y_n)) \\ &= \sum_{j=1}^s a_{ij} \phi_j(t_1) \dots \phi_j(t_m) f^{(m)}(y_n) \cdot (F(t_1)(y_n), \dots, F(t_m)(y_n)) \\ &= \phi_i(t) F(t)(y_n). \end{aligned} \quad \blacksquare$$

Teorema 2.4.3 - Se f é $r-1$ vezes diferenciável em $y(x_n)$, então

$$Y^{(r)}(x_n) = \sum_{r(t)=r} \beta(t) \phi(t) F(t)(y(x_n)), \quad (2.4.5)$$

onde $\beta(t)$ é definida na seção 1.4.

Prova: Butcher, em [Butcher,87; pag.167], demonstra que

$$\bar{y}^{(r)}(x_n) = \sum_{r(t)=r} \beta_r(t) F(t)(\bar{y}(x_n)).$$

Levando-se em conta este fato e o lema (2.4.2) temos

$$\begin{aligned} Y^{(r)}(x_n) &= Y_{s+1}^{(r)}(x_n) = P_{s+1}(\bar{y}^{(r)}(x_n)) \\ &= \sum_{r(t)=r} \beta_r(t) P_{s+1}(F(t)(\bar{y}(x_n))) \\ &= \sum_{r(t)=r} \beta(t) \phi_{s+1}(t) F(t)(y(x_n)) \\ &= \sum_{r(t)=r} \beta(t) \phi(t) F(t)(y(x_n)). \quad \blacksquare \end{aligned}$$

O próximo teorema, cuja demonstração encontra-se em [Butcher,87; pag.169], estabelece um resultado importante, o qual será usado para provar uma condição necessária e suficiente para que um método geral de Runge-Kutta, e também do tipo Rosenbrock, tenham ordem p , com $p \geq 1$.

Teorema 2.4.4 - Se A_0 é algum subconjunto finito de A e $\theta: A_0 \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função dada, então existe um espaço vetorial E de dimensão finita, uma função $g: E \rightarrow E$ com derivadas contínuas de todas as ordens, um ponto $y_n \in E$ e um funcional linear $p \in E^*$ (dual de E) tal que

$$p^* \cdot (F(t)(y_n)) = \theta(t), \quad \forall t \in A_0.$$

2.5 - As Condições de Ordem para os Métodos de Runge-Kutta

Consideramos um método geral de Runge-Kutta dado por (2.1.1)-(2.1.2) e suponhamos que f seja ao menos $p-1$ vezes diferenciável em $y(x_n)$.

Definição 2.5.1 - Sejam $y^{(r)}(x_n)$ e $Y^{(r)}(x_n)$ dadas em (2.3.1) e (2.4.5), respectivamente. Um método de Runge-Kutta é de ordem p , $p \geq 1$, se

$$y^{(r)}(x_n) = Y^{(r)}(x_n), (0 < r \leq p).$$

Levando-se em conta que a densidade de t satisfaz $\Gamma(t) = \beta(t)/\alpha(t)$ (propriedades 1.4.16), podemos estabelecer um dos resultados mais importantes deste capítulo.

Teorema 2.5.2 - Uma condição necessária e suficiente para que um método de Runge-Kutta tenha ordem p é que

$$\phi(t) = 1/\Gamma(t), \quad \forall t \in A; \quad r(t) \leq p, \quad \text{com } t \neq 0. \quad (2.5.1)$$

Prova: ($\Leftarrow$)
$$\begin{aligned} Y^{(r)}(x_n) &= \sum_{r(\bar{t})=r} \beta(\bar{t}) \phi(\bar{t}) F(\bar{t})(y(x_n)) \\ &= \sum_{r(\bar{t})=r} \alpha(\bar{t}) \Gamma(\bar{t}) \phi(\bar{t}) F(\bar{t})(y(x_n)) \\ &= \sum_{r(\bar{t})=r} \alpha(\bar{t}) F(\bar{t})(y(x_n)) \\ &= y^{(r)}(x_n). \end{aligned}$$

($\Rightarrow$) Escolhendo $f=g$ (g do teorema 2.4.4), e fazendo para cada t , com $r(t) \leq r$, $p^* \cdot F(t)(y(x_n)) = 1$ e $p^* \cdot F(\bar{t})(y(x_n)) = 0$, $\forall \bar{t}$ com $r(\bar{t}) \leq r$ e $t \neq \bar{t}$, temos:

$$p^* \cdot \sum_{r(t)=r} \beta(t) \phi(t) F(t)(y(x_n)) = p^* \cdot \sum_{r(t)=r} \alpha(t) F(t)(y(x_n)) \leftrightarrow$$

$$\sum_{r(t)=r} \beta(t) \phi(t) p^* \cdot F(t)(y(x_n)) = \sum_{r(t)=r} \alpha(t) p^* \cdot F(t)(y(x_n)) \leftrightarrow$$

$$\beta(t) \phi(t) = \alpha(t), \quad \forall t \in A; \quad r(t) \leq r, \quad (1 \leq r \leq p). \quad \text{Ou seja,}$$

$$\phi(t) = 1/\Gamma(t), \quad \forall t \in A; \quad r(t) \leq p. \quad \blacksquare$$

A tabela 2.1 ao final deste capítulo exhibe as condições acima para algumas árvores com $5 \leq r(t) \leq 6$.

2.6 - As Hipóteses Simplificadoras

Veremos, na seção seguinte, que o teorema 2.5.2, da seção anterior, nos dá condições de estabelecer um sistema nos parâmetros b_i, a_{ij} , do método com $\#\{t \in A; r(t) \leq p\}$ equações não lineares. Este sistema, em geral, torna-se de resolução trabalhosa quando necessitamos de uma alta ordem de precisão. Na presente seção apresentaremos as hipóteses simplificadoras, introduzidas por Butcher, em [Butcher, 64a], as quais facilitarão a resolução destes sistemas.

A primeira hipótese simplificadora tem a forma

$$\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{k-1} = \frac{1}{k} c_i^k, \quad (1 \leq k \leq m), \quad (1 \leq i \leq s), \quad (2.6.1)$$

a qual pode ser imposta exceto para alguns valores de i . Sua imposição faz com que fiquem redundantes, no sistema (2.5.1), as relações $\phi(t) = 1/\Gamma(t)$, nos casos em que t possuir algum vértice

não terminal, diferente da raiz, do qual partem no máximo $k-1$ vértices terminais. Para ver isto consideramos t_1 e t_2 como segue:

Estas duas árvores são aparentemente idênticas, exceto que em t_1 partem $k-1$ vértices terminais do vértice nomeado j e, em t_2 partem k vértices terminais do vértice nomeado i . Para estas duas árvores $\phi(t_1)$ e $\phi(t_2)$ têm, respectivamente, as formas

$$\phi(t_1) = \sum_{\dots, i, j, \dots} \dots a_{ij} c_j^{k-1} \dots,$$

$$\phi(t_2) = \sum_{\dots, i, j, \dots} \dots c_i^k \dots,$$

onde os pontos (...) representam fatores idênticos. Além disso, $\Gamma(t_1)$ e $\Gamma(t_2)$ têm as formas

$$\Gamma(t_1) = k(k+1) \dots, \quad e \quad \Gamma(t_2) = (k+1) \dots,$$

onde os pontos (...) também representam fatores idênticos.

Observamos que $\Gamma(t_1) = k\Gamma(t_2)$. Então, valendo (2.6.1) temos que

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \phi(t_2) &= \frac{1}{k} \sum \dots c_i^k \dots = \sum \dots \left[\sum_{j=1}^k a_{ij} c_j^{k-1} \right] \dots \\ &= \sum \dots a_{ij} c_j^{k-1} \dots = \phi(t_1). \end{aligned}$$

Assim, $\phi(t_2) = k\phi(t_1)$. Portanto, desde que (2.6.1) vale,

$$\phi(t_1) = 1/\Gamma(t_1) \leftrightarrow \phi(t_2) = 1/\Gamma(t_2).$$

A segunda hipótese simplificadora é da forma

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} a_{ij} = \frac{1}{k} b_j (1 - c_j^k), \quad (1 \leq j \leq s), \quad (1 \leq k \leq m), \quad (2.6.2)$$

a qual tem o efeito de substituir, no sistema (2.5.1), as relações $\phi(t) = 1/\Gamma(t)$ sempre que t possuir no máximo $k-1$ vértices terminais partindo da raiz e somente um vértice não terminal partindo da raiz. Para ver isto, consideramos $t = [\tau^{k-1} t_1]$, onde $t_1 = [v_1 v_2 \dots]$ e $v_i \in A$. Definindo $t_2 = [\tau^k v_1 v_2 \dots]$ temos os diagramas para t , t_1 e t_2

As equações de ordem para t , t_1 e t_2 são respectivamente

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \sum b_i c_i^{k-1} a_{ij} \dots = \frac{1}{\Gamma(t)} \\ &= \frac{1}{r([\tau^{k-1} t_1])\Gamma(\tau)\dots\Gamma(\tau)\Gamma(t_1)} = \frac{1}{(k+r(t_1))\Gamma(t_1)}, \end{aligned}$$

$$\phi(t_1) = \sum b_j \dots = \frac{1}{\Gamma(t_1)} = \frac{1}{r(t_1) \prod_i \Gamma(v_i)},$$

$$\phi(t_2) = \sum b_j c_j^k \dots = \frac{1}{\Gamma(t_2)} = \frac{1}{(k+r(t_1)) \prod_i \Gamma(v_i)}.$$

observamos que:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{1}{\Gamma(t_1)} - \frac{1}{\Gamma(t_2)} \right] &= \frac{1}{r(t_1) \prod_1 \Gamma(v_1)} - \frac{1}{(k+r(t_1)) \prod_1 \Gamma(v_1)} \\
&= \frac{k+r(t_1)-r(t_1)}{r(t_1)(k+r(t_1)) \prod_1 \Gamma(v_1)} = \frac{k}{(k+r(t_1))\Gamma(t_1)}, \text{ ou seja,} \\
\frac{1}{\Gamma(t)} &= \frac{1}{k} \left[\frac{1}{\Gamma(t_1)} - \frac{1}{\Gamma(t_2)} \right].
\end{aligned}$$

Levando-se em conta que (2.6.2) vale, temos

$$\begin{aligned}
\frac{1}{k} \left[\phi(t_1) - \phi(t_2) \right] &= \frac{1}{k} \left[\sum b_j \dots - \sum b_j c_j^k \dots \right] \\
&= \frac{1}{k} \sum b_j (1 - c_j^k) \dots = \sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} a_{1j} \dots = \phi(t).
\end{aligned}$$

Portanto, desde que $\frac{1}{k} \left[\frac{1}{\Gamma(t_1)} - \frac{1}{\Gamma(t_2)} \right] = \frac{1}{\Gamma(t)}$,

$\phi(t_1) = 1/\Gamma(t_1)$ em conjunto com $\phi(t_2) = 1/\Gamma(t_2)$ acarretam

$$\phi(t) = 1/\Gamma(t).$$

2.7 - Construção de Alguns Métodos de Runge-Kutta

Para ilustrar o uso do teorema 2.5.2 e uma aplicação das hipóteses simplificadoras, apresentaremos nesta seção a construção de métodos de Runge-Kutta do tipo explícito de ordem quatro com quatro estágios e do tipo implícito com s estágios e ordem $2s$. Antes vale a pena apresentar alguns resultados indispensáveis, no que diz respeito à ordem e ao estágio do método. No caso de

métodos explícitos, Butcher, em [Butcher,65], estabelece que, para $p \geq 5$, ordem p pode ser alcançada somente se $s > p$ e para $p \geq 7$, ordem p pode ser alcançada somente se $s > p+1$. Já em [Butcher,75], contém um resultado mais geral, o qual estabelece a não existência de métodos explícitos de Runge-Kutta com s estágios e ordem $p \geq U_n$, ($n = 0, 1, 2, \dots$), a menos que $s > p+n$, sendo que $U_0 = 5$ e $U_n = [(4U_{n-1} + 2n + 1)/3]$, onde $[.]$ denota a parte inteira. Cabe ainda mencionar que Butcher, em [Butcher,85], apresenta a não existência de métodos explícitos de ordem p , para $p \geq 8$ com $s = p+2$ estágios, e mais recentemente, em [Butcher,87; pag.167] a existência de método de Runge-Kutta de qualquer ordem.

De acordo com o citado teorema 2.5.2, lembramos que, para métodos explícitos com 4 estágios e ordem 4, devemos impor

$$\phi(t) = 1/\Gamma(t), \quad \forall t \in A; \quad r(t) \leq 4, \quad \text{com } t \neq 0.$$

Isto leva ao sistema, dado a seguir:

$$\bullet \quad b_1 + b_2 + b_3 + b_4 = 1, \quad (2.7.1a)$$

$$\diagdown \quad b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_4 c_4 = 1/2, \quad (2.7.1b)$$

$$\vee \quad b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 + b_4 c_4^2 = 1/3, \quad (2.7.1c)$$

$$\langle \quad b_3 a_{32} c_2 + b_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) = 1/6, \quad (2.7.1d)$$

$$\nabla \quad b_2 c_2^3 + b_3 c_3^3 + b_4 c_4^3 = 1/4, \quad (2.7.1e)$$

$$\curvearrowright \quad b_3 c_3 a_{32} c_2 + b_4 c_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) = 1/8, \quad (2.7.1f)$$

$$\Upsilon \quad b_3 a_{32} c_2^2 + b_4 (a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) = 1/12, \quad (2.7.1g)$$

$$\curvearrowleft \quad b_4 a_{43} a_{32} c_2 = 1/24. \quad (2.7.1h)$$

Para simplificar este sistema, vamos fazer o uso da hipótese simplificadora (2.6.2), com $k=1$. Inicialmente lembramos que é suficiente ter esta hipótese válida, para que as equações d), g) e h), em (2.7.1), sejam redundantes e possam então ser eliminadas. Vamos mostrar agora que (2.6.2), com $k=1$, também é necessária para que um método de Runge-Kutta explícito com 4 estágios tenha quarta ordem.

Lema 2.7.1 - Dado qualquer método explícito de quarta ordem com quatro estágios vale

$$\sum_{i=1}^4 b_i a_{ij} = b_j(1-c_j), \quad (1 \leq j \leq 4).$$

Prova: Definindo $d_j = \sum_{i=1}^4 b_i a_{ij} - b_j(1-c_j)$, $(1 \leq j \leq 4)$,

$$U = \begin{bmatrix} b_2 & b_3 & b_4 \\ b_2 c_2 & b_3 c_3 & b_4 c_4 \\ d_2 & d_3 & d_4 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad V = \begin{bmatrix} c_2 & c_2^2 & \sum_{j=1}^4 a_{2j} c_j - c_2^2/2 \\ c_3 & c_3^2 & \sum_{j=1}^4 a_{3j} c_j - c_3^2/2 \\ c_4 & c_4^2 & \sum_{j=1}^4 a_{4j} c_j - c_4^2/2 \end{bmatrix}$$

temos

$$UV = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/3 & 0 \\ 1/3 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{com} \quad \det \begin{bmatrix} 1/2 & 1/3 \\ 1/3 & 1/4 \end{bmatrix} \neq 0.$$

Então, pelo lema 1.3.2 segue que

$$d_j = 0, \quad (2 \leq j \leq 4), \quad \text{ou}$$

$$\sum_{j=1}^4 a_{ij} c_j - c_i^2/2 = 0, \quad (2 \leq i \leq 4).$$

A ocorrência do segundo caso acarreta $c_2=0$, o que viola a equação (2.7.1h). Portanto, $d_j=0$, $(2 \leq j \leq 4)$. Para terminar, $d_1=0$ segue de $d_1+d_2+d_3+d_4=0$, que é uma consequência imediata de (2.7.1a)-(2.7.1b) em conjunto com $c_4 = a_{41} + a_{42} + a_{43}$. ■

Assim, a hipótese simplificadora (2.6.2), com $k=1$, e o lema 2.7.1, permitem estabelecer um sistema equivalente ao (2.7.1):

$$\sum_{i=1}^4 b_i c_i^{k-1} = 1/k, \quad (1 \leq k \leq 4), \quad (2.7.2a)$$

$$b_3 c_3 a_{32} c_2 + b_4 c_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) = 1/8, \quad (2.7.2b)$$

$$b_3 a_{32} + b_4 a_{42} = b_2 (1 - c_2), \quad (2.7.2c)$$

$$b_4 a_{43} = b_3 (1 - c_3), \quad (2.7.2d)$$

$$0 = b_4 (1 - c_4), \quad (2.7.2e)$$

A solução do sistema (2.7.2) é obtida com facilidade: por e) $b_4=0$ ou $c_4=1$. Mas $b_4=0$ contraria (2.7.1h). Portanto, $c_4=1$. Arbitrando convenientemente valores para c_2 e c_3 , obtemos b_1 , b_2 , b_3 e b_4 pelo sistema linear a). Por d) obtemos a_{43} e pelo sistema b) e c) determinamos a_{32} e a_{42} , respectivamente. Por exemplo, fazendo $c_2=c_3=1/2$ obtemos o método clássico de Runge-Kutta de quarta ordem.

