



**Sección de Matemáticas**  
Universidad de La Laguna

Daniel Machín González

Métodos de tipo Runge-Kutta  
y linealmente implícitos para la  
resolución de EDOs.

Runge-Kutta and linearly implicit  
methods for ODEs.

Trabajo de Fin de Grado  
Grado en Matemáticas  
La Laguna, Julio de 2020

DIRIGIDO POR

*Domingo Hernández Abreu*



---

# Agradecimientos

A mi familia y amigos, en especial a mi tutor Domingo.

Daniel Machín González  
La Laguna, 8 de julio de 2020



---

# Resumen • Abstract

## *Resumen*

---

*En la presente memoria, realizamos una introducción a métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias. Definimos y caracterizamos los conceptos de estabilidad, consistencia y convergencia de métodos de un paso.*

*En particular, presentamos los métodos de tipo Runge-Kutta (RK), una importante familia de métodos de un paso. A efectos de estudiar el orden de convergencia de dichos métodos, introducimos la teoría de árboles de Butcher. Dicha teoría presenta una solución elegante y natural al problema de analizar la comparativa entre el desarrollo en serie de potencias de la solución del problema y la aproximación dada por el método numérico. En resumen, asociamos grafos a las diferenciales elementales, obtenidas de las derivadas sucesivas de la solución, encontrando así una serie de condiciones que definen el orden de un método.*

*Posteriormente, presentamos una serie de condiciones que nos permiten simplificar la búsqueda de métodos de orden superior. Gracias a dichas condiciones, encontramos nuevas familias de métodos que presentan el mayor orden con la menor cantidad de etapas. Entre estos métodos se encuentran los métodos RK implícitos de alto orden, los basados en las cuadraturas de Gauss, Radau y Lobatto y los métodos RK de colocación. Finalmente, para facilitar la implementación de estos métodos, hemos centrado nuestro interés en aquellos que requieren un menor esfuerzo computacional, los métodos DIRK y SDIRK. En relación a los métodos DIRK se introducen las familias de métodos linealmente implícitos de tipo ROW y W y se estudia su consistencia. Para terminar, comparamos en algunos ejemplos numéricos el orden de convergencia y la eficiencia de algunos métodos presentados a lo largo del trabajo.*

## *Abstract*

---

*In this report, we make an introduction to numerical methods to solve ordinary differential equations. We define and characterize the concepts of stability, consistency and convergence of a one-step method.*

*In particular, we introduce Runge-Kutta (RK) methods, a celebrated family of one-step methods. In order to study the convergence of these methods, we introduce the Butcher tree theory. This theory presents an elegant and natural solution to the problem of analyzing the comparison between the development in series of powers of the solution of the problem and the approximation given by the numerical method. In summary, we associate graphs with the elementary differentials, obtained from the successive derivatives of the solution, thus finding a series of conditions that define the order of a method.*

*Subsequently, we present a series of conditions that allow us to simplify the search for higher order methods. Thanks to these conditions, we find new families of methods that present the highest order with the fewest stages. These methods include high-order implicit RK methods, those based on Gauss, Radau and Lobatto quadratures, and RK collocation methods.*

*Finally, to facilitate the implementation of these methods, we have focused our interest on those that require a less computational effort, DIRK and SDIRK methods. In relation to DIRK methods, the families of linearly implicit methods of ROW- and W-type are introduced and their consistency is studied. To finish, we compare on some numerical examples the order of convergence and the efficiency of some methods presented throughout the work.*

---

# Contenido

<b>Agradecimientos</b> .....	III
<b>Resumen/Abstract</b> .....	V
<b>1. Métodos de un paso. Métodos de tipo Runge-Kutta.</b> .....	1
1.1. Métodos de un paso: consistencia, estabilidad y convergencia. ....	1
1.2. Métodos de tipo Runge-Kutta .....	6
<b>2. Condiciones de orden de métodos RK.</b> .....	11
2.1. Diferenciales elementales y árboles.....	11
2.2. B-series. ....	14
2.3. Árboles etiquetados. ....	16
2.4. Acotación del error local y global para métodos RK. ....	19
<b>3. Métodos RK implícitos de alto orden y de colocación.</b> .....	21
3.1. Condiciones simplificadoras de orden. ....	21
3.2. Métodos RK implícitos de alto orden. ....	25
3.3. Métodos RK basados en las cuadraturas de Radau y Lobatto. ....	28
3.4. Métodos Runge-Kutta de colocación. ....	31
<b>4. Métodos RK diagonalmente implícitos y métodos linealmente implícitos.</b> .....	33
4.1. Resolución de la ecuación de etapas en métodos RK implícitos. Métodos DIRK. ....	33
4.2. Métodos linealmente implícitos de tipo ROW y W.....	36
4.3. Consistencia de métodos ROW.....	38
4.4. Consistencia de métodos W. ....	42
4.5. Ilustración numérica. ....	48
<b>Bibliografía</b> .....	51
<b>Poster</b> .....	53