0				
1/2	1/2			
1/2	0	1/2		
1	0	0	1	
	1/6	1/3	1/3	1/6

Observamos que (2.6.2), com $k=1$ e $j=1$ está automaticamente satisfeita.

Métodos implícitos de ordem $2s$ podem ser construídos seguindo a metodologia apresentada a seguir.

Definição 2.7.2 - Dizemos que um método de Runge-Kutta de s estágios satisfaz:

$A(m) \leftrightarrow a_{ij}, (1 \leq i, j \leq s)$, satisfazem

$$\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{k-1} = (1/k) c_i^k, (1 \leq k \leq m), \quad (2.6.1)$$

$B(m) \leftrightarrow b_i, (1 \leq i \leq s)$, satisfazem

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} = 1/k, (1 \leq k \leq m),$$

$C(m) \leftrightarrow c_i, (1 \leq i \leq m)$, são as raízes do polinômio $P_m(2x-1)$, onde P_m é o polinômio de Legendre de grau m .

$D(m) \leftrightarrow a_{ij}, (1 \leq i, j \leq s)$, satisfazem

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} a_{ij} = (1/k) b_j (1 - c_j^k), (1 \leq k \leq m), \quad (2.6.2)$$

$E(m, n) \leftrightarrow \sum_{j=1}^s b_i c_i^{k-1} a_{ij} c_j^{l-1} = 1/(k+l) l, (1 \leq k \leq m), (1 \leq l \leq n),$

$F(A) \leftrightarrow \phi(t) = 1/\Gamma(t), \forall t \in A; r(t) \leq m.$

Lema 2.7.3 - Se $B(m+n)$ e $A(n)$ valem, então $E(m, n)$ também vale.

Prova: Multiplicando ambos os lados de (2.6.1) por $b_i c_i^{l-1}$ e somando para $1 \leq i \leq s$, com $1 \leq m, k \leq n$ temos:

$$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i^{l-1} a_{ij} c_j^{k-1} = (1/k) \sum_{i=1}^s b_i c_i^{(k+1)-1}.$$

Usando $B(m+n)$ segue que

$$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i^{l-1} a_{ij} c_j^{k-1} = (1/k)(1/k+1) \leftrightarrow E(m,n). \quad \blacksquare$$

Lema 2.7.4 - Se $b_1, b_2, \dots, b_s$ são todos não nulos, $c_1, c_2, \dots, c_s$ são distintos e $B(s+n)$ e $E(s,n)$ ambos valem, então $A(n)$ também vale.

Prova: Para cada k , $(1 \leq k \leq s)$, e para cada l , $(1 \leq l \leq n)$, temos

$$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i^{k-1} a_{ij} c_j^{l-1} = 1/(k+1)l = (1/l) \sum_{i=1}^s b_i c_i^{(k+1)-1} \leftrightarrow$$

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} \left[\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{l-1} - (1/l) c_i^l \right] = 0.$$

Esta última igualdade constitui um sistema linear homogêneo nas variáveis $\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{l-1} - (1/l) c_i^l$, $(1 \leq l \leq n)$. Levando-se em consideração que a matriz dos coeficientes é do tipo Vandermonde e que $b_i \neq 0$ e c_i são distintos, para todo i , concluímos que

$$\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{l-1} = (1/l) c_i^l \leftrightarrow A(n) \quad \blacksquare$$

Lema 2.7.5 - Se $B(m+n)$ e $D(m)$ valem, então $E(m,n)$ também vale.

Prova: Análoga a do lema 2.7.3. $\blacksquare$

Lema 2.7.6 - Se $b_i \neq 0$, $(1 \leq i \leq s)$, $c_1, c_2, \dots, c_s$ são distintos e $B(m+s)$ e $E(m,s)$ valem, então $D(m)$ também vale.

Prova: Análoga a do lema 2.7.4. $\blacksquare$

Lema 2.7.7 - Se ψ é um polinômio de grau no máximo $s-1$, então uma condição necessária e suficiente para $B(s)$ é que

$$\sum_{i=1}^s b_i \psi(c_i) = \int_0^1 \psi(x) dx.$$

Prova: Se ψ tem grau não superior a $s-1$, vale que

$$\psi(x) = \sum_{j=1}^s \alpha_j x^{j-1}. \text{ Então,}$$

$$\int_0^1 \psi(x) dx = \sum_{j=1}^s \alpha_j \int_0^1 x^{j-1} dx = \sum_{j=1}^s \alpha_j \frac{1}{j} = \sum_{j=1}^s \alpha_j \left[\sum_{i=1}^s b_i c_i^{j-1} \right]$$

$$= \sum_{i=1}^s b_i \left[\sum_{j=1}^s \alpha_j c_i^{j-1} \right] = \sum_{i=1}^s b_i \psi(c_i).$$

Por outro lado, se $\psi(x) = x^{k-1}$, $k \leq s$, segue que

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} = \int_0^1 x^{k-1} dx = 1/k. \quad \blacksquare$$

Teorema 2.7.8 - Seja um método de Runge-Kutta de s estágios com $b_1, b_2, \dots, b_s$ não todos nulos e $c_1, c_2, \dots, c_s$ todos distintos. Então valem as seguintes implicações:

$$B(s) \text{ e } C(s) \leftrightarrow B(2s), \quad (2.7.3)$$

$$\text{Se vale } B(2s) \rightarrow A(s) \leftrightarrow E(s,s) \text{ e } D(s) \leftrightarrow E(s,s), \quad (2.7.4)$$

$$F(2s) \rightarrow B(2s) \text{ e } E(s,s), \quad (2.7.5)$$

$$B(2s), A(s) \text{ e } D(s) \rightarrow F(2s). \quad (2.7.6)$$

Prova: As equivalências (2.7.4) seguem, respectivamente, dos lemas 2.7.3 e 2.7.4 e dos lemas 2.7.5, 2.7.6. A implicação (2.7.5) segue do fato que $B(2s)$ e $E(s,s)$ são simples condições de ordem. A

implicação (2.7.6) segue observando que $A(s)$ e $D(s)$ substituem todas as árvores exceto, aquelas que $B(2s)$ abrange. Quanto às relações (2.7.3), notamos que $B(2s) \Rightarrow B(s)$ é trivial. Para provar que $B(2s) \rightarrow C(s)$ observamos que, pelo lema 2.7.7, $B(2s)$ é equivalente a

$$\sum_{i=1}^s b_i \psi(c_i) = \int_0^1 \psi(x) dx,$$

para todo polinômio ψ de grau no máximo $2s-1$. Agora se $\psi = \varphi \cdot q$, onde q é de grau no máximo $s-1$ e $\varphi(x) = (x-c_1)(x-c_2)\dots(x-c_s)$, temos

$$0 = \sum b_i \varphi(c_i) q(c_i) = \int_0^1 \varphi(x) q(x) dx.$$

Assim, φ é ortogonal, com respeito a $w(x)=1$ e sobre $[0,1]$, a todos os polinômios de grau menor. Logo, φ é múltiplo de $P_s(2x-1)$. Reciprocamente, se $B(s)$ e $C(s)$ ambos valem, seja ψ um polinômio qualquer de grau no máximo $2s-1$. Se $\psi = \varphi \cdot q + r$, então

$$\int_0^1 \psi(x) dx = \int_0^1 \varphi(x) q(x) dx + \int_0^1 r(x) dx.$$

Desde que ψ concorda com $C(s)$ e r é de grau no máximo $s-1$ (portanto menor que $2s-1$), segue que

$$\int_0^1 \psi(x) dx = \sum b_i \varphi(c_i) q(c_i) + \sum b_i r(c_i) = \sum b_i \psi(c_i). \quad \blacksquare$$

Como consequência imediata do teorema 2.7.8 segue o:

Corolário 2.7.9 - Nas mesmas hipóteses do teorema 2.7.8 vale

$$A(s), B(s) \text{ e } C(s) \leftrightarrow F(2s).$$

A importância do corolário 2.7.9 está no fato de que ele expressa a existência e unicidade, para cada inteiro s , de um método implícito de Runge-Kutta de ordem exatamente $2s$. Para encontrar tal método, fixamos $c_1, c_2, \dots, c_s$ através de $C(s)$, resolvemos o sistema linear $B(s)$ para achar $b_1, b_2, \dots, b_s$ e a partir do sistema linear $A(s)$ encontramos $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{ss}$. Por exemplo, para $s=3$ temos o seguinte método apresentado em [Dekker-Verwer, 84; pag.64]:

$\frac{5-\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{80-24\sqrt{15}}{360}$	$\frac{50-12\sqrt{15}}{360}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{50+15\sqrt{15}}{360}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{50-15\sqrt{15}}{360}$
$\frac{5+\sqrt{15}}{10}$	$\frac{50+12\sqrt{15}}{360}$	$\frac{80+24\sqrt{15}}{360}$	$\frac{5}{36}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{5}{18}$

CONCLUSÃO: - O intuito deste capítulo foi compreender o ambiente dos métodos de Runge-Kutta, com base na teoria dos grafos e adquirir conhecimentos para o estudo dos métodos do tipo Rosenbrock. Realçamos a importância das hipóteses simplificadoras, porque de fato, elas facilitam a compreensão de muitos resultados e abrem caminhos para a obtenção de soluções das simples condições de ordem.

Tabela 2.1: Condições de ordem para algumas árvores

t	$\phi(t) = 1/\Gamma(t)$	
	$[\tau^4]$	$\sum b_i c_i^4 = 1/5$
	$[\tau^2[\tau]]$	$\sum b_i c_i^2 a_{ij} c_j = 1/10$
	$[_2\tau^3]_2$	$\sum b_i a_{ij} c_j^3 = 1/20$
	$[_2\tau[\tau]]_2$	$\sum b_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k = 1/40$
	$[\tau^3[\tau]]$	$\sum b_i c_i^3 a_{ij} c_j = 1/12$
	$[\tau[\tau[\tau]]]$	$\sum b_i c_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k = 1/48$
	$[_2\tau[_2\tau]_2]_2$	$\sum b_i a_{ij} c_j a_{jk} a_{kl} c_l = 1/180$

CAPÍTULO III

ANÁLISE DOS MÉTODOS DO TIPO ROSENBROCK

3.1 - Introdução

Como aparece na literatura, por exemplo [Butcher,87;pag.209], métodos implícitos A-estáveis de Runge-Kutta são apropriados para problemas "stiff", ao passo que os métodos de Runge-Kutta na forma explícita não o são. Por outro lado, os métodos implícitos de Runge-Kutta requerem, a cada passo, a resolução de um sistema de equações implícitas não lineares para computar $Y_1, Y_2, \dots, Y_s$. Já nos métodos explícitos de Runge-Kutta os vetores Y_i , ($1 \leq i \leq s$), podem ser computados a partir de $Y_1, Y_2, \dots, Y_{i-1}$. Com base nestas observações Rosenbrock, em 1963, propôs uma conciliação entre métodos implícitos e explícitos de Runge-Kutta, no sentido de obter uma classe de métodos A-estáveis e desacoplar, a cada passo, o sistema de equações implícitas não lineares em sistemas de equações lineares.

A idéia de Rosenbrock, proposta em [Rosenbrock,63], foi inserir na fórmula de integração dos métodos explícitos de Runge-Kutta, o fator $hf'(y_n)\gamma_{ii}K_i$, com $\gamma_{ii} \neq 0$, onde f' é a matriz jacobiana da função f , dada em (1.1.3). Mais tarde Wanner, em [Wanner,73], generalizou os métodos de Rosenbrock, também chamados métodos de Rosenbrock-Wanner, abreviadamente ROW-métodos, por introdução na fórmula de integração explícita do fator $hf'(y_n) \sum_{j=1}^s \gamma_{ij}K_j$.

No presente capítulo, com base em [Butcher,87], [Wanner,80], [Dekker-Verwer,84; cap.9], [Gottwald-Wanner,81], [Kaps-Wanner,81] [Hairer-Wanner,90], [Verwer et al,83] e [Wanner,80], analisaremos os ROW-métodos ao estilo de J.C. Butcher.

3.2 - A Estrutura Geral dos ROW-métodos

Seja y_n uma aproximação para $y(x_n)$, onde $y(x)$ satisfaz o sistema de equações (1.1.3). Dado um tamanho de passo h , $h>0$, um ROW-método de s estágios tem a forma apresentada em [Kaps-Wanner, 81]

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i K_i, \quad (n \geq 0), \quad (3.2.1)$$

$$E = \left[I - \gamma h f'(y_n) \right]^{-1}, \quad (3.2.2)$$

$$K_i = E \left[f(y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j) + \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} K_j \right], \quad (1 \leq i \leq s), \quad (3.2.3)$$

onde os somatórios em (3.2.3) devem ser desprezados quando $i=1$. As constantes reais a_{ij} , b_i , c_{ij} e γ , distinguem diferentes processos deste tipo. A fórmula (3.2.2) requer o cálculo da matriz jacobiana de f e a fórmula (3.2.3) consiste em uma seqüência, quando (1.1.3) for um sistema, de s sistemas lineares, os quais permitem o cálculo dos vetores K_i . Observamos desde já, que todas as equações que aparecem em (3.2.3), têm a mesma matriz E e portanto necessitamos de apenas uma decomposição LU a cada passo de integração.

Na definição de um ROW-método, colocando

$$g_i = h \left[K_i - \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} K_j \right], \quad \gamma = \gamma_{11}, \quad (1 \leq i \leq s),$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} \gamma_{ik} (\delta_{kj} - c_{kj}) / \gamma, \quad c_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik} (\delta_{kj} - c_{kj}),$$

$$b_j = \sum_{k=1}^s \mu_k (\delta_{kj} - c_{kj}), \quad (1 \leq j \leq s), \quad \delta_{ij} \text{ o símbolo de Kronecker,}$$

obtemos, como aparece na literatura por exemplo [Hairer-Wanner,90] a formulação equivalente

$$u_i = y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} g_j, \quad (3.2.4)$$

$$g_i = hf(u_i) + hf'(y_n) \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} g_j, \quad (1 \leq i \leq s), \quad (3.2.5)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s \mu_i g_i, \quad (n \geq 0). \quad (3.2.6)$$

Observamos, aqui, que as fórmulas (3.2.1)-(3.2.2)-(3.2.3) têm, para nós, apenas interesse prático ao passo que as fórmulas (3.2.4)-(3.2.5)-(3.2.6) têm interesse teórico.