# Métodos de un paso. Métodos de tipo Runge-Kutta.

## 1.1. Métodos de un paso: consistencia, estabilidad y convergencia.

Consideramos el problema de valor inicial (PVI) en ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) de primer orden

$$\begin{cases} y' = f(t, y), t \in [t_0, T], y, f \in D \subseteq \mathbb{R}^m \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad (1.1)$$

siendo  $D \subseteq \mathbb{R}^m$  abierto y convexo.

Para poder garantizar la existencia y unicidad de solución  $y(t)$ , definida al menos en un entorno del punto inicial  $t_0$ , asumiremos que la función  $f(t, y)$  verifica las siguientes hipótesis:

(H1)  $f \in C([t_0, T] \times \bar{D})$ .

(H2)  $\|f(t, y) - f(t, z)\| \leq L\|y - z\|, t \in [t_0, T], \forall y, z \in \bar{D}$

En cuyo caso, pondremos  $f \in C_L([t_0, T] \times \bar{D})$ , donde  $L$  es una constante de Lipschitz de  $f$  (respecto de la variable  $y$ ) y  $\|\cdot\|$  una norma arbitraria prefijada en  $\mathbb{R}^m$ .

### Nota 1.1

1. Bajo las hipótesis (H1)-(H2), el PVI admite solución única  $y(t)$  definida al menos localmente alrededor de  $t = t_0$ . Esta propiedad es consecuencia del Teorema de Existencia y Unicidad de Cauchy-Peano.
2. A lo largo de la memoria, asumiremos que  $f \in C^p([t_0, T] \times D)$ , para algún  $p \geq 1$  determinado, con el objetivo de estudiar la convergencia de métodos numéricos para aproximar la solución exacta de (1.1).

Tomamos una partición de  $[t_0, T]$ ,  $t_0 < t_1 < \dots < t_n < t_{n+1} < \dots < t_N = T$  con  $h_n := t_{n+1} - t_n$ ,  $0 \leq n \leq N - 1$ . Tenemos que si  $y(t)$  es solución (1.1) en el intervalo  $[t_0, T]$ , entonces:

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) &= y(t_n + h_n) = y(t_n) + h_n y'(t_n) + \mathcal{O}(h_n^2) \\ &= y(t_n) + h_n f(t_n, y(t_n)) + \mathcal{O}(h_n^2), \quad h_n \rightarrow 0. \end{aligned}$$

El método de Euler explícito está definido por la recurrencia

$$y_{n+1} = y_n + h_n \cdot f(t_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots, N - 1.$$

Desde el punto de vista geométrico,  $y_{n+1}$  representa la aproximación en el tiempo  $t_{n+1}$  que se obtiene al trazar la recta que pasa por  $(t_n, y_n)$  con vector director  $f(t_n, y_n)$ .

**Nota 1.2** Se define el error de discretización local en  $t = t_n$  como el error que comete el método tras dar un paso de tamaño  $h_n$  al partir de la solución exacta  $y_n = y(t)$ . Por ejemplo, para el método de Euler,

$$l(t_n, h_n) := y(t_n + h_n) - [y(t) + h_n \cdot f(t_n, y(t))]$$

Obsérvese que, si asumimos  $y \in C^2([t_0, T])$ , el error local se puede acotar como sigue

$$\|l(t, h)\| \leq \frac{Y_2}{2} \cdot h^2, \text{ con } Y_2 := \max_{t \in [t_0, T]} \|y''(t)\|$$

**Nota 1.3** Dado un método numérico que calcula aproximaciones  $y_n$  a la solución exacta  $y(t_n)$ , para  $0 \leq n \leq N$ , se denominan errores globales del método a las cantidades  $\varepsilon_n = \|y(t_n) - y_n\|$ ,  $0 \leq n \leq N$ .

El método de Euler explícito forma parte de una familia de métodos numéricos que computan una aproximación  $y_{n+1}$  a la solución en  $t_{n+1} = t_n + h_n$  utilizando la aproximación  $y_n$  en el punto  $t = t_n$ , donde  $h_n$  es el tamaño de paso. Estos métodos se denominan métodos de un paso.

### Ejemplo 1.1

1. Método de Euler implícito:

$$y_{n+1} = y_n + h_n \cdot f(t_{n+1}, y_{n+1}), \quad h_n = t_{n+1} - t_n$$

2.  $\theta$ -métodos:

$$y_{n+1} = y_n + (1 - \theta) \cdot h_n \cdot f(t_n, y_n) + \theta \cdot h_n \cdot f(t_{n+1}, y_{n+1}), \text{ con } \theta \in [0, 1]$$

3. Regla trapezoidal explícita:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h_n}{2} \cdot f(t_n, y_n) + \frac{h_n}{2} \cdot h_n \cdot f(t_{n+1}, y_n + h_n \cdot f(t_n, y_n))$$

4. Regla trapezoidal implícito ( $\theta$ -método con  $\theta = \frac{1}{2}$ ):

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h_n}{2} \cdot [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})]$$

5. Regla explícita del punto medio (método de Runge de orden dos):

$$y_{n+1} = y_n + h_n \cdot f(t_n + \frac{h_n}{2}, y_n + \frac{h_n}{2} f(t_n, y_n))$$

6. Regla implícita del punto medio:

$$y_{n+1} = y_n + h_n \cdot f(t_n + \frac{h_n}{2}, \frac{y_n + y_{n+1}}{2})$$

7. Método de Heun de orden 3:

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_n, y_n) \\ K_2 &= f(t_n + \frac{h_n}{3}, y_n + \frac{h_n}{3} K_1) \\ K_3 &= f(t_n + \frac{2h_n}{3}, y_n + \frac{2h_n}{3} K_2) \\ y_{n+1} &= y_n + h_n \cdot (\frac{1}{4} K_1 + \frac{3}{4} K_3) \end{aligned}$$

8. Método de Kutta de orden 4:

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_n, y_n) \\ K_2 &= f\left(t_n + \frac{h_n}{2}, y_n + \frac{h_n}{2} K_1\right) \\ K_3 &= f\left(t_n + \frac{h_n}{2}, y_n + \frac{h_n}{2} K_2\right) \\ K_4 &= f(t_n + h_n, y_n + h_n \cdot K_3) \\ y_{n+1} &= y_n + h_n \cdot \left(\frac{1}{6} K_1 + \frac{1}{3} K_2 + \frac{1}{3} K_3 + \frac{1}{6} K_4\right) \end{aligned}$$

Se puede formular un método de un paso usando la notación de Henrici [2, Cap. 1]

$$y_{n+1} = y_n + h_n \cdot \phi(t_n, y_n, h_n)$$

donde  $\phi(t, y, h)$  se denomina función de incremento del método. El método es implícito cuando  $\phi$  está definida implícitamente por  $f$  y explícito en caso contrario.

**Ejemplo 1.2**

1. Euler explícito:  $\phi(t, y, h) = f(t, y)$
2. Runge:  $\phi(t, y, h) = f\left(t + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} f(t, y)\right)$
3. Euler implícito:  $\phi(t, y, h) = f\left(t + h, y + h \cdot \phi\right)$

**Definición 1.1** Dado el PVI (1.1) verificando las hipótesis (H1)-(H2), el operador de error local del método de paso  $h$  en el punto  $(t, z)$  es:

$$L[t, z, h] := y(t+h; t, z) - [z + h \cdot \phi(t, z, h)]$$

donde  $y(t+h; t, z)$  es la solución exacta de la EDO con valor inicial  $y(t) = z$  y  $\phi$  la función incremento del método. Además, si  $z$  varía a lo largo de una curva integral, el error local se puede dar como:

$$l(t, h) := L[t, y(t), h] = y(t+h) - y(t) - h \cdot \phi(t, y(t), h)$$

**Ejemplo 1.3** Para el método de Euler explícito:

$$\begin{aligned} l(t, h) &= y(t+h) - y(t) - h \cdot y'(t) = \int_t^{t+h} [y'(s) - y'(t)] ds \\ \|l(t, h)\| &\leq h \cdot \sup_{|s-t| \leq h} \|y'(s) - y'(t)\| = h \cdot w_h(y') \end{aligned}$$

donde  $w_\delta(g) := \sup_{|x-y| \leq \delta} \|g(x) - g(y)\|$  es el módulo de continuidad de tamaño  $\delta$  de la función  $g$ .