3.3 - Definições Preliminares Baseadas em Árvores

Com o objetivo de introduzir as condições de ordem para os ROW-métodos, nesta seção apresentaremos algumas definições envolvendo o conceito de árvore, as quais são baseadas em [Butcher,87; cap.1] e [Hairer,87].

Definição 3.3.1 - Para cada inteiro i , ($1 \leq i \leq s$), e para cada $t \in A$ definimos

$$\psi_i(\tau) = 1, \\ \psi_i(t) = \begin{cases} \sum_{j_1, \dots, j_m=1}^{i-1} \alpha_{ij_1} \dots \alpha_{ij_m} \psi_{j_1}(t_1) \dots \psi_{j_m}(t_m); & t=[t_1 \dots t_m], m \geq 2 \\ \sum_{j=1}^i \beta'_{ij} \psi_j(t_1); & t=[t_1], \end{cases} \quad (3.3.1)$$

onde α_{ij} e β'_{ij} são fatores associados aos arcos da árvore t .

Definição 3.3.2 - Um vértice x de uma árvore t é dito simples-ramificado se desse vértice parte no máximo um arco. Caso desse vértice parta mais que um arco, ele será chamado de múltiplo-ramificado.

Exemplo 3.3.3 - Para a árvore

os vértices i, k, l e m são simples-ramificados e o vértice j é múltiplo-ramificado.

Analogamente aos polinômios $\phi(t)$, definidos para os métodos de Runge-Kutta, podemos obter $\psi_1(t)$ diretamente do diagrama da árvore: à raiz r associamos o nome i e para os demais vértices associamos $j, k, l, \dots$. Para cada arco escrevemos, no sentido do arco orientado, o fator β'_{xy} , caso o vértice x seja simples-ramificado, ou o fator α_{xy} , caso o vértice x seja múltiplo-ramificado. Então, $\psi_1(t)$ será a soma em $j, k, l, \dots$, dos produtos dos fatores $\alpha_{xy}\beta'_{xz}$ associados a cada arco da árvore.

Exemplo 3.3.4 - Consideramos a árvore do exemplo anterior. O polinômio $\psi_1(t)$, dado em (3.3.1), tem a forma

$$\psi_1(t) = \sum_{j=1}^1 \beta'_{1j} \left[\sum_{l=1}^{j-1} \alpha_{jl} \left[\sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{jk} \left[\sum_{m=1}^k \beta'_{km} \right] \right] \right].$$

Para simplificar, como nos métodos de Runge-Kutta, podemos expressar $\psi_1(t)$ numa forma mais compacta, associando aos arcos terminais de t os fatores

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \quad \text{ou} \quad \beta'_i = \sum_{j=1}^i \beta'_{ij}. \quad (3.3.2)$$

Assim, $\psi_1(t)$ do exemplo anterior torna-se

$$\psi_1(t) = \sum_{j=1}^1 \beta'_{1j} \alpha_j \left[\sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{jk} \beta'_k \right] = \sum \beta'_{1j} \alpha_j \alpha_{jk} \beta'_k.$$

Observamos que, nesta última forma, os nomes dos vértices terminais são irrelevantes. Mais exemplos podem ser encontrados na tabela 3.1 ao final deste capítulo.

Definição 3.3.5 - Consideramos o conjunto AN das árvores nomeadas. Se $t \in AN$ e i , ($0 \leq i \leq r(t)$), é um inteiro fixado, denotaremos por $S_i(t) = s$ a sub-árvore formada pelos primeiros i índices de t . Diagramaticamente, podemos distinguir s , no diagrama de t , representando os vértices por $\odot$ e os arcos por $\circ \text{---} \circ$.

Exemplo 3.3.6 - Para a árvore

Definição 3.3.7 - Sejam $t \in AN$ e i , ($0 \leq i \leq r(t)$), um inteiro fixado. Denotaremos por $d_i(t)$ o conjunto de árvores, as quais são obtidas do diagrama de t por simples remoção das sub-árvores formadas pelos primeiros i índices de t .

Exemplo 3.3.8 - Consideramos t do exemplo 3.3.6. Então,

$$i = 0: d_0(t) = \{t\},$$

$$i = 1: d_1(t) = \{\tau, \tau, [\tau]\},$$

$$i = 2: d_2(t) = \{\tau, \tau, \tau\},$$

$$i = 3: d_3(t) = \{\tau, \tau\},$$

$$i = 4: d_4(t) = \{\tau\},$$

$$i = 5: d_5(t) = \emptyset.$$

Seja $t \in AN$. Por simplicidade, para efeito de cálculo de derivadas, associaremos as diferenciais elementares de f , com respeito a $t \in AN$, a própria árvore t . Como um exemplo, consideramos calcular a segunda derivada de $F([\tau])(y)$. Então,

$$\begin{aligned} (F([\tau])(y))^{(1)} &= f^{(2)}(y) \cdot (f(y), f(y)) \\ &\quad + f^{(1)}(y) \cdot (f^{(1)}(y) \cdot (f(y))) \\ &= F([\tau\tau])(y) + F([[\tau]])(y). \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

$$\begin{aligned} (F([\tau])(y))^{(2)} &= f^{(3)}(y) \cdot (f(y), f(y), f(y)) \\ &\quad + f^{(2)}(y) \cdot (f^{(1)}(y) \cdot (f(y)), f(y)) \\ &\quad + f^{(2)}(y) \cdot (f(y), f^{(1)}(y) \cdot (f(y))) \\ &\quad + f^{(2)}(y) \cdot (f(y), f^{(1)}(y) \cdot (f(y))) \\ &\quad + f^{(1)}(y) \cdot (f^{(2)}(y) \cdot (f(y), f(y))) \\ &\quad + f^{(1)}(y) \cdot (f^{(1)}(y) \cdot (f^{(1)}(y) \cdot (f(y)))) \\ &= F([\tau\tau\tau])(y) + F([[\tau]\tau])(y) \\ &\quad + F([\tau \tau])(y) + F([\tau \tau])(y) \\ &\quad + F([\tau\tau])(y) + F([[[\tau]]])(y). \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

Pela associação feita anteriormente, podemos representar (3.3.3) e (3.3.4) pelos seguintes diagramas, os quais chamaremos de diagrama para as derivadas de $F(t)(y)$:

3.4 - As Séries de Butcher

Consideramos um ROW-método qualquer e suponhamos que f seja suficientemente diferenciável. Para estudarmos as condições de ordem para os ROW-métodos, devemos expressar em séries de potências de h as quantidades u_1 , g_1 e y_{n+1} definidas em (3.2.4), (3.2.5) e (3.2.6), respectivamente. Com o fim de explicitar estas séries, utilizaremos o conceito de séries de Butcher, ou simplesmente B-séries, introduzidas por Hairer e Wanner, em [Hairer-Wanner,74], assim nomeadas em agradecimento a J.C. Butcher pelo seu elegante estilo em estudar E.D.O.

Definição 3.4.1 - Seja $a : A \rightarrow \mathbb{R}$ uma função arbitrária. Uma **B-série** com coeficientes $a(t)$ é definida por

$$B(a, y) = \sum_{t \in AN} \frac{h^{r(t)}}{r(t)!} a(t) F(t)(y), \quad (3.4.1)$$

onde $F(t)(y)$ são as diferenciais elementares de f , com respeito a t , definidas em (2.2.1) e AN o conjunto das árvores nomeadas.

Exemplo 3.4.2 - Uma aproximação numérica y_{n+1} , dada por (3.2.1), é uma B-série com coeficientes $a(\emptyset) = 1$ e $a(t) = 0$, para $t \neq \emptyset$.

Exemplo 3.4.3 - A solução verdadeira $y(x_n+h)$, da equação (1.1.3), é uma B-série com coeficientes $a(t) = 1$, $\forall t \in A$.

Exemplo 3.4.4 - $hf(y)$ é uma B-série com coeficientes $a(\tau) = 1$ e $a(t) = 0$, para $t \neq \tau$.

Observação 3.4.5 - A convergência da B-série está assegurada se a equação diferencial é analítica e $a(t)$ é limitada por alguma constante $K \neq 0$, como observam Hairer e Wanner em [Hairer-Wanner, 74]. No entanto, estamos apenas interessados em truncamentos finitos destas séries.

Definição 3.4.6 - Sejam $a : A \rightarrow \mathbb{R}$ e $b : A \rightarrow \mathbb{R}$ duas seqüências de coeficientes com $a(\emptyset) = 1$. Então, dada uma $t \in A$, com $r(t)$ vértices, definimos o "produto" $(a*b) : A \rightarrow \mathbb{R}$ por

$$(a*b)(t) = \frac{1}{\alpha(t)} \sum_{u \in A_{r(t)}} \left[\sum_{i=0}^{r(t)} \binom{r(t)}{i} b(S_i(u)) \prod_{v \in d_i(u)} a(v) \right], \quad (3.4.2)$$

onde $A_{r(t)}$ é definido na seção 1.4, $S_i(u)$ e $d_i(u)$ correspondem às definições 3.3.5 e 3.3.7, respectivamente e $\alpha(t) = \#\{u \in A_s; |u|=t\}$.

Exemplo 3.4.7. - Consideramos $t =$.

Então, $r(t) = 4$ e

$$A_{r(t)} = \left\{ \begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \text{Diagram 2} \\ \text{Diagram 3} \end{array} \right\}.$$

Assim, temos:

$i = 0:$; $S_0(u) = \emptyset$, $d_0(u) = \{t\}$,

$i = 1:$; $S_1(u) = \tau$, $d_1(u) = \{\tau, [\tau]\}$,

$i = 2:$; $S_2(u) = [\tau]$, $d_2(u) = \{\tau, \tau\}$,

$i = 3:$; $S_3(u) = [\tau\tau]$, $d_3(u) = \{\tau\}$,

$i = 4:$; $S_4(u) = u$, $d_4(u) = \emptyset$.

$i = 0:$; $S_0(u) = \emptyset$, $d_0(u) = \{t\}$,

$i = 1:$; $S_1(u) = \tau$, $d_1(u) = \{\tau, [\tau]\}$,

$i = 2:$; $S_2(u) = [\tau]$, $d_2(u) = \{\tau, \tau\}$,

$i = 3:$; $S_3(u) = [{}_2\tau]_2$, $d_3(u) = \{\tau\}$,

$i = 4:$; $S_4(u) = u$, $d_4(u) = \emptyset$.

$i = 0:$; $S_0(u) = \emptyset$, $d_0(u) = \{t\}$,

$i = 1:$; $S_1(u) = \tau$, $d_1(u) = \{\tau, [\tau]\}$,

$i = 2:$; $S_2(u) = [\tau]$, $d_2(u) = \{[\tau]\}$,

$i = 3:$; $S_3(u) = [\tau\tau]$, $d_3(u) = \{\tau\}$,

$i = 4:$; $S_4(u) = u$, $d_4(u) = \emptyset$.

Portanto,

$$\begin{aligned}
 (a*b)(t) = & \frac{1}{3} \left\{ 3 \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix} b(\emptyset) a(u) + 3 \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} b(\tau) a(\tau) a([\tau]) \right. \\
 & + \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} b([\tau]) [2a^2(\tau) + a([\tau])] \\
 & \left. + \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix} a(\tau) [2b([\tau\tau]) + b([\tau\tau]_2)] + 3 \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} b(u) a(\emptyset) \right\}.
 \end{aligned}$$

Notamos que o fator $\alpha(t)$, que aparece em (3.4.2), fica claro neste exemplo.

Observando os diagramas das derivadas chegamos as árvores u com $r(u)=4$ tais que, para $0 \leq i \leq 4$,

$$S_1(u) = s, \quad s \in \left\{ \emptyset, \tau, [\tau], [\tau\tau], [{}_2\tau]_2, [\tau [\tau]] \right\},$$

e os elementos de $d_1(u)$ são obtidos naturalmente pelos diagramas. Logo, (3.4.4), em $h = 0$, torna-se

$$\begin{aligned} (B(b,g))^{(4)} = & \frac{1}{3} \left\{ 3 \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \end{bmatrix} b(\emptyset)a(u) + 3 \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix} b(\tau)a(\tau)a([\tau]) \right. \\ & + \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix} b([\tau]) [2a^2(\tau) + a([\tau])] \\ & + \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} a(\tau) [2b([\tau\tau]) + b([{}_2\tau]_2)] \\ & \left. + 3 \begin{bmatrix} 4 \\ 4 \end{bmatrix} b(u)a(\emptyset) \right\} F(t)(y), \end{aligned}$$

concordando com (3.4.2), para $t = [\tau [\tau]]$ (ver exemplo 3.4.7).

O mesmo procedimento pode ser feito para qualquer árvore $t \in A$. ■

Corolário 3.4.9 - Seja $B(a,y)$ uma B-série com coeficientes $a(t)$ com $a(\emptyset) = 1$. Então,

$$hf(B(a,y)) = B(a',y),$$

com $a'(\emptyset) = 0$, $a'(\tau) = 1$ e $a'([t_1 \dots t_m]) = r(t)a(t_1) \dots a(t_m)$.

Prova: Vimos no exemplo 3.4.4 que $hf(y)$ é uma B-série com $b(\tau) = 1$ e $b(t) = 0$, para $t \neq \tau$. Então, pelo teorema 3.4.8, $hf(B(a,y)) = B((a*b),y)$, com coeficientes dados por (3.4.2). Logo,

$$a'(\emptyset) = (a*b)(\emptyset) = b(\emptyset)a(\emptyset) = b(\emptyset) = 0,$$

$$a'(\tau) = (a*b)(\tau) = b(\emptyset)a(\tau) + b(\tau)a(\emptyset) = b(\tau)a(\emptyset) = 1.$$

Para concluir, fazendo em (3.4.2) $i = 1$, segue que

$$\begin{aligned} a'(t) &= (a*b)(t) = r(t)b(S_1(u)) \prod_{v \in d_1(u)} a(v) \\ &= r(t)a(t_1) \dots a(t_m). \end{aligned}$$

■

Teorema 3.4.10 - As funções $u_1(h)$, $g_1(h)$ e $y_{n+1}(h)$, definidas em (3.2.4), (3.2.5) e (3.2.6), são B-séries cujos coeficientes são definidos por

$$u_1(\emptyset) = 1, u_1(t) = \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{1j} g_j(t), (t \neq \emptyset), \quad (3.4.5)$$

$$g_1(\emptyset) = 0, g_1(\tau) = 1, g_1(t) = r(t)u_1(t_1) \dots u_1(t_m) + \begin{cases} 0; t=[t_1 \dots t_m], m \geq 2 \\ r(t) \sum_{j=1}^i \gamma_{1j} g_j(t_1); t=[t_1] \end{cases} \quad (3.4.6)$$

$$y_{n+1}(\emptyset) = 1, y_{n+1}(t) = \sum_{i=1}^B \mu_i g_i(t). \quad (3.4.7)$$

Prova: A expressão (3.4.5) segue, após cálculos algébricos exaustivos, diretamente de (3.2.4) com o auxílio do corolário (3.4.9). Pelo mesmo corolário, $hf(u_1)$ é uma B-série com coeficientes $u'_1([t_1 \dots t_m]) = r(t)u_1(t_1) \dots u_1(t_m)$. Isto nos dá a primeira parte de (3.4.6). Para o segundo termo, usando o fato de que $f'(y_n) \cdot (F(t)(y_n)) = F([t])(y_n)$, obtemos

$$hf'(y_n) \cdot (g_j(h)) = \sum_{\substack{t \in AN \\ t=[t_1]}} r(t) \frac{h^{r(t)}}{r(t)!} g_j(t_1) F(t)(y_n).$$

Assim,

$$\begin{aligned} hf'(y_n) \cdot \left[\sum_{j=1}^i \gamma_{1j} g_j(h) \right] &= \sum_{j=1}^i \gamma_{1j} hf'(y_n) \cdot (g_j(h)) \\ &= \sum_{\substack{t \in AN \\ t=[t_1]}} \frac{h^{r(t)}}{r(t)!} \left[r(t) \sum_{j=1}^i \gamma_{1j} g_j(t_1) \right] F(t)(y_n). \end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= \sum_{i=1}^B \mu_i g_i(h) = \sum_{i=1}^B \mu_i \left[B(u'_1, y_n) + B(g_1, y_n) \right] \\ &= \sum_{t \in AN} \frac{h^{r(t)}}{r(t)!} \left[\sum_{i=1}^B \mu_i g_i(t) \right] F(t)(y_n). \quad \blacksquare \end{aligned}$$

3.5 - As Condições de Ordem

Consideramos um ROW-método dado por (3.2.4)-(3.2.5)-(3.2.6) e suponhamos que f seja $p-1$ vezes diferenciável em $y(x_n)$. A seguir, baseando-nos em [Hairer-Wanner,90], [Verwer et al,83] e [Kaps-Wanner,81], vamos estabelecer um dos resultados centrais deste capítulo, que é o teorema 3.5.3 abaixo. Para simplificar as fórmulas (3.4.5), (3.4.6) e (3.4.7) vamos colocar

$$\alpha_{ij} = 0 \text{ para } j \geq i, \quad \gamma_{ij} = 0 \text{ para } j > i \text{ e } \beta'_{ij} = \alpha_{ij} + \gamma_{ij}. \quad (3.5.1)$$

Definição 3.5.1 - Seja $y(x)$ a solução verdadeira de (1.1.3). Um ROW-método é de ordem p se

$$y(x_n+h) - Y(x_{n+1}) = O(h^{p+1}),$$

onde, como nos métodos de Runge-Kutta, $Y(x)$ é definida por

$$Y(x) = y(x_n) + (x-x_n) \sum_{i=1}^s \mu_i g_i.$$

Lema 3.5.2 - Para cada $t \in AN$, com $t \neq \emptyset$, os coeficientes de y_{n+1} , dados em (3.4.7), podem ser escritos como

$$y_{n+1}(t) = \Gamma(t) \sum_{i=1}^s \mu_i \psi_i(t),$$

onde $\Gamma(t)$ é a densidade de t e $\psi_i(t)$ é definido em (3.3.1).

Prova: Basta substituírmos sucessivamente (3.4.5) e (3.4.6) em (3.4.7) e levar em conta que $\Gamma(t) = r(t)\Gamma(t_1)\dots\Gamma(t_m)$. ■

Teorema 3.5.3 - Uma condição necessária e suficiente para que um ROW-método tenha ordem p é que

$$\sum_{i=1}^s \mu_i \psi_i(t) = 1/\Gamma(t), \quad \forall t \in A; \quad r(t) \leq p, \text{ com } t \neq \emptyset. \quad (3.5.2)$$

Prova: Análoga a do teorema 2.5.2, lembrando que $y(x_n+h)$ e y_{n+1}

são B-séries com coeficientes dados pelo exemplo 3.4.3 e o lema 3.5.2, respectivamente. ■

As condições de ordem (3.5.2) são inteiramente análogas às condições de ordem para os métodos de Runge-Kutta e elas correspondem a um sistema de equações não lineares nos parâmetros do método. Com a introdução de (3.5.1) podemos, de agora em diante, manipular os polinômios $\psi_i(t)$, definidos em (3.3.1), com índices variando de 1 até s.

Ainda para simplificar (3.5.2), vamos colocar

$$\beta'_{ii} = \gamma_{ii} = \gamma, \quad \forall i$$

$$\beta_{ij} = \begin{cases} \beta'_{ij} & ; i > j \\ 0 & ; i \leq j \end{cases}, \quad \beta_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij},$$

e usar dois procedimentos:

- Primeiramente consideramos as hipóteses simplificadoras para os ROW-métodos, em analogia a (2.6.1), com $k=2$, e (2.6.2), com $k=1$, as quais são dadas por

$$\sum_{j=1}^s \alpha_{ij} \beta'_{ij} = \alpha_i^2/2 \quad \text{ou} \quad \sum_{j=1}^s \alpha_{ij} \beta_{ij} = \alpha_i \left(\frac{1}{2} \alpha_i - \gamma \right), \quad (2 \leq i \leq s), \quad (3.5.3)$$

$$\sum_{i=1}^s \mu_i \beta'_{ij} = \mu_j (1 - \alpha_j) \quad \text{ou} \quad \sum_{i=1}^s \mu_i \beta_{ij} = \mu_j (1 - \alpha_j - \gamma), \quad (1 \leq j \leq s). \quad (3.5.4)$$

- Em segundo lugar transpomos todos os termos que contém o parâmetro γ para o lado direito de (3.5.2). Isto nos dá um polinômio em γ e o número de termos em $\psi_i(t)$ é consideravelmente reduzido. Obtemos assim as condições de ordem simplificadas.

Exemplo 3.5.4 - Consideramos $t = \diagup$, com $\Gamma(t)=2$. Então,

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^s \mu_i \beta'_i &= \mu_1 \beta'_{11} + \mu_2 (\beta'_{21} + \beta'_{22}) + \dots + \mu_s (\beta'_{s1} + \dots + \beta'_{ss}) = \\ &= \gamma \sum_{i=1}^s \mu_i + \sum_{i=1}^s \mu_i \beta_i.\end{aligned}$$

Logo, $\sum_{i=1}^s \mu_i \beta'_i = \frac{1}{2} \Leftrightarrow \sum_{i=1}^s \mu_i \beta_i = \frac{1}{2} - \gamma.$

Exemplo 3.5.5 - Consideramos $t = \diagdown$, com $\Gamma(t)=6$. Então,

$$\begin{aligned}\sum_{i,j=1}^s \mu_i \beta'_{ij} \beta'_j &= \mu_1 \left[\sum_{j=1}^s \beta'_{1j} \beta'_j \right] + \mu_2 \left[\sum_{j=1}^s \beta'_{2j} \beta'_j \right] + \dots + \mu_s \left[\sum_{j=1}^s \beta'_{sj} \beta'_j \right] \\ &= \mu_1 \left[\gamma^2 + \sum_{j=1}^s \beta_{1j} \beta_j \right] + \mu_2 \left[\gamma^2 + 2\gamma \beta_2 + \sum_{j=1}^s \beta_{2j} \beta_j \right] \\ &\quad + \mu_s \left[\gamma^2 + 2\gamma \beta_s + \sum_{j=1}^s \beta_{sj} \beta_j \right] \\ &= \gamma^2 \sum_{i=1}^s \mu_i + 2\gamma \sum_{i=1}^s \mu_i \beta_i + \sum_{i,j=1}^s \mu_i \beta_{ij} \beta_j.\end{aligned}$$

Como $\sum_{i=1}^s \mu_i = 1$ e $\sum_{i=1}^s \mu_i \beta_i = \frac{1}{2} - \gamma$ (exemplo anterior), segue que

$$\sum_{i,j=1}^s \mu_i \beta'_{ij} \beta'_j = \frac{1}{6} \Leftrightarrow \sum_{i,j=1}^s \mu_i \beta_{ij} \beta_j = \frac{1}{6} - \gamma + \gamma^2.$$

Quando uma árvore t tem um número elevado de ramificações, o procedimento descrito nos exemplos 3.5.4 e 3.5.5 para obter a correspondente condição de ordem simplificada, é inviável. Tendo em vista esta dificuldade, podemos obter qualquer condição de ordem simplificada utilizando a seguinte regra,

introduzida por Kaps e Wanner em [Kaps-Wanner,81]:

$$\sum_{i=1}^s \mu_i \psi_i(t) = \sum_{j \geq 0} (-\gamma)^j \sum_{u \in V(t,j)} N(t,u) / \Gamma(u), \quad (3.5.5)$$

onde $\psi_i(t)$ são, agora, polinômios envolvendo α_{ij} e β_{ij} e, dado um inteiro j , $V(t,j)$ e $N(t,u)$ são definidos por:

- $V(t,j) = \left\{ u \in A; \begin{array}{l} u \text{ é obtida de } t \text{ por simples remoção de } j \\ \text{vértices simples-ramificados não terminais} \end{array} \right\}$. Caso u possua um número de vértices simples-ramificados, não terminais, inferior a j então $V(t,j) = \emptyset$.

- $N(t,u)$ representa o número de maneiras de obter u , a partir de t , por simples remoção de j vértices simples-ramificados.

Exemplo 3.5.6 - Consideramos $t = [{}_3\tau[\tau]]_3$, cujo diagrama tem a forma

Os vértices simples-ramificados, não terminais, são i, j e l . Então,

$$j = 0: V(t,j) = \{t\},$$

$$N(t,u) = 1 \text{ e } \Gamma(u) = 240,$$

$$j = 1: V(t,j) = \left\{ \begin{array}{c} \text{Diagrama 1} \\ \text{Diagrama 2} \end{array} \right\} = \{u_1, u_2\},$$

$$N(t,u_1) = 2 \text{ e } \Gamma(u_1) = 40$$

$$N(t,u_2) = 1 \text{ e } \Gamma(u_2) = 60$$

$$j = 2: V(t, j) = \left\{ \begin{array}{c} \cdot \\ \diagup \quad \diagdown \\ \cdot \end{array} , \begin{array}{c} \cdot \\ \diagdown \quad \diagup \\ \cdot \end{array} \right\} = \{u_1, u_2\},$$

$$N(t, u_1) = 2 \text{ e } \Gamma(u_1) = 12$$

$$N(t, u_2) = 1 \text{ e } \Gamma(u_2) = 8$$

$$j = 3: V(t, 3) = \left\{ \begin{array}{c} \cdot \\ \diagup \quad \cdot \\ \cdot \end{array} \right\},$$

$$N(t, u) = 1 \text{ e } \Gamma(t) = 3.$$

Assim, usando (3.5.5), a correspondente condição de ordem simplificada é

$$\sum_{i,j,k,l=1}^8 \mu_i \beta_{ij} \beta_{jk} \alpha_k \alpha_{kl} \beta_l = \frac{1}{240} - \frac{\gamma}{15} + \frac{7\gamma^2}{24} - \frac{\gamma^3}{3}.$$

A tabela 3.2, ao final deste capítulo, exibe uma variedade de exemplos.

CONCLUSÃO: - Neste capítulo caracterizamos os ROW-métodos e apresentamos os pré-requisitos necessários para a compreensão da parte prática, que vem nos próximos capítulos. É interessante salientar que a análise feita aqui teve grande semelhança com a do capítulo II, em particular a obtenção das condições de ordem.

Tabela 3.1: Os polinômios $\psi_1(t)$ para algumas árvores

t	$\sum \mu_1 \psi_1(t)$
$\sum \mu_1$
$\sum \mu_1 \beta'_1$
$\sum \mu_1 \alpha_1^2$
$\sum \mu_1 \beta'_{1j} \beta'_j$
$\sum \mu_1 \alpha_1^3$
$\sum \mu_1 \alpha_1 \alpha_{1j} \beta'_j$
$\sum \mu_1 \beta'_{1j} \alpha_j^2$
$\sum \mu_1 \beta'_{1j} \beta'_{jk} \beta'_k$

Tabela 3.2: Condições de ordem simplificadas para algumas árvores

número	árvore	$\sum \mu_1 \psi_1(t) = P_j$
1		$\sum \mu_1 = 1 = P_1$
2		$\sum \mu_1 \beta_1 = (1/2) - \gamma = P_2$
3		$\sum \mu_1 \alpha_1^2 = 1/3 = P_3$
4		$\sum \mu_1 \beta_{1j} \beta_j = (1/6) - \gamma + \gamma^2 = P_4$

(continua)

Tabela 3.2: (continuação)

número	árvore	$\sum \mu_i \psi_i(t) = P_j$
5		$\sum \mu_i \alpha_i^3 = 1/4 = P_5$
6		$\sum \mu_i \alpha_i \alpha_{ij} \beta_j = (1/8) - (\gamma/3) = P_6$
7		$\sum \mu_i \beta_{ij} \alpha_j^2 = (1/12) - (\gamma/3) = P_7$
8		$\sum \mu_i \beta_{ij} \beta_{jk} \beta_k = (1/24) - (\gamma/2) + (3/2)\gamma^2 - \gamma^3 = P_8$
9		$\sum \mu_i \alpha_i^4 = 1/5 = P_9$
10		$\sum \mu_i \alpha_i^2 \alpha_{ij} \beta_j = (1/10) - \gamma/4 = P_{10}$
11		$\sum \mu_i \alpha_{ij} \beta_j \alpha_{ik} \beta_k = (1/20) - (\gamma/4) + \gamma^2/3 = P_{11}$
12		$\sum \mu_i \alpha_i \alpha_{ij} \alpha_j^2 = 1/15 = P_{12}$
13		$\sum \mu_i \alpha_i \alpha_{ij} \beta_{jk} \beta_k = (1/30) - (\gamma/4) + \gamma^2/3 = P_{13}$
14		$\sum \mu_i \beta_{ij} \alpha_j^3 = (1/20) - \gamma/4 = P_{14}$
15		$\sum \mu_i \beta_{ij} \alpha_j \alpha_{jk} \beta_k = (1/40) - (5/24)\gamma + \gamma^2/3 = P_{15}$
16		$\sum \mu_i \beta_{ij} \beta_{jk} \alpha_k^2 = (1/60) - (\gamma/6) + \gamma^2/3 = P_{16}$
17		$\sum \mu_i \beta_{ij} \beta_{jk} \beta_{kl} \beta_l = (1/120) - (\gamma/6) + \gamma^2 - 2\gamma^3 + \gamma^4 = P_{17}$
18		$\sum \mu_i \alpha_i^5 = 1/6 = P_{18}$
19		$\sum \mu_i \alpha_i^2 \alpha_{ij} \beta_{jk} \beta_k = (1/36) - (\gamma/5) + \gamma^2/4 = P_{19}$

(continua)

Tabela 3.2: (continuação)

número	árvore	$\sum \mu_i \psi_i(t) = P_j$
20		$\sum \mu_i \beta_{ij} \alpha_j^4 = (1/30) - \gamma/5 = P_{20}$
21		$\sum \mu_i \beta_{ij} \beta_{jk} \alpha_k^3 = (1/120) - (\gamma/10) + \gamma^2/4 = P_{21}$
22		$\sum \mu_i \beta_{ij} \beta_{jk} \beta_{kl} \alpha_l^2 = (1/360) - (\gamma/20) + (\gamma^2/4) - \gamma^3/3 = P_{22}$

CAPÍTULO IV

ROW-MÉTODOS A-ESTÁVEIS COM ESTUDO DO ERRO DE TRUNCAMENTO LOCAL

4.1 - Introdução

No capítulo anterior, demos as ferramentas necessárias ao estudo dos métodos do tipo Rosenbrock, centralizando-nos nas condições de ordem. Nosso propósito, no presente capítulo, é caracterizar completamente os ROW-métodos permitindo assim tratá-los de um modo prático.

4.2 - Estudo da A-estabilidade

O conceito da A-estabilidade está intimamente relacionado com o problema teste

$$y'(x) = \lambda y(x), \lambda \in \mathbb{C}, y(x_n) = y_n, \quad (4.2.1)$$

o qual é usado como um modelo para prever o comportamento de estabilidade de métodos numéricos, quando aplicados a problemas mais gerais.