**Definición 1.2** Un método de un paso que verifique las hipótesis (H1)-(H2) se dice consistente si cumple  $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\|l(t, h)\|}{h} = 0$  uniformemente en  $t \in [t_0, T]$ , para cualquier curva integral  $y(t)$  de la EDO  $y' = f(t, y)$ ; en otras palabras, cuando

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0 : 0 < |h| < \delta : \|l(t, h)\| \leq \varepsilon \cdot |h|, \forall t \in [t_0, T].$$

Se puede extender esta definición cuando  $f \in C^p([t_0, T] \times D)$ , en cuyo caso diremos que el método es consistente de orden  $p$ , con  $p \geq 1$ , si para toda curva integral  $y(t)$  existen  $K, \delta > 0$  tales que

$$\|l(t, h)\| \leq K \cdot |h|^{p+1}, \forall |h| \leq \delta, \forall t \in [t_0, T]$$

**Ejemplo 1.4** El método de Euler explícito es consistente, puesto que  $\|\frac{l(t,h)}{h}\| \leq w_h(y') \rightarrow 0$ ,  $h \rightarrow 0$ ,  $\forall t \in [t_0, T]$  ( $y'$  es continua). Además, si  $f \in C^1$ , entonces  $y \in C^2$  y el método sería consistente de orden 1:

$$l(t, h) = h^2 \cdot \int_0^1 (1 - \theta) y''(t + \theta h) d\theta \Rightarrow \|l(t, h)\| \leq \frac{Y_2}{2} \cdot h^2.$$

**Teorema 1.1 (Caracterización de consistencia).**

Sea  $\phi(t, y, h) \in C([t_0, T] \times D \times (0, \bar{h}])$  la función de incremento de un método de un paso para el sistema  $y' = f(t, y)$ . El método es consistente si y solo si

$$\phi(t, y, h) = f(t, y), \forall t, y.$$

**Demostración:** Teniendo en cuenta que

$$\frac{l(t,h)}{h} = \frac{y(t+h) - y(t) - h \cdot y'(t)}{h} - [\phi(t, y(t), h) - f(t, y(t))],$$

que  $\phi$  es continua, y que  $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(t+h) - y(t) - h \cdot y'(t)}{h} = 0$ , la demostración es inmediata. ■

**Definición 1.3** Un método de un paso con función de incremento  $\phi$  se denomina estable si existen constantes  $\delta, K > 0$  tales que para cualquier partición  $P$  de  $[t_0, T]$  con diámetro  $|P| \leq \delta$  verifica que las secuencias

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h_n \cdot \phi(t_n, y_n, h_n), & n \geq 0, \\ y_0 \text{ dado,} \end{cases} \quad (1.2)$$

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = \bar{y}_n + h_n \cdot \phi(t_n, \bar{y}_n, h_n) + \eta_{n+1}, & n \geq 0, \\ \bar{y}_0 = y_0 + \eta_0, \end{cases} \quad 0 \leq n \leq N-1 \quad (1.3)$$

cumplen, para cualquier conjunto de perturbaciones  $\{\eta_j\}_{j=0}^N$ , que

$$\|\bar{y}_n - y_n\| \leq K \cdot \sum_{j=0}^n \|\eta_j\|, \quad 0 \leq n \leq N.$$

**Teorema 1.2.** Si la función incremento  $\phi(t, y, h)$  de un método de un paso es lipschitziana respecto de  $y$  en  $[t_0, T] \times D \times (0, \bar{h}]$  entonces el método es estable.

**Demostración:**

Sea  $L_\phi$  una constante de Lipschitz de  $\phi$  respecto de  $y$ . Entonces:

$$\|\bar{y}_{n+1} - y_{n+1}\| \leq \|\bar{y}_n - y_n\| \cdot (1 + h_n \cdot L_\phi) + \|\eta_{n+1}\| \leq e^{L_\phi(t_{n+1} - t_n)} \cdot \|\bar{y}_n - y_n\| + \|\eta_{n+1}\|$$