Usando o problema teste (4.2.1) e escrevendo usualmente $z = \lambda h$, vemos que qualquer método de Runge-Kutta, dado por (2.1.1)-(2.1.2), pode ser escrito na forma

$$Y = y_n e + zAY, \quad (4.2.2)$$

$$y_{n+1} = y_n + zb^T Y, \quad (4.2.3)$$

onde $A = (a_{ij})$, $(1 \leq i, j \leq s)$, $b^T = (b_1, b_2, \dots, b_s)$, $e^T = (1, 1, \dots, 1)$ e $Y^T = (Y_1, Y_2, \dots, Y_s)$.

De (4.2.2) segue que $Y = (I - zA)^{-1} y_n e$. Assim, (4.2.3) pode ser escrita como

$$y_{n+1} = R(z)y_n, \quad (4.2.4)$$

onde $R : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$, dita função de estabilidade do método, é dada por

$$R(z) = \left[1 + zb^T(I - zA)^{-1}e \right].$$

A solução verdadeira de (4.2.1) é $y(x) = y_n e^{\lambda(x-x_n)}$, e para $x = x_{n+1} = x_n + h$, $y(x_n + h) \cong y_{n+1} = y_n e^{\lambda h} = e^z y_n$. Assim podemos notar que $R(z)$, dada em (4.2.4), é uma aproximação para e^z . O lema que segue dá o sentido desta aproximação.

Lema 4.2.1 - A função de estabilidade $R(z)$ é uma aproximação para e^z com ordem ao menos r , isto é,

$$R(z) = e^z + O(z^{r+1}), \quad z \rightarrow 0,$$

onde r é um inteiro fixado.

Prova: Escrevendo o fator $(I - zA)^{-1}$ como uma série de potências $I + zA + z^2 A^2 + z^3 A^3 + \dots$ e notando que para $t \in \{\tau, [\tau]_n\}$ $b^T A^{k-1} e = \phi(t) = 1/k!$, $k=0,1,\dots$, onde $\phi(t) = \phi_{s+1}(t)$, definido em (2.2.2), temos para $k \leq r$ $R(z) = e^z + O(z^{r+1})$. ■

Uma interessante questão tratada por muitos analistas numéricos, tais como Wanner, em [Wanner,78], e muitos outros, é saber se, para certas classes de métodos de um passo para resolver E.D.O., a aproximação $R(z)$ para a função exponencial e^z é limitada por 1 no semi-plano esquerdo $\mathbb{C}^- = \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Re}(z) \leq 0\}$. Formalmente esta questão leva à definição.

Definição 4.2.2 - Um método de um passo é dito A-estável se

$$|R(z)| \leq 1, \quad \forall z \in \mathbb{C}^-.$$

Exemplos de métodos A-estáveis podem ser encontrados em [Dekker-Verwer,84], seção 3.3.

A partir de agora vamos caracterizar completamente a função de estabilidade $R(z)$ para os ROW-métodos e dar condições necessárias e suficientes para que um tal método seja A-estável.

Consideramos um ROW-método qualquer na forma (3.2.4)-(3.2.5)-(3.2.6). Usando a mesma notação da seção 3.5 definimos:

$$B = \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ \beta_{21} & 0 & & & \\ \beta_{31} & \beta_{32} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ \beta_{s1} & \beta_{s2} & \beta_{s3} & \dots & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g}^T = (g_1, g_2, \dots, g_s),$$

$$\mathbf{u}^T = (u_1, u_2, \dots, u_s), \quad \mu^T = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_s) \text{ e } \mathbf{e}^T = (1, 1, \dots, 1).$$

Observação 4.2.3 - Calculando as j -ésimas potências de B podemos notar que, em B^j , $2 \leq j \leq s$, a diagonal, a primeira sub-diagonal, ..., a $(j-1)$ -ésima sub-diagonal contém somente elementos nulos.

Aplicando qualquer ROW-método ao problema teste (4.2.1) e assumindo que $f'(y_n) = \lambda$, as componentes do vetor $\mathbf{g}$, dadas em (3.2.5), tornam-se

$$g_i = \frac{z}{(1-\gamma z)} \left[y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} g_j \right], \quad (1 \leq i \leq s),$$

e portanto,

$$\mathbf{g} = \frac{z}{(1-\gamma z)} \left[y_n \mathbf{e} + B \mathbf{g} \right].$$

Levando-se em conta que $B^s = 0$ (observação 4.2.3), podemos escrever finalmente o vetor $\mathbf{g}$ como

$$\mathbf{g} = \sum_{j=1}^s \left[\frac{z}{(1-\gamma z)} \right]^j B^{j-1} \mathbf{e} y_n. \quad (4.2.5)$$

Usando (4.2.5) a solução numérica $y_{n+1} = y_n + \mu^T g$, torna-se

$$y_{n+1} = R(z) y_n,$$

onde a função de estabilidade $R(z)$, em analogia a (4.2.4), é dada por

$$R(z) = 1 + z\mu^T(I - zB)^{-1}e = 1 + \sum_{j=1}^s \left[\frac{z}{1-\gamma z} \right]^j \mu^T B^{j-1} e.$$

Multiplicando $R(z)$ por $(1-\gamma z)^s/(1-\gamma z)^s$, obtemos

$$R(z) = \sum_{j=0}^s a_j z^j / (1-\gamma z)^s, \quad (4.2.6)$$

onde $a_0 = (1-\gamma z)^s \mu^T B^{-1} e$, com

$$B^{-1} = \text{diag} \left[(1-\gamma z)^{-s} / s\mu_1, (1-\gamma z)^{-s} / s\mu_2, \dots, (1-\gamma z)^{-s} / s\mu_s \right] \quad e$$

$$a_j = (1-\gamma z)^{s-j} \mu^T B^{j-1} e, \quad (1 \leq j \leq s).$$

Teorema 4.2.4 - Se um ROW-método tem ordem ao menos s , então a_j , $(0 \leq j \leq s)$, dados em (4.2.6), podem ser escritos como

$$a_j = \sum_{i=0}^j \left[\begin{matrix} s \\ i \end{matrix} \right] \frac{(-\gamma)^i}{(j-i)!}. \quad (4.2.7)$$

Prova: Pelo lema 4.2.1 temos que $e^z - R(z) = O(z^{s+1})$, isto é,

$$(1-\gamma z)^s e^z - \sum_{j=0}^s a_j z^j = O(z^{s+1}). \quad (4.2.8)$$

Lembrando que $(1-\gamma z)^s = \sum_{i=0}^s \left[\begin{matrix} s \\ i \end{matrix} \right] (-\gamma)^i z^i$ e $e^z = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{z^i}{i!}$, podemos

escrever o primeiro termo do lado esquerdo de (4.2.8) como

$$(1-\gamma z)^s e^z = \sum_{j=0}^s z^j \left[\sum_{i=0}^j \left[\begin{matrix} s \\ i \end{matrix} \right] \frac{(-\gamma)^i}{(j-i)!} \right] + O(z^{s+1}).$$

Assim, (4.2.8) torna-se:

$$\sum_{j=0}^s z^j \left[\sum_{i=0}^j \binom{s}{i} \frac{(-\gamma)^i}{(j-i)!} \right] - \sum_{j=0}^s a_j z^j = O(z^{s+1}),$$

o que conclui teorema. ■

Como podemos notar, a função de estabilidade

$$R(z) = \frac{P(z)}{Q(z)} = \left[\sum_{j=0}^s z^j \sum_{i=0}^j \binom{s}{i} \frac{(-\gamma)^i}{(j-i)!} \right] / (1-\gamma z)^s \quad (4.2.9)$$

depende exclusivamente do fator γ . Resta-nos, agora, encontrar intervalos de γ , que chamaremos de intervalos de estabilidade, para que um ROW-método de s estágios seja A-estável.

Colocamos agora a questão:

- Quais os valores do parâmetro γ para que um ROW-método seja A-estável? Em outras palavras, quais os valores de γ para que a função racional $R(z)$, dada em (4.2.9), a qual aproxima e^z com ordem ao menos s , seja limitada por 1 em $\mathbb{C}^-$?

A resposta a essa questão está contida no próximo teorema. Mas antes observamos que, devido ao fato de $R(z)$ ter um pólo de ordem s em $z=1/\gamma$, o método não pode ser A-estável para $\gamma \leq 0$.

Teorema 4.2.5 - Para $\gamma > 0$, um ROW-método é A-estável se, e somente se, $|R(iy)| \leq 1, \forall y \in \mathbb{R}$.

Prova: Se $|R(z)| \leq 1, \forall z \in \mathbb{C}^-$, é claro que $|R(iy)| \leq 1, \forall y \in \mathbb{R}$. Suponhamos que $|R(iy)| \leq 1, \forall y \in \mathbb{R}$. Então, pela própria estrutura de $R(z)$, vale $\forall z \in \mathbb{C}^-$

$$R(z) = k + r(z)/Q(z), \quad (4.2.10)$$

onde k é alguma constante não nula e $\text{Grau}(r(z)) < \text{Grau}(Q(z))$.

Assim, de (4.2.10), $\lim_{|z| \rightarrow \infty} |R(z)| = L \leq |k|$, ou seja, para cada

$\varepsilon > 0$, existe $M > 0$ tal que $|z| \geq M$ tem-se

$$||R(z)| - L| < \varepsilon. \quad (4.2.11)$$

Como, por hipótese, $|R(iy)| \leq 1$, $\forall y \in \mathbb{R}$, segue que $L \leq 1$ e daí, levando em conta a desigualdade (4.2.11),

$$|R(z)| < 1 + \varepsilon, \text{ para } |z| \geq M. \quad (4.2.12)$$

Seja, agora, o aberto $E = \{z \in \mathbb{C}^-; |z| < M\}$. Sendo $\bar{E}$ (fecho de E) compacto e $|R(z)|$ contínua em $\bar{E}$, $|R(z)|$ assume seu valor máximo em $\bar{E}$, digamos $\bar{M}$. Então, sendo $R(z)$ analítica e não constante em E , pelo princípio do módulo máximo (teorema 1.3.3) $\bar{M}$ está na fronteira de E . Logo

$$|R(z)| < 1 + \varepsilon, \text{ para } |z| < M. \quad (4.2.13)$$

Portanto, de (4.2.12) e (4.2.13), $|R(z)| < 1 + \varepsilon$, $\forall z \in \mathbb{C}^-$ e $\forall \varepsilon > 0$, donde concluímos que $|R(z)| \leq 1$, $\forall z \in \mathbb{C}^-$. ■

Observamos, pelo teorema anterior, que a A-estabilidade de um ROW-método está inteiramente determinada pelo comportamento da função racional $R(z)$, para z sobre o eixo imaginário.

A condição $|R(iy)| \leq 1$, $\forall y \in \mathbb{R}$, dada pelo teorema 4.2.5, é equivalente à condição abaixo, que envolve o E-polinômio definido em [Nørsett,75],

$$E(y) = |Q(iy)|^2 - |P(iy)|^2 \geq 0, \forall y \in \mathbb{R}, \quad (4.2.14)$$

que se reduz a um polinômio de grau s na variável y^2 . Assim, para cada inteiro s , podemos determinar intervalos para γ onde o correspondente ROW-método de s estágios é A-estável. A seguir, baseando em [Wanner,80], [Burrage,78] e [Kaps-Rentrop,79], usaremos (4.2.14) para encontrar os intervalos do parâmetro γ , para $1 \leq s \leq 6$.

s=1:

Por (4.2.9) $P(iy)=1+(1-\gamma)y$ e $Q(iy)=1-\gamma y$.

Assim, o E-polinômio torna-se

$$E(y) = |Q(iy)|^2 - |P(iy)|^2 = (2\gamma-1)y^2 \geq 0, \quad \forall y \in \mathbb{R},$$

que nos leva a

$$\gamma \in [0.5, \infty).$$

s=2:

$$E(y) = (-1/4 + 2\gamma - 5\gamma^2 + 4\gamma^3)y^4 = A(\gamma)y^4 \geq 0, \quad \forall y \in \mathbb{R}.$$

Estudando o sinal de $A(\gamma)$ concluímos que

$$\gamma \in [0.25, \infty).$$

s=3:

$$E(y) = A_1(\gamma)y^4 + A_2(\gamma)y^6, \text{ onde}$$

$$A_1(\gamma) = -2\gamma^3 + 3\gamma^2 - \gamma + 1/12,$$

$$A_2(\gamma) = 6\gamma^5 - 12\gamma^4 + 28\gamma^3/3 - 13\gamma^2/4 + \gamma/2 - 1/36.$$

Assim, $E(y) \geq 0, \forall y \in \mathbb{R}$, equivale a $A_1(\gamma) \geq 0$ e $A_2(\gamma) \geq 0$.

Portanto,

$$\gamma \in [1/3, 1.06858].$$

Analogamente, procedemos para $s=4, 5$ e 6 e chegamos aos respectivos valores de γ dados na tabela a seguir.

Tabela 4.1: Intervalos de estabilidade para o parâmetro γ .

estágio	intervalo
1	$[0.5, \infty)$
2	$[0.25, \infty)$
3	$[1/3, 1.06858]$
4	$[0.39434, 1.28058]$
5	$[0.24651, 0.36180] \cup [0.42079, 0.47328]$
6	$[0.28407, 0.54090]$

4.3 - Construção de Alguns ROW-métodos A-estáveis

Fazendo uso do teorema 3.5.3, apresentaremos nesta seção alguns ROW-métodos A-estáveis de várias ordens, a partir de um até cinco, nos quais o número de estágios não supera a ordem. Os procedimentos aqui apresentados seguem a mesma linha adotada por Butcher na construção dos métodos de Runge-Kutta [Butcher,87]. Eles serão colocados na forma (3.2.1)-(3.2.2)-(3.2.3).

Um estágio e ordem 1:

Impondo que $\sum_{i=1}^1 \mu_i \psi_i(t) = 1/\Gamma(t)$, $\forall t \in A$; $r(t) \leq 1$, temos

$r(t)=1$ e $t=\tau$. Logo,

$\psi_i(t)=1$ e $\mu_i=1$, o que nos dá

$$y_{n+1} = y_n + hK_1, \quad n=0,1,\dots,$$

onde

$$K_1 = (I - h\gamma f'(y_n))^{-1} f(y_n), \quad \gamma \in [0.5, \infty).$$

Um estágio e ordem dois:

Impondo que $\sum_{i=1}^1 \mu_i \psi_i(t) = 1/\Gamma(t)$, $\forall t \in A$: $r(t) \leq 2$,

$$r(t)=1 \rightarrow t=\tau \rightarrow \mu_1=1,$$

$$r(t)=2 \rightarrow t=[\tau] \rightarrow 0 = -\gamma + 1/2 \rightarrow \gamma = 1/2.$$

Assim, temos o método

$$y_{n+1} = y_n + hK_1, \quad n=0,1,\dots,$$

onde

$$K_1 = (I - 0.5hf'(y_n))^{-1}f(y_n).$$

Observação 4.3.1 - Não existe ROW-método A-estável de ordem três com exatamente um estágio. De fato, a condição de ordem para a árvore $t=[\tau^2]$ é violada. Porém, podemos construir ROW-métodos A-estáveis de terceira ordem com dois estágios.

Dois estágios e ordem três

Impondo $\sum_{i=1}^2 \mu_i \psi_i(t) = 1/\Gamma(t)$, $\forall t \in A$; $r(t) \leq 3$ temos

$$r(t) \leq 3 \rightarrow t=\tau, \quad t=[\tau], \quad t=[\tau^2] \quad \text{ou} \quad t=[{}_2\tau]_2.$$

Então, segue o sistema

$$\mu_1 + \mu_2 = 1,$$

$$\mu_2 \beta_2 = 0.5 - \gamma,$$

$$\mu_2 \alpha_2^2 = 1/3,$$

$$0 = \gamma^2 - \gamma + 1/6.$$

Por exemplo, fazendo $\mu_2=0.25$ e tomando a raiz $\gamma=0.7887$ da última

equação, pertencente ao intervalo $[0.25, \infty)$, obtemos o seguinte método

$$y_{n+1} = y_n + h \left[1.48206 K_1 + 0.25 K_2 \right],$$

onde

$$E = I - 0.7887hf'(y_n)$$

$$K_1 = E^{-1}f(y_n)$$

$$K_2 = E^{-1} \left[f(y_n + h \cdot 1.1547 K_1) - 2.92824 K_1 \right].$$

Observação 4.3.2 - Analogamente à observação 4.3.1, não existe ROW-método A-estável com $p=4$ e $s=1$. Também para $p=4$ e $s=2$ não existe ROW-método A-estável, pois a equação de ordem para $t=[_2\tau^2]_2$ nos dá $\gamma=0.25$ e para este valor a equação de ordem para $t=[_2\tau]_2$ é violada. No entanto, podemos construir ROW-métodos A-estáveis de três estágios e ordem quatro.

Três estágios e ordem quatro:

Impondo $\sum_{i=1}^3 \mu_i \psi_i(t) = 1/\Gamma(t)$, $\forall t \in A_+$, $r(t) \leq 4$, obtemos o sistema dado a

seguir:

$$\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 = P_1, \quad (4.3.1a)$$

$$\mu_2 \beta_2 + \mu_3 \beta_3 = P_2, \quad (4.3.1b)$$

$$\mu_2 \alpha_2^2 + \mu_3 \alpha_3^2 = P_3, \quad (4.3.1c)$$

$$\mu_3 \beta_{32} \beta_2 = P_4, \quad (4.3.1d)$$

$$\mu_2 \alpha_2^3 + \mu_3 \alpha_3^3 = P_5, \quad (4.3.1e)$$

$$\mu_3 \alpha_3 \alpha_{32} \beta_2 = P_6, \quad (4.3.1f)$$

$$\mu_3 \beta_{32} \alpha_2^2 = P_7, \quad (4.3.1g)$$

$$0 = \frac{1}{24} - \frac{1}{2} \gamma + \frac{3}{2} \gamma^2 - \gamma^3, \quad (4.3.1h)$$

onde P_i , ($1 \leq i \leq 7$), são os polinômios em γ dados em (3.5.5) e que estão na tabela 3.2 ao final do capítulo III.

A solução do sistema (4.3.1) vem explicada a seguir:

- Escolhemos $\gamma = 1.068579$ como uma aproximação da raiz de (4.3.1h). Arbitrando convenientemente valores para α_2 e α_3 , obtemos μ_1 , μ_2 e μ_3 pelo sistema linear a), c), e e). Por g) tiramos que $\beta_{32} = P_7 / \mu_3 \alpha_2^2$. Por d) tiramos $\beta_2 = P_4 / \beta_{32} \mu_3$. Por b) tiramos $\beta_3 = (P_2 - \mu_2 \beta_2) / \mu_3$. Por f) tiramos $\alpha_{32} = P_6 / \mu_3 \alpha_3 \beta_2$. Finalmente calculamos α_{31} e β_{31} a partir de (3.3.2).

Até agora, de maneira natural, pela imposição das condições (3.5.2), nos dedicamos à construção de ROW-métodos A-estáveis com a propriedade do número de estágios ser mínimo. Isto pode comprometer os resultados numéricos se os parâmetros livres do método não forem escolhidos de maneira adequada. Com o objetivo de obter métodos com aceitáveis propriedades computacionais,

apresentaremos a seguir um procedimento, por nós obtido, o qual permite determinar ROW-métodos A-estáveis de quarta ordem e quatro estágios. A quantidade de parâmetros livres foi reduzida, o que facilitou de certa forma o trabalho.

Procedimento 4.3.3 - Impondo (3.5.2), com $p = s = 4$, obtemos um sistema com 8 equações (ver tabela 3.2 ao final do capítulo III), para encontrar os parâmetros do método. Para simplificar a resolução de tal sistema, faremos uso das hipóteses simplificadoras (3.5.3) e (3.5.4). Além disso, para eliminar 6 dos nove parâmetros livres, usamos as condições de ordem para as seguintes árvores de cinco vértices:

$$\sum_{i=1}^s \mu_i \alpha_i^4 = 1/5 = P_9, \quad (4.3.2)$$

$$\sum_{i,j=1}^s \mu_i \beta_{ij} \alpha_j^3 = (1/20) - \gamma/4 = P_{14}, \quad (4.3.3)$$

$$\sum_{i,j,k=1}^s \mu_i \beta_{ij} \beta_{jk} \alpha_k^2 = (1/60) - (\gamma/6) + \gamma^2/3 = P_{16}. \quad (4.3.4)$$

Os passos que vêm detalhados a seguir permitem determinar ROW-métodos A-estáveis de quatro estágios e ordem quatro com apenas três parâmetros livres. As equações mencionadas pelos números são as da tabela 3.2 ao final do capítulo III.

1. Podemos escolher convenientemente γ , α_3 e α_{42} , como parâmetros livres, onde γ pertence ao intervalo de estabilidade para $s=4$ (ver tabela 4.1 da seção 4.2).

2. Obtemos $\alpha_2 = 2\gamma$ e $\alpha_4 = 1-\gamma$, a partir de (3.5.3), com $i=2$, e (3.5.4) com $j=4$, respectivamente.

3. μ_1 , μ_2 , μ_3 e μ_4 podem ser obtidos do sistema linear determinado pelas equações 1, 3, 5 e (4.3.2).

4. Colocando $x_k = \sum_{i=k+1}^4 \mu_i \beta_{ik}$, ($2 \leq k \leq 3$), as equações 7 e (4.3.3) levam ao sistema

$$\begin{bmatrix} \alpha_2^2 & \alpha_3^2 \\ \alpha_2^3 & \alpha_3^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_7 \\ P_{14} \end{bmatrix},$$

o qual permite computar $\beta_{43} = x_3/\mu_4$.

5. A equação (4.3.4) dá $\beta_{32} = P_{16}/\mu_4 \beta_{43} \alpha_2^2$. Daí, levando-se em conta a definição de x_2 , tiramos que $\beta_{42} = (x_2 - \mu_3 \beta_{32})/\mu_4$.

6. As equações 8, 4 e 2 e as definições de x_2 e x_3 , permitem determinar β_2 , β_3 e β_4 através do sistema

$$\begin{bmatrix} x_3 \beta_{32} & 0 & 0 \\ x_2 & x_3 & 0 \\ \mu_2 & \mu_3 & \mu_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_8 \\ P_4 \\ P_2 \end{bmatrix}.$$

7. A hipótese (3.5.3), com $i=3,4$, leva ao cálculo de

$$\alpha_{32} = \alpha_3 [(\alpha_3/2) - \gamma] / \beta_2,$$

$$\alpha_{43} = [\alpha_4 (\alpha_4/2 - \gamma) - \alpha_{42} \beta_2] / \beta_3.$$

8. Finalmente, Obtemos α_{31} , α_{41} , β_{31} e β_{41} a partir de (3.3.2).

Observação 4.3.4 - Embora existam ROW-métodos A-estáveis de quarta ordem com $s=3$, nós afirmamos a não existência de ROW-método A-estável de ordem cinco com $s=4$. De fato, a equação de ordem para $t=[_4\tau]_4$ leva-nos a $P_{17} = \frac{1}{120} - \frac{1}{6}\gamma + \gamma^2 - 2\gamma^3 + \gamma^4 = 0$, cujas raízes são aproximadamente 0.17448418, 0.09129173, 0.38885761 ou 1.34536642. Estas raízes não pertencem ao intervalo de estabilidade de métodos de quatro estágios. Mas para $p=s=5$, o procedimento que segue, dado em [Kaps-Wanner,81], permite encontrar ROW-métodos A-estáveis com mais avaliações da função f .

Procedimento 4.3.5 - As 17 equações obtidas pela imposição de (3.5.2), (ver tabela 3.2 ao final do capítulo III), levam aos métodos de quinta ordem com cinco estágios. As hipóteses simplificadoras (3.5.3) e (3.5.4) e as condições de ordem para as árvores

reduzem o número de parâmetros livres e simplificam a obtenção das soluções. Os passos, abaixo, exibem métodos desta natureza e as equações mencionadas pelo número são as da tabela 3.2 ao final do capítulo III.

1. Podemos escolher convenientemente γ , α_3 , e α_4 como parâmetros livres. É claro que γ deve pertencer ao intervalo de estabilidade apropriado.
2. Obtemos $\alpha_2=2\gamma$ e $\alpha_5=1-\gamma$ a partir de (3.5.3), com $i=2$, e (3.5.4), com $j=5$, respectivamente.
3. Obtemos μ_1 , μ_2 , μ_3 , μ_4 e μ_5 a partir do sistema linear determinado pelas equações 1, 3, 5, 9 e 18.

4. Colocando $x_k = \sum_{i=k+1}^5 \mu_i \beta_{ik}$, ($2 \leq k \leq 4$), as equações 7, 14 e 20 compõem o sistema

$$\begin{bmatrix} \alpha_2^2 & \alpha_3^2 & \alpha_4^2 \\ \alpha_2^3 & \alpha_3^3 & \alpha_4^3 \\ \alpha_2^4 & \alpha_3^4 & \alpha_4^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_7 \\ P_{14} \\ P_{20} \end{bmatrix},$$

que permite computar x_2 , x_3 , x_4 e portanto $\beta_{54} = x_4 / \mu_5$. Além disso, as equações 16 e 21 fornecem o sistema

$$\begin{bmatrix} x_3 \alpha_2^2 & x_4 \alpha_2^2 & x_4 \alpha_3^2 \\ x_3 \alpha_2^3 & x_4 \alpha_2^3 & x_4 \alpha_3^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{32} \\ \beta_{42} \\ \beta_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{16} \\ P_{21} \end{bmatrix}.$$

Multiplicando a primeira equação por α_2 e subtraindo da segunda obtemos

$$\beta_{43} = (P_{21} - \alpha_2 P_{16}) / (x_4 \alpha_3^2 (\alpha_3 - \alpha_2)),$$

$$\beta_{53} = (x_3 - \mu_4 \beta_{43}) / \mu_5.$$

5. Levando em conta as definições de x_2 , x_3 e x_4 as equações 22 e 16 permitem computar β_{32} , β_{42} e β_{52} através do sistema

$$\begin{bmatrix} \mu_5 \beta_{54} \beta_{43} \alpha_2^2 & 0 & 0 \\ x_3 \alpha_2^2 & x_4 \alpha_2^2 & 0 \\ \mu_3 & \mu_4 & \mu_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{32} \\ \beta_{42} \\ \beta_{52} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{22} \\ P_{16} - x_4 \beta_{43} \alpha_3^2 \\ x_2 \end{bmatrix}.$$

6. As equações 17, 8, 4 e 2 levam ao sistema

$$\begin{bmatrix} x_4 \beta_{43} \beta_{32} & 0 & 0 & 0 \\ x_3 \beta_{32} + x_4 \beta_{42} & x_4 \beta_{43} & 0 & 0 \\ x_2 & x_3 & x_4 & 0 \\ \mu_2 & \mu_3 & \mu_4 & \mu_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \\ \beta_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{17} \\ P_8 \\ P_4 \\ P_2 \end{bmatrix},$$

que permite calcular $\beta_2, \beta_3, \beta_4$ e β_5 e assim, $\beta_{21}, \beta_{31}, \beta_{41}$ e β_{51} por (3.3.2).

7. Colocando $w_i = \sum_{k=2}^{i-1} \beta_{ik} \beta_k$, ($3 \leq i \leq 5$), as equações 13 e 19 levam ao sistema

$$\begin{bmatrix} \mu_4 \alpha_{43} w_3 & \mu_5 \alpha_{53} w_3 & \mu_5 \alpha_{54} w_4 \\ \mu_4 \alpha_{43}^2 w_3 & \mu_5 \alpha_{53}^2 w_3 & \mu_5 \alpha_{54}^2 w_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{43} \\ \alpha_{53} \\ \alpha_{54} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{13} \\ P_{19} \end{bmatrix},$$

que permite, multiplicando a primeira linha por α_5 e subtraindo da segunda linha, determinar

$$\alpha_{43} = (P_{19} - \alpha_5 P_{13}) / (\mu_4 \alpha_{43} w_3 (\alpha_4 - \alpha_5)).$$

8. A hipótese simplificadora (3.5.3), com $i=3,4$, leva ao cálculo de α_{32} e α_{42} , por

$$\alpha_{32} = \alpha_3 (\alpha_3 / 2 - \gamma) / \beta_2 \quad \text{e} \quad \alpha_{42} = (\alpha_4 (\alpha_4 / 2 - \gamma) - \alpha_{43} \beta_3) / \beta_2.$$

9. As equações 12, 13 e a condição (3.5.3), com $i=5$, levam ao seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} \mu_5 \alpha_5 \alpha_2^2 & \mu_5 \alpha_5 \alpha_3^2 & \mu_5 \alpha_5 \alpha_4^2 \\ 0 & w_3 & w_4 \\ \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{52} \\ \alpha_{53} \\ \alpha_{54} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix},$$

onde

$$d_1 = -\mu_3 \alpha_3 \alpha_{32} \alpha_2^2 - \mu_4 \alpha_4 (\alpha_{42} \alpha_2^2 + \alpha_{43} \alpha_3^2) + 1/15,$$

$$d_2 = (P_{13} - \mu_4 \alpha_4 \alpha_{43} \beta_{32} \beta_2) / \mu_5 \alpha_5,$$

$$d_3 = \alpha_5 (-\gamma + \alpha_5/2).$$

Isto permite calcular α_{52} , α_{53} , α_{54} e por conseguinte, α_{21} , α_{31} , α_{41} e α_{51} usando (3.3.2).

Da mesma forma, como nas observações anteriores desta seção, podemos mostrar que não existem valores de γ compatíveis com a A-estabilidade para ROW-métodos de cinco estágios e ordem 6. No entanto, os métodos A-estáveis com $p=s=6$ podem ser encontrados em [Kaps-Wanner,81], com apenas cinco parâmetros livres.

Quanto à escolha dos parâmetros livres dos métodos apresentados nos procedimentos 4.3.3 e 4.3.5, seguimos o mesmo critério adotado na literatura, ou seja, "tentar" otimizar simultaneamente a constante do erro, que definiremos na seção seguinte, e a propriedade da A-estabilidade.

Os parâmetros γ , α_3 e α_4 exigidos no procedimento 4.3.5, foram obtidos, talvez não os melhores, por Kaps e Wanner, em [Kaps-Wanner,81], após uma série de testes numéricos com problemas do tipo "stiff". A escolha, obviamente sem garantias de otimalidade, foi

$$\gamma = 0.278053841136, \alpha_2 = 0.725, \alpha_3 = 0.794.$$

Para o procedimento original 4.3.3 escolhemos, depois de testes numéricos exaustivos, os valores

$$\gamma = 0.39434, \quad \alpha_3 = 0.5636, \quad \alpha_{42} = -0.1,$$

que também acreditamos não serem os melhores. Porém, testes com alguns problemas parecem mostrar que eles dão origem a métodos quase tão eficientes quanto os de Kaps e Wanner, que têm ordem superior.

4.4 - Estudo do Erro de Truncamento Local

Consideramos aqui a aplicação ao problema original (1.1.3)-(1.1.2) do método (3.2.1)-(3.2.2)-(3.2.3). Na presente seção estamos interessados no comportamento desse método quando cometemos erro em um único passo de integração, admitindo que não houve erro nos passos anteriores. A magnitude de tal erro tem fundamental importância, no que diz respeito à precisão, nos métodos gerais de um passo.