Inductivamente:

$$\begin{aligned} \|\bar{y}_n - y_n\| &= \|\eta_n\| + e^{L_\phi(t_n - t_{n-1})} \cdot \|\bar{y}_{n-1} - y_{n-1}\| \\ &\leq \|\eta_n\| + \|\eta_{n-1}\| \cdot e^{L_\phi(t_n - t_{n-1})} + e^{L_\phi(t_n - t_{n-2})} \cdot \|\bar{y}_{n-2} - y_{n-2}\| \\ &\leq \|\eta_n\| + \|\eta_{n-1}\| \cdot e^{L_\phi(t_n - t_{n-1})} + \|\eta_{n-2}\| \cdot e^{L_\phi(t_n - t_{n-2})} + \dots + \\ &\quad + \|\eta_1\| \cdot e^{L_\phi(t_n - t_1)} + \|\eta_0\| \cdot e^{L_\phi(t_n - t_0)} \\ &\leq e^{L_\phi(T - t_0)} \cdot \sum_{j=0}^n \|\eta_j\|, \quad 0 \leq n \leq N \end{aligned}$$

Tomando  $K = e^{L_\phi(T - t_0)}$ , llegamos a que el método es estable. ■

**Definición 1.4** Un método de un paso se dice convergente si  $\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0$  tal que para toda partición  $P$  de  $[t_0, T]$ ,  $t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$ , con diámetro  $|P| < \delta$  se tiene que

$$\max_{t_n \in P} \|y(t_n) - y_n\| < \varepsilon,$$

en otras palabras, un método de un paso será convergente cuando

$$\lim_{|P| \rightarrow 0} \max_{0 \leq n \leq N} \|y(t_n) - y_n\| = 0.$$

**Definición 1.5** Sea la EDO  $y' = f(t, y)$  verificando las hipótesis (H1) y (H2) con  $f \in C^p([t_0, T] \times D)$ , para un cierto  $p \geq 1$ . Se dice que un método de un paso es convergente de orden  $p$ , si dada cualquier curva integral  $y(t)$  existen  $K, \delta > 0$ , tales que para toda partición  $P$  de  $[t_0, T]$  con  $|P| < \delta$  se tiene que

$$\max_{t_n \in P} \|y(t_n) - y_n\| \leq K \cdot h^p, \text{ con } h = |P|.$$

A continuación, se establece una relación entre convergencia, consistencia y estabilidad para métodos de un paso.

**Teorema 1.3.** *Sea  $\phi$  la función incremento de un método de un paso tal que  $\phi(t, y, h)$  es continua en  $[t_0, T] \times D \times [0, \bar{h}]$  y lipschitziana respecto de  $y$ .*

1. *Si el método es consistente entonces es convergente.*
2. *Si además  $f \in C^p([t_0, T] \times D)$  y el método es consistente de orden  $p$ , entonces es convergente de orden  $p$ .*

**Demostración:**

1. Sea  $\varepsilon > 0$ , por consistencia del método, existe  $\delta > 0$  tal que para  $|h| < \delta$ ,  $\|\phi(t, h)\| \leq \varepsilon \cdot |h|$ . Sea  $P$  una partición de  $[t_0, T]$  con  $|P| < \delta$ . Entonces

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h_n \cdot \phi(t_n, y(t_n), h_n) + l_n, \quad 0 \leq n \leq N - 1$$

con  $l_n = l(t_n, h_n)$ . Denotemos  $d_n := \|y(t_n) - y_n\|$ , donde  $\{y_n\}_{n=0}^N$  son las soluciones numéricas dadas por el método:

$$y_{n+1} = y_n + h_n \cdot \phi(t_n, y, h_n), \quad 0 \leq n \leq N - 1$$

Puesto que  $\phi$  es lipschitziana respecto de  $y$ :

$$d_{n+1} = \|y(t_{n+1}) - y_{n+1}\| \leq (1 + h_n \cdot L_\phi) \|y(t_n) - y_n\| + \|l_n\|, \quad 0 \leq n \leq N - 1$$

Por tanto:

$$d_n \leq e^{L_\phi(t_n - t_{n-1})} \cdot d_{n-1} + \|l_{n-1}\| \leq e^{L_\phi(t_n - t_0)} \cdot \sum_{j=0}^{n-1} \|l_j\| \leq e^{L_\phi(T - t_0)} \cdot \sum_{j=0}^{N-1} \|l_j\|$$

para cada  $0 \leq n \leq N$ . Finalmente, como  $\|l_j\| \leq \varepsilon \cdot h_j, 0 \leq j \leq N - 1$ ,

$$d_n \leq e^{L_\phi(T - t_0)} \varepsilon \sum_{j=0}^{N-1} h_j = (T - t_0) \cdot e^{L_\phi(T - t_0)} \cdot \varepsilon = K \cdot \varepsilon.$$

Con lo cuál, el método es convergente.