Seja um ROW-método qualquer de ordem p . Dado um tamanho de passo $h = x_{n+1} - x_n$, o erro de truncamento local associado com o $(n+1)$ -ésimo passo de integração é definido, segundo [Butcher, 87; pag. 279], por

$$e_{n+1} = y(x_{n+1}) - Y(x_{n+1}), \quad (4.4.1)$$

onde $Y(x)$ é como na definição 3.5.1

Dado que o método tem ordem p , podemos, levando em conta que $y(x_{n+1})$ e $Y(x_{n+1})$ são B-séries, com coeficientes dados pelo exemplo 3.4.3 e teorema 3.5.2, escrever (4.4.1) na forma

$$\begin{aligned} e_{n+1} &= \sum_{\substack{t \in \mathbb{N} \\ r(t) \geq p+1}} \frac{h^{r(t)}}{r(t)!} \left[1 - y_{n+1}(t) \right] F(t)(y_n) + O(h^{p+2}) \\ &= C(x_n) h^{p+1} + O(h^{p+2}), \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

onde

$$C(x) = \sum_{\substack{t \in AN \\ r(t)=p+1}} \left[\frac{(1-y_{n+1}(t))}{(p+1)!} \right] F(t)(y(x)).$$

Os termos $C(x_n)h^{p+1}$ e $d(t)=(1-y_{n+1}(t))$ são chamados, respectivamente, de função erro principal e coeficientes do erro.

O fator, chamado constante do erro,

$$CE = \max_{r(t)=p+1} \left[d(t)/(p+1)! \right],$$

tem fundamental importância na construção de métodos eficientes e ele expressa o erro máximo cometido no cálculo dos coeficientes do erro.

A partir de agora, buscamos uma estimativa para a função erro principal, a qual é obtida a partir do próximo teorema.

Teorema 4.4.1 - Suponhamos que, com um dado valor inicial (x_n, y_n) e tamanho de passo h , computamos, usando um ROW-método fixado de ordem p , resultados numéricos y_{n+1} e y_{n+2} , para $y(x_{n+1})$ e $y(x_{n+2})$, e também um terceiro resultado numérico w , aproximação de $y(x_{n+2})$, computado com o mesmo ROW-método e tamanho de passo $2h$. Então, o erro de y_{n+2} pode ser extrapolado como

$$y(x_{n+2}) - y_{n+2} = \frac{y_{n+2}^{-w}}{2^{p-1}} + O(h^{p+2}), \quad (4.4.3)$$

e uma aproximação $\hat{y}_{n+2}$ de ordem $p+1$ para $y(x_{n+2})$ é

$$\hat{y}_{n+2} = y_{n+2} + \frac{y_{n+2}^{-w}}{2^{p-1}}. \quad (4.4.4)$$

Prova: Usando (4.4.2), o erro no cálculo de y_{n+1} é dado por

$$e_{n+1} = y(x_n + h) - y_{n+1} = C(x_n)h^{p+1} + O(h^{p+2}). \quad (4.4.5)$$

Também, o erro em y_{n+2} é dado por

$$\begin{aligned} e_{n+2} &= y(x_n + 2h) - y_{n+2} \\ &= e_{n+1} + O(h)e_{n+1} + (C(x_n) + O(h))h^{p+1} + O(h^{p+2}) \\ &= 2C(x_n)h^{p+1} + O(h^{p+2}), \end{aligned} \quad (4.4.6)$$

onde o fator $C(x_n) + O(h)$ é devido ao fato de que as diferenciais elementares são avaliadas em $y_{n+1} = y_n + O(h)$.

Analogamente a (4.4.5), temos para a solução w

$$y(x_n + 2h) - w = C(x_n)(2h)^{p+1} + O(h^{p+2}). \quad (4.4.7)$$

Subtraindo (4.4.7) de (4.4.6) temos

$$y_{n+2} - w = (2^p - 1)2C(x_n)h^{p+1} + O(h^{p+2}).$$

Assim, uma aproximação para $2C(x_n)h^{p+1}$ é

$$2C(x_n)h^{p+1} = \frac{y_{n+2} - w}{2^p - 1}. \quad (4.4.8)$$

Agora, substituindo (4.4.8) em (4.4.6), obtemos finalmente que o erro de truncamento local principal pode ser extrapolado como

$$y(x_n + 2h) - y_{n+2} = \frac{y_{n+2} - w}{2^p - 1} + O(h^{p+2}),$$

e uma aproximação de ordem $p+1$ para $y(x_n + 2h)$ será

$$\hat{y}_{n+2} = y_{n+2} + \frac{y_{n+2} - w}{2^p - 1}.$$

A fórmula (4.4.3) é um dispositivo muito simples para estimar o erro local e a fórmula (4.4.4) permite aumentar a precisão de uma ordem adicional. Estas duas propriedades serão confirmadas no próximo capítulo.

CONCLUSÃO: Apresentamos, no presente capítulo, o conceito da A-estabilidade para os métodos do tipo Rosenbrock e pudemos observar que tal propriedade depende, exclusivamente, de um número real. Porém, sua escolha tem grande influência na eficiência de um particular método desta natureza.

Estudamos, também, a construção de métodos utilizando as hipóteses simplificadoras e exibimos um procedimento, que permite obter métodos de quarta ordem e A-estáveis.

Um estimador para o erro de truncamento local foi considerado e as aplicações ficaram para o próximo capítulo.

CAPITULO V

APLICAÇÕES NUMÉRICAS

No presente capítulo são fornecidos alguns resultados numéricos, a fim de ilustrar o desenvolvimento teórico apresentado nos capítulos III - IV e mostrar a viabilidade prática dos métodos do tipo Rosenbrock.

Usamos um computador ND4000/AT, versão 2.0, compatível com o padrão IBM PC/AT - (16 bits), com sistema operacional MS-DOS, versão 3.1, do Laboratório Didático-Científico de Computação (LDCC) "Prof. Odemar Leite Linhares", do Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos - USP. As rotinas foram elaboradas em Fortran 77, versão 4.01, em precisão dupla.

O método de ordem quatro com três estágios, obtido naturalmente pela imposição das condições de ordem e com a escolha $\alpha_2 = \alpha_3 = 3.5$, conforme aparece na seção 4.3 chamaremos pelo nome sugestivo ROW43. Da mesma forma, o método original de quarta ordem com quatro estágios, obtido segundo o procedimento 4.3.3 e com a escolha $\gamma = 0.39434$, $\alpha_3 = 0.5636$ e $\alpha_{42} = -0.1$, será denominado ROW44. Também, o método de Kaps e Wanner, de quinta ordem com cinco estágios, obtido com o procedimento 4.3.5 e com a escolha $\gamma = 0.278053841136$, $\alpha_2 = 0.725$ e $\alpha_3 = 0.794$, denominaremos ROW55. Os coeficientes desses métodos, na forma (3.2.1)-(3.2.2)-(3.2.3), estão listados nas tabelas 5.18, 5.19 e 5.20, ao final deste capítulo.

Para confirmar numericamente as ordens dos métodos ROW44 e ROW55, vamos aplicá-los ao simples P.V.I dado a seguir:

$$\begin{cases} y'(x) = -y(x) \\ y(0) = 1 \end{cases}, \quad (5.1)$$

cujas soluções exatas são $y(x) = \exp(-x)$.

As tabelas que vêm a seguir comprovam claramente a ordem desses métodos para x no intervalo $[0,5]$, nos pontos 2, 3 e 5, e para vários valores do tamanho do passo h .

Tabela 5.1: ROW44 para o problema (5.1) com $h=0.5$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1353405776272D+00	.5294390550220D-05
3	.4978706836786D-01	.4978998994259D-01	.2921574728233D-05
5	.6737946999085D-02	.6738605998881D-02	.6589997956045D-06

Tabela 5.2: ROW44 para o problema (5.1) com $h=0.1$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1353352785105D+00	.4726094071650D-08
3	.4978706836786D-01	.4978706575991D-01	.2607949217692D-08
5	.6737946999085D-02	.6737946410840D-02	.5882459450102D-09

Tabela 5.3: ROW44 para o problema (5.1) com $h=0.01$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1353352832357D+00	.8902600878713D-12
3	.4978706836786D-01	.4978706836737D-01	.4923700336334D-12
5	.6737946999085D-02	.6737946998975D-02	.1112339387266D-12

Tabela 5.4: ROW55 para o problema (5.1) com $h=0.5$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1353387899323D+00	.3506695663069D-05
3	.4978706836786D-01	.4978900344226D-01	.1935074396255D-05
5	.6737946999085D-02	.6738383477809D-02	.4364787239601D-06

Tabela 5.5: ROW55 para o problema (5.1) com $h=0.1$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1353352845938D+00	.1357170958949D-08
3	.4978706836786D-01	.4978706911678D-01	.7489129108529D-09
5	.6737946999085D-02	.6737947168009D-02	.1689238809596D-09

Tabela 5.6: ROW55 para o problema (5.1) com $h=0.01$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1353352832366D+00	.1429412144205D-13
3	.4978706836786D-01	.4978706836787D-01	.6779299344117D-14
5	.6737946999085D-02	.6737946999087D-02	.1334869714764D-14

Observação 5.1: O método ROW43 tem, teoricamente, ordem quatro. Porém, os resultados numéricos não confirmam tal propriedade. Esta contradição aparente é ocasionada pela elevada constante do erro, a qual é causada pela escolha do parâmetro $\gamma = 1.068579$, que obviamente não é a raiz exata do polinômio dado por (4.3.1h). As tabelas abaixo comprovam esta afirmação.

Tabela 5.7: ROW43 para o problema (5.1) com $h=0.1$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1323367385761D+00	.2998544660480D-02
3	.4978706836786D-01	.4814161339851D-01	.1645454969356D-02
5	.6737946999085D-02	.6370904106952D-02	.6370428921339D-03

Tabela 5.8: ROW43 para o problema (5.1) com $h=0.01$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1336099779862D+00	.1725305250410D-02
3	.4978706836786D-01	.4883805264273D-01	.9490157251301D-03
5	.6737946999085D-02	.6525251138485D-02	.2126958606011D-03

Para aumentar a precisão de uma ordem adicional do método ROW44 aplicado ao P.V.I (5.1), em $[0,5]$, e estimar o erro de truncamento local, vamos utilizar, respectivamente, as fórmulas (4.4.4) e (4.4.3) com tamanho do passo 0.01. A tabela 5.9, a seguir, comparada com a tabela 5.3 mostra a precisão desejada. A tabela 5.10 exhibe os erros de truncamento locais nos pontos $x=2$, $x=3$ e $x=5$.

Tabela 5.9: ROW44 para o problema (5.1) com ordem adicional

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
2	.1353352832366D+00	.1353352832366D+00	.5312417172831D-13
3	.4978706836786D-01	.4978706836783D-01	.2932376563791D-13
5	.6737946999085D-02	.6737946999079D-02	.6592816570450D-14

Tabela 5.10: Estimativa para (4.4.1) usando ROW44 e (5.1)

x	estimativa para o erro de truncamento local
2	.8373283548006D-12 + $O(h^6)$
3	.4620521557956D-12 + $O(h^6)$
5	.1042219551402D-12 + $O(h^6)$

Para confirmar a A-estabilidade dos métodos estudados, vamos aplicá-los aos seguintes sistemas "stiff":

$$\begin{cases} y_1' = -21y_1 + 19y_2 - 20y_3, & y_1(0) = 1 \\ y_2' = 19y_1 - 21y_2 + 20y_3, & y_2(0) = 0 \\ y_3' = 40y_1 - 40y_2 - 40y_3, & y_3(0) = -1 \end{cases}, \quad (5.2)$$

cuja solução exata é mostrada no exemplo 1.2.1.

$$\begin{cases} y_1' = -2000.5y_1 + 999.75y_2 + 1000.25, & y_1(0) = 0 \\ y_2' = y_1 - y_2, & y_2(0) = -2 \end{cases}, \quad (5.3)$$

cuja solução exata é

$$y_1(x) = -1.49998875\exp(-0.5x) + 0.499875\exp(-2000.5x) + 1,$$

$$y_2(x) = -2.99975\exp(-0.5x) - 0.00025\exp(-2000.5x) + 1.$$

Observamos na solução do P.V.I (5.2), que o fenômeno "stiffness" é pouco acentuado em contraste com o "stiffness" do P.V.I (5.3).

As tabelas que vêm a seguir confirmam a A-estabilidade dos métodos ROW43, ROW44 e ROW55.

Tabela 5.11: ROW43 para o P.V.I (5.2) em $[0,1]$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
tamanho do passo $h=0.1$			
0.1	$\begin{bmatrix} .3964487656711D+00 \\ .4222819874069D+00 \\ -.1889420692490D-02 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .3221488569451D+00 \\ .4939805896182D+00 \\ .6126066590576D+00 \end{bmatrix}$	.6144960797501D+00
0.5	$\begin{bmatrix} .1839397219471D+00 \\ .1839397192243D+00 \\ .1040600590666D-08 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .1938003307706D+00 \\ .1682719177486D+00 \\ -.5267112416360D-02 \end{bmatrix}$	.1566780147571D-01
1.0	$\begin{bmatrix} .6766764161831D-01 \\ .6766764161831D-01 \\ .5998893818232D-17 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .6577137643402D-01 \\ .6532493671371D-01 \\ .1775176779093D-03 \end{bmatrix}$	.2342704904593D-02
tamanho do passo $h=0.01$			
0.1	$\begin{bmatrix} .3964487656711D+00 \\ .4222819874069D+00 \\ -.1889420692490D-02 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .3962584542022D+00 \\ .4213289571228D+00 \\ -.5624854222345D-02 \end{bmatrix}$	.3735433529855D-02
0.5	$\begin{bmatrix} .1839397219471D+00 \\ .1839397192243D+00 \\ .1040600590666D-08 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .1826589619128D+00 \\ .1826589606518D+00 \\ .2499391338606D-08 \end{bmatrix}$	.1280760034296D-02
1.0	$\begin{bmatrix} .6766764161831D-01 \\ .6766764161831D-01 \\ .5998893818232D-17 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .6672859227349D-01 \\ .6672859227349D-01 \\ .4184112408360D-17 \end{bmatrix}$	.9390493448204D-03

Tabela 5.12: ROW44 para o P.V.I (5.2) em [0,1]

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
tamanho do passo h=0.1			
0.1	$\begin{bmatrix} .3964487656711D+00 \\ .4222819874069D+00 \\ -.1889420692490D-02 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .3020281454085D+00 \\ .5167026007191D+00 \\ -.1895085149006D+00 \end{bmatrix}$	.1876190942081D+00
0.5	$\begin{bmatrix} .1839397219471D+00 \\ .1839397192243D+00 \\ .1040600590666D-08 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .1837256275499D+00 \\ .1841537980066D+00 \\ -.2199151381374D-03 \end{bmatrix}$	.2199161787380D-03
1.0	$\begin{bmatrix} .6766764161831D-01 \\ .6766764161831D-01 \\ .5998893818232D-17 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .6766762253514D-01 \\ .6766764921267D-01 \\ .1616448011170D-06 \end{bmatrix}$	.1616448011110D-06
tamanho do passo h=0.01			
0.1	$\begin{bmatrix} .3964487656711D+00 \\ .4222819874069D+00 \\ -.1889420692490D-02 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .3964486066765D+00 \\ .4222821463934D+00 \\ -.1896944346779D-02 \end{bmatrix}$	.7523654288332D-05
0.5	$\begin{bmatrix} .1839397219471D+00 \\ .1839397192243D+00 \\ .1040600590666D-08 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .1839397219375D+00 \\ .1839397192157D+00 \\ .1044705900015D-08 \end{bmatrix}$	.9665851452567D-11
1.0	$\begin{bmatrix} .6766764161831D-01 \\ .6766764161831D-01 \\ .5998893818232D-17 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .6766764161158D-01 \\ .6766764161158D-01 \\ .3611590553942D-17 \end{bmatrix}$	.6725328627333D-11