2. La prueba es análoga a la realizada en 1. ■

## 1.2. Métodos de tipo Runge-Kutta

A continuación, se presentan los métodos de tipo Runge-Kuta (RK), una familia de métodos de un paso. Un método RK de  $s$  etapas aplicado al PVI (1.1) para avanzar con paso  $h > 0$  desde  $t = t_0$  hasta  $t_1 = t_0 + h$  computando  $y_1 \simeq y(t_0 + h)$  se define de la siguiente manera:

$$\begin{cases} K_i = f(t_0 + c_i \cdot h, y_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j), & 1 \leq i \leq s, \\ y_1 = y_0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i K_i, \end{cases} \quad (1.4)$$

donde  $K_1, \dots, K_s \in \mathbb{R}^m$  se denominan etapas internas del método. Los coeficientes  $\{c_i\}_{i=1}^s$ ,  $\{b_i\}_{i=1}^s$  y  $\{a_{ij}\}_{i,j=1}^s$  definen al método RK. De manera compacta, el método RK se puede representar mediante la tabla:

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

que se denomina tabla de Butcher del método, con  $c := (c_1, \dots, c_s)^T$ ,  $A := (a_{ij})_{i,j=1}^s$  y  $b := (b_1, \dots, b_s)^T$ . Por otro lado, denotaremos  $e := (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s$  en el resto de esta memoria.

**Nota 1.4** Puede observarse que, en general, la ecuación de etapas de un método RK es un sistema implícito no lineal de dimensión  $s \cdot m$ . No obstante, si  $A$  es triangular inferior estricta, la resolución de la ecuación de etapas es inmediata, puesto que cada etapa  $K_i$  se obtiene explícitamente con las anteriores, y  $K_1 = f(t_0 + c_1 \cdot h, y_0)$ . En este caso, el método es explícito.

**Ejemplo 1.5** Todos los métodos del ejemplo (1.1) son métodos RK. [1, Sec. 23]

1. Euler explícito:  $\begin{cases} K_1 = f(t_0, y_0) \\ y_1 = y_0 + h \cdot K_1 \end{cases} \equiv \frac{0|0}{1}$
2. Euler implícito:  $\begin{cases} K_1 = f(t_0 + h, y_0 + h \cdot K_1) \\ y_1 = y_0 + h \cdot K_1 \end{cases} \equiv \frac{1|1}{1}$
3.  $\theta$ -métodos:  $\begin{cases} K_1 = f(t_0, y_0) \\ K_2 = f(t_0 + h, y_0 + h \cdot [(1 - \theta)K_1 + \theta K_2]) \\ y_1 = y_0 + h \cdot [(1 - \theta) \cdot K_1 + \theta \cdot K_2] \end{cases} \equiv \frac{0|0 \ 0}{1|1-\theta \ \theta} \quad \frac{0|0 \ 0}{1-\theta \ \theta}$
4. Regla trapezoidal explícita:  $\begin{cases} K_1 = f(t_0, y_0) \\ K_2 = f(t_0 + h, y_0 + h \cdot K_1) \\ y_1 = y_0 + h \cdot [\frac{1}{2} \cdot K_1 + \frac{1}{2} \cdot K_2] \end{cases} \equiv \frac{0|0 \ 0}{1|1 \ 0} \quad \frac{0|0 \ 0}{\frac{1}{2} \ \frac{1}{2}}$
5. Regla trapezoidal implícita  $\equiv \theta$ -método con  $\theta = \frac{1}{2}$ .
6. Método de Runge de orden 2 (Regla explícita del punto medio):  $\begin{cases} K_1 = f(t_0, y_0) \\ K_2 = f(t_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2} \cdot K_1) \\ y_1 = y_0 + h \cdot K_2 \end{cases} \equiv \frac{0|0 \ 0}{\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0} \quad \frac{0|0 \ 0}{\frac{1}{2} \ \frac{1}{2}}$

7. Regla implícito del punto medio:  $\begin{cases} K_1 = f(t_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}K_1) \\ y_1 = y_0 + h \cdot K_1 \end{cases} \equiv \frac{\frac{1}{2} | \frac{1}{2}}{1}$

8. Heun de orden 3: 
$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ \hline \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} & \end{array}$$