Tabela 5.13: ROW55 para o P.V.I (5.2) em [0,1]

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
tamanho do passo h=0.1			
0.1	$\begin{bmatrix} .3964487656711D+00 \\ .4222819874069D+00 \\ -.1889420692490D-02 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .3581387699267D+00 \\ .4605920080888D+00 \\ -.1047148625712D+00 \end{bmatrix}$	.1028254418788D+00
0.5	$\begin{bmatrix} .1839397219471D+00 \\ .1839397192243D+00 \\ .1040600590666D-08 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .1839341185069D+00 \\ .1839453786904D+00 \\ -.1256172650251D-04 \end{bmatrix}$	.1256276711031D-04
1.0	$\begin{bmatrix} .6766764161831D-01 \\ .6766764161831D-01 \\ .5998893818232D-17 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .6766766215057D-01 \\ .6766766230752D-01 \\ .1259447417107D-09 \end{bmatrix}$	.2068921065024D-07
tamanho do passo h=0.01			
0.1	$\begin{bmatrix} .3964487656711D+00 \\ .4222819874069D+00 \\ -.1889420692490D-02 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .3964492089243D+00 \\ .4222815441540D+00 \\ -.1892899483552D-02 \end{bmatrix}$	.3478791062116D-05
0.5	$\begin{bmatrix} .1839397219471D-02 \\ .1839397192243D+00 \\ .1040600590666D-08 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .1839397219469D+00 \\ .1839397192251D+00 \\ .1042331187565D-08 \end{bmatrix}$	.1730596898424D-11
1.0	$\begin{bmatrix} .6766764161831D-01 \\ .6766764161831D-01 \\ .5998893818232D-17 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .6766764161853D-01 \\ .6766764161853D-01 \\ -.2431580991871D-17 \end{bmatrix}$	.2270406085358D-12

Tabela 5.14: ROW43 para o P.V.I (5.3) em [0,1]

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
tamanho do passo h=0.1			
0.1	$\begin{bmatrix} -.4268334354200D+00 \\ -.1853450466146D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.7636787955317D+00 \\ -.1852038264384D+01 \end{bmatrix}$	.3368453601117D+00
0.5	$\begin{bmatrix} -.1681924130983D+00 \\ -.1336207649018D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.2359175087095D+00 \\ -.1331097552135D+01 \end{bmatrix}$	.6772509561119D-01
1.0	$\begin{bmatrix} .9021083390097D-01 \\ -.8194403464730D+00 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .1041071963433D+00 \\ -.8115739668077D+00 \end{bmatrix}$	.1389636244233D-01
tamanho do passo h=0.01			
0.1	$\begin{bmatrix} -.4268334354200D+00 \\ -.1853450466146D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.4242818498108D+00 \\ -.1852566496342D+01 \end{bmatrix}$	.2551585609211D-02
0.5	$\begin{bmatrix} -.1681924130983D+00 \\ -.1336207649018D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.1662573008401D+00 \\ -.1332597855274D+01 \end{bmatrix}$	.3609793744348D-02
1.0	$\begin{bmatrix} .9021083390097D-01 \\ -.8194403464730D+00 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .9305344337055D-01 \\ -.8138467114719D+00 \end{bmatrix}$	.5593635001117D-02

Tabela 5.15: ROW44 para o P.V.I (5.3) em $[0,1]$

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
tamanho do passo $h=0.1$			
0.1	$\begin{bmatrix} -.4268334354200D+00 \\ -.1853450466146D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .4205429344824D-01 \\ -.1853673632358D+01 \end{bmatrix}$	.4688877288683D+00
0.5	$\begin{bmatrix} -.1681924130983D+00 \\ -.1336207649018D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .1944588270029D+00 \\ -.1336353565952D+01 \end{bmatrix}$	.3626512401012D+00
1.0	$\begin{bmatrix} .9021083390097D-01 \\ -.8194403464730D+00 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .3532208126968D+00 \\ -.8195411609650D+00 \end{bmatrix}$	.2630099787958D+00
tamanho do passo $h=0.01$			
0.1	$\begin{bmatrix} -.4268334354200D+00 \\ -.1853450466146D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.4257562878377D+00 \\ -.1853439727283D+01 \end{bmatrix}$	.1077147582328D-02
0.5	$\begin{bmatrix} -.1681924130983D+00 \\ -.1336207649018D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.1680440842209D+00 \\ -.1336172315427D+01 \end{bmatrix}$	.1483288774137D-03
1.0	$\begin{bmatrix} .9021083390097D-01 \\ -.8194403464730D+00 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .9027265013416D-01 \\ -.8194096883413D+00 \end{bmatrix}$	.6181623318874D-04

Tabela 5.16: ROW55 para o P.V.I (5.3) em [0,1]

x	solução exata	solução numérica	erro absoluto
tamanho do passo h=0.1			
0.1	$\begin{bmatrix} -.4268334354200D+00 \\ -.1853450466146D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.4110985453388D+00 \\ -.1853447056178D+01 \end{bmatrix}$	.1573489008127D-01
0.5	$\begin{bmatrix} -.1681924130983D+00 \\ -.1336207649018D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.1680440698581D+00 \\ -.1336172315528D+01 \end{bmatrix}$	.1483432401999D-03
1.0	$\begin{bmatrix} .9021083390097D-01 \\ -.8194403464730D+00 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .9027265006075D-01 \\ -.8194096884882D+00 \end{bmatrix}$	.6181615977550D-04
tamanho do passo h=0.01			
0.1	$\begin{bmatrix} -.4268334354200D+00 \\ -.1853450466146D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.4266129331882D+00 \\ -.1853439298960D+01 \end{bmatrix}$	.2205022318102D-03
0.5	$\begin{bmatrix} -.1681924130983D+00 \\ -.1336207649018D+01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -.1680440842210D+00 \\ -.1336172315427D+01 \end{bmatrix}$	.1483288773432D-03
1.0	$\begin{bmatrix} .9021083390097D-01 \\ -.8194403464730D+00 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} .9027265013406D-01 \\ -.8194096883415D+00 \end{bmatrix}$	.6181623309094D-04

Para confirmar a A-estabilidade dos métodos ROW43, ROW44 e ROW55 aplicados a problemas do tipo "stiff" não lineares, consideramos o seguinte P.V.I extraído de [Verwer,77]:

$$\begin{cases} y_1' = -0.013y_2 - 1000y_1y_2 - 2500y_1y_3, & y_1(0) = 0 \\ y_2' = -0.013y_2 - 100y_1y_2, & y_2(0) = 1, \\ y_3' = -2500y_1y_3, & y_3(0) = 1 \end{cases} \quad (5.4)$$

cuja solução em $x = 50$ é

$$y_1 = -.1893386540D-05,$$

$$y_2 = .5976546980D+00,$$

$$y_3 = .1402343409D+01.$$

A tabela a seguir confirma esta propriedade.

Tabela 5.17: Resultados para o problema (5.4) em $x=50$ com $h=0.1$

método	solução numérica	erro absoluto
ROW43	$\begin{bmatrix} -.171864034D-05 \\ .526839927D+00 \\ .138330175D+01 \end{bmatrix}$	.708147709D-01
ROW44	$\begin{bmatrix} -.172619201D-05 \\ .528838757D+00 \\ .138155329D+01 \end{bmatrix}$	.688159412D-01
ROW55	$\begin{bmatrix} -.172619309D-05 \\ .528838958D+00 \\ .138154971D+01 \end{bmatrix}$	.688157395D-01

Tabela 5.18: Coeficientes do método ROW43 com a constante do erro

a_{ij}	c_{ij}	b_i
$a_{21} = 5.300000000000$	$c_{21} = -13.35649343856$	$b_1 = 1.9507627170330$
$a_{31} = 16.49423673059$	$c_{31} = -148.6398969596$	$b_2 = 0.3338578783182$
$a_{32} = 1.051611996171$	$c_{32} = -4.558995946490$	$b_3 = 58.309037900870$
$CE \leq 1.643929035288D-01$		

Tabela 5.19: Coeficientes do método ROW44 com a constante do erro

a_{ij}	c_{ij}	b_i
$a_{21} = .788680000000000$	$c_{21} = 7.3296974299510$	$b_1 = .25597103857530$
$a_{31} = .707204725110800$	$c_{31} = 5.9568119795410$	$b_2 = 2.1266702323150$
$a_{32} = -.01724008900904$	$c_{32} = .11982865529460$	$b_3 = 2.3036003283500$
$a_{41} = .781114041068600$	$c_{41} = 7.6272180625970$	$b_4 = -3.575634368756$
$a_{42} = -.11132547819730$	$c_{42} = .47901376945330$	-
$a_{43} = .094513938835800$	$c_{43} = -.3452113914279$	-
$CE \leq 2.296003882819D-03$		

Tabela 5.20: Coeficientes do método ROW55

a_{ij}	c_{ij}	b_i
$a_{21} = .55610768227200$	$c_{21} = .45166208212910$	$b_1 = 6.4467616358360$
$a_{31} = .59462511738770$	$c_{31} = 2.1619942079040$	$b_2 = 15.318062288360$
$a_{32} = .08981076534086$	$c_{32} = .20537455366710$	$b_3 = -3.527727397631$
$a_{41} = .61271216109880$	$c_{41} = 3.1977876865190$	$b_4 = -5.396093440112$
$a_{42} = .41764097028110$	$c_{42} = .54207892140600$	$b_5 = 1.6681212478480$
$a_{43} = -.1228236760386$	$c_{43} = -.3687663292123$	-
$a_{51} = 1.5950574105870$	$c_{51} = -2.438141004505$	-
$a_{52} = 2.3443923691500$	$c_{52} = -8.660861008404$	-
$a_{53} = .04461091906234$	$c_{53} = .46395900506310$	-
$a_{54} = -1.194679380536$	$c_{54} = 4.0780639397360$	-

CONCLUSÃO: - Como pudemos observar, a teoria descrita nos capítulos III e IV foi confirmada. Vale a pena lembrar que nosso trabalho prático foi bastante árduo devido ao pequeno porte da máquina utilizada e a lentidão do compilador Fortran acessível.

Um próximo estudo será a implementação do método ROW44 com controle do passo, mas para isso será, sem dúvida, necessária uma máquina mais adequada, como por exemplo um computador da linha VAX.

Para o futuro, pretendemos continuar nesta mesma linha de trabalho dedicando-nos, principalmente, ao estudo dos métodos do tipo Rosenbrock para resolver Equações Diferenciais Algébricas, o qual foi iniciado em 1988 por M. Roche e, mais recentemente, por E. Hairer e C. Schneider.

BIBLIOGRAFIA

- [Ahlfors,79]: Ahlfors, L. V. - Complex analysis. McGraw-Hill Book Co., Third edition, 1979.
- [Aiken,85]: Aiken, R. C. - Stiff computation. Oxford University Press, 1985.
- [Butcher,63]: Butcher, J. C. - Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes. J. Austral. Soc. 3, 185-201, 1963.
- [Butcher,64]: - Implicit Runge-Kutta processes. Math. Comp. 18, 50-64, 1964.
- [Butcher,64a]: - Integration processes based on Radau quadrature formulas. Math. Comp. 18, 233-244, 1964.
- [Butcher,65]: - A modified method for the numerical integration of ordinary differential equations. J. Assoc. Comput. Mach. 12, 124-135, 1965.
- [Butcher,72]: - An algebraic theory of integration methods. Math. Comp. 24, 79-106, 1972.
- [Butcher,75]: - An order for Runge-Kutta methods. SIAM J. Numer. Anal. 12, 304-315, 1975.
- [Butcher,85]: - The non-existence of ten stage eighth order explicit Runge-Kutta methods. BIT 25, 521-540, 1985.
- [Butcher,87]: - The numerical analysis of ordinary differential equations, Runge-Kutta and general linear methods. John Wiley & Sons, 1987.

- [Berge,62]: Berge, C. - The theory of graphs and its applications. Methem, 1962.
- [Barcelos,89]: Barcelos, C. A. Z. - Sobre estabilidade na discretização de equações diferenciais ordinárias, Tese de Doutorado. ICMSC-USP, 1989.
- [Burrage,78]: Burrage, K. - A special family of Runge-Kutta methods for solving stiff differential equations. BIT 18, 22-41, 1978.
- [Dekker-Verwer,84]: Dekker, K. and Verwer, J. G. - Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations. North-Holland, 1984.
- [Gottwald-Wanner,81]: Gottwald, B. A. and Wanner, G. - A reliable Rosenbrock integrator for stiff differential equations. Computing 26, 355-360, 1981.
- [Gel'fand,50]: Gel'fand, I. M. - Lectures on linear algebra. John Wiley & Sons, 1950.
- [Hairer-Wanner,74]: Hairer, E. and Wanner, G. - On the Butcher group and general multi-value methods. Computing 13, 1-15, 1974.
- [Hairer,87]: Hairer, E., Nørsett, S. P. and Wanner, G. - Solving ordinary differential equations I, nonstiff problems. Springer-Verlag, 1987.
- [Hairer-Wanner,90]: Hairer, E. and Wanner, G. - Solving ordinary differential equations II, stiff and differential-algebraic problems. to appear, 1990.
- [Hehl,86]: Hehl, M. E. - Linguagem de programação estruturada FORTRAN 77. McGraw-Hill, 1986.
- [Kaps-Wanner,81]: Kaps, P. and Wanner, G. - A study of Rosenbrock-type methods of high order. Numer. Math. 38, 279-298, 1981.

- [Kaps-Rentrop,79]: Kaps, P. and Rentrop, P. - Generalized Runge-Kutta methods of order four with stepsize control for stiff ordinary differential equations. Numer. Math. 33, 55-68, 1979.
- [Lambert,73]: Lambert, J. D. - Computational methods in ordinary differential equations. John Wiley & Sons, 1973.
- [Lima,70]: Lima, E. L. - Análise no espaço $\mathbb{R}^n$. Edgard Blucher, 1970.
- [Nørsett,75]: Nørsett, S. P. - C-polynomials for rational approximation to the exponential function. Numer. Math. 25, 39-56, 1975.
- [Nørsett-Wolfbrandt,79]: Nørsett, S. P. and Wolfbrandt, A. - Order conditions for Rosenbrock type methods. Numer. Math. 32, 1-15, 1979.
- [Rosenbrock,63]: Rosenbrock, H. H., - Some general implicit processes for numerical solution of differential equations. Comput. J. 5, 329-330, 1963.
- [Shampine,80]: Shampine, L. F. - Implementation of implicit formulas for the solution of ODEs. SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1, 103-118, 1980.
- [Shampine,82]: - Implementation of Rosenbrock methods. ACM Trans. on Math. Software 8, 93-113, 1982.
- [Verwer,77]: Verwer, J. G. - S-stability properties for generalized Runge-Kutta methods. Numer. Math. 27, 359-370, 1977.
- [Verwer-et al,83]: Verwer, J. G., Scholz, S., Blom, J. G. and Nool, M. L. - A class of Runge-Kutta-Rosenbrock methods for solving stiff differential equations. ZAMM 63, 13-20, 1983.

[Wanner,73]: Wanner, G. - Letter to S.P. Nørsett and unpublished communications to P. Kaps and A. Wolfbrandt, 1973.

[Wanner,78]: Wanner, G., Hairer, E. and Nørsett, S. P. - Order stars and stability theorems. BIT 18, 475-489, 1978.

[Wanner,80]: Wanner, G. On the choice of γ for singly-implicit RK or Rosenbrock methods . BIT 20, 102-106,1980.