9. Kutta de orden 4: 
$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \end{array}$$

**Nota 1.5** Podemos expresar un método  $RK(A, b, c)$  utilizando las siguientes formulaciones, equivalentes a (1.4):

$$\begin{cases} Y_i = y_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_0 + c_j h, Y_j), & 1 \leq i \leq s, \\ y_1 = y_0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i f(t_0 + c_i h, Y_i), \end{cases} \tag{1.5}$$

$$\begin{cases} g_i = h \cdot f(t_0 + c_i h, y_0 + \sum_{j=1}^s a_{ij} \cdot g_j), & 1 \leq i \leq s, \\ y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i g_i, \end{cases} \tag{1.6}$$

Con el siguiente resultado, aseguramos que la ecuación de etapas (1.4) admite una única solución  $K_i = K_i(h)$ ,  $1 \leq i \leq s$ , para un  $h$  suficientemente pequeño.

**Teorema 1.4 (Existencia y unicidad de solución para la ecuación de etapas de un método RK).**

Sea  $f : [t_0, T] \times D \rightarrow \mathbb{R}^m$  continua y lipschitz respecto de  $y$ , con constante de lipschitz  $L$ , y  $h_0 = (L \cdot \|A\|_\infty)^{-1}$  donde  $A$  es la matriz de coeficientes del método RK. Entonces, la ecuación de etapas (1.4) admite una solución única:

$$K_i = K_i(h), \quad 1 \leq i \leq s, \text{ para } |h| < h_0.$$

Además, si  $f \in C^p([t_0, T] \times D)$ ,  $p \geq 1$ , entonces  $K_i = K_i(h) \in C^p(-h_0, h_0)$ ,  $1 \leq i \leq s$ .

**Nota 1.6** Tenemos que  $\|A\|_\infty = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ , para  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ .

**Demostración:**

Definimos los supervectores  $K = (K_1^T, \dots, K_s^T)^T \in \mathbb{R}^{s \cdot m}$  y

$$F(h, K) = (f(t_0 + c_1 h, y_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{1j} K_j)^T, \dots, f(t_0 + c_s h, y_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{sj} K_j)^T) \in \mathbb{R}^{s \cdot m}.$$

La ecuación de etapas (1.4) equivale a resolver la ecuación implícita

$$K = F(h, K).$$

Como consecuencia del Teorema del Punto Fijo, bastará comprobar que  $F$  es contractiva (respecto a  $K$ ) para  $|h| < h_0$ . Considerando la norma en  $\mathbb{R}^{s \cdot m}$ :  $\|V\| := \max_{1 \leq i \leq s} \|V_i\|$ ,  $V = (V_1^T, \dots, V_s^T)^T$ ,  $V_i \in \mathbb{R}^m$ ,  $1 \leq i \leq s$ , tenemos que

$$\begin{aligned} \|F(h, K) - F(h, \tilde{K})\| &\leq L \cdot |h| \cdot \max_{1 \leq i \leq s} \left\| \sum_{j=1}^s a_{ij}(K_j - \tilde{K}_j) \right\| \\ &\leq L \cdot |h| \cdot \left( \max_{1 \leq i \leq s} \left( \sum_{j=1}^s |a_{ij}| \right) \right) \cdot \|K - \tilde{K}\| \end{aligned}$$

siendo la constante de contracción  $L \cdot |h| \cdot \|A\|_\infty < 1$  por hipótesis ( $|h| < h_0$ ). En definitiva, el teorema del Punto Fijo asegura la existencia y unicidad de solución para  $K = K(h)$ , si  $|h| < h_0$ . Además, teniendo en cuenta el Teorema de la Función Implícita (en  $\mathbb{R}^{m \cdot s}$ ) y la función  $G(h, K) = K - F(h, K)$ , vemos que

$$\frac{\partial G_i}{\partial K_j} = \frac{\partial K_i}{\partial K_j} - h a_{ij} \cdot \frac{\partial f}{\partial y}(t_0 + c_i \cdot h, y_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j),$$

y por tanto  $\frac{\partial G_i}{\partial K_j}(h = 0, K) = \begin{cases} I_m, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$ ,  $1 \leq i, j \leq s$ , siendo  $I_m$  la matriz

identidad de orden  $m$ . Así,  $\frac{\partial G}{\partial K}(h = 0, K) = I_{sm}$ , y, en particular,  $|\frac{\partial G}{\partial K}(h = 0, K)| \neq 0$ . El Teorema de la Función Implícita permite asegurar entonces que la solución de  $K = F(h, K)$  tiene por lo menos la misma regularidad que  $F$ , esto es,  $K = K(h) \in C^p(-h_0, h_0)$ . ■

**Nota 1.7** Observamos que todos los métodos del ejemplo (1.5) verifican  $\sum_{i=1}^s b_i = 1$  y

$\sum_{j=1}^s a_{ij} = c_i$ ,  $1 \leq i \leq s$ , o en notación vectorial  $b^T e = 1$ ,  $A \cdot e = c$ . Un método de interés práctico debe cumplir estas dos condiciones, debido al siguiente resultado.

**Teorema 1.5.** *Sea un método  $RK(A, b, c)$  verificando  $A \cdot e = c$  y  $b^T e = 1$ . Entonces el método da la misma solución numérica para el PVI no autónomo*

$$\begin{cases} y' = f(t, y), & y, f \in \mathbb{R}^m \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad (1.7)$$

que sobre el problema autónomo equivalente

$$\begin{cases} z' = g(z), & z, g \in \mathbb{R}^{m+1} \\ z(t_0) = z_0 \end{cases} \quad (1.8)$$

donde  $\begin{pmatrix} t \\ y \end{pmatrix}$ ,  $z_0 = \begin{pmatrix} t_0 \\ y_0 \end{pmatrix}$ ,  $g(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ f(t, y) \end{pmatrix}$ .

### **Demostración:**

El método  $RK(A, b, c)$  aplicado a (1.8) viene dado por:

$$\begin{cases} Z_i = z_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_0 + c_j h, Z_j), & 1 \leq i \leq s, \\ z_1 = z_0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i f(t_0 + c_i h, Z_i). \end{cases}$$



Usando la formulación alternativa (1.5). Tomando  $Z_i = \begin{pmatrix} \tau_i \\ Y_i \end{pmatrix}$ ,  $1 \leq i \leq s$ , y  $z_1 = \begin{pmatrix} t_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$ , tenemos:

$$\begin{cases} \tau_i = t_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} \cdot 1, & 1 \leq i \leq s, \\ Y_i = y_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} f(\tau_j, Y_j), & 1 \leq i \leq s, \\ t_1 = t_0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i \cdot 1, \\ y_1 = y_0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i f(\tau_i, Y_i), \end{cases}$$

Dado que  $Ae = c$  y  $b^T e = 1$ ,  $\tau_i = t_0 + c_i h$ ,  $1 \leq i \leq s$ , y  $t_1 = t_0 + h$ . Así, llegamos a

$$\begin{cases} Y_i = y_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_0 + c_j h, Y_j), & 1 \leq i \leq s, \\ y_1 = y_0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i f(t_0 + c_i h, Y_i). \end{cases}$$

Por unicidad de solución para la ecuación de etapas, esta última expresión es la solución numérica del método  $RK(A, b, c)$  aplicado a (1.7). ■

**Nota 1.8** A continuación, consideramos el estudio de consistencia y estabilidad de métodos Runge-Kutta. Como aplicación de los resultados de la sección 1.1, se deducirá la convergencia de los métodos.

**Teorema 1.6.** *Un método  $RK(A, b, c)$  es consistente si y sólo si  $b^T e = 1$ .*

**Demostración:**

Dado que la solución de avance del método  $RK(A, b, c)$  es

$$y_1 = y_0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i K_i,$$

la función incremento del método es  $\phi(t, y, h) = \sum_{i=1}^s b_i K_i$ , donde  $K_i = K_i(t, y, h)$ ,  $1 \leq i \leq s$ , son funciones continuas en  $[t_0, T] \times D \times [0, h_0]$ , (ver Teorema 1.4). Además:

$$\phi(t, y, 0) = \sum_{i=1}^s b_i K_i(t, y, 0) = \sum_{i=1}^s b_i f(t, y) = f(t, y) \Leftrightarrow \sum_{i=1}^s b_i = 1.$$

La consistencia es consecuencia del Teorema 1.1. ■

**Teorema 1.7.** *Sea  $\phi(t, y, h) = \sum_{i=1}^s b_i K_i(t, y, h)$  la función incremento de un método  $RK(A, b, c)$ . Entonces  $\phi$  es lipschitziana respecto de  $y$  en  $[t_0, T] \times D \times [0, h_0]$ , para  $h_0 < [L \cdot \rho(|A|)]^{-1}$ , con constante de lipschitz*

$$L_\phi = L \cdot |b|^T \cdot (I - h_0 \cdot L \cdot |A|)^{-1} \cdot e,$$

siendo  $|b| := (|b_1|, \dots, |b_s|)^T$ ,  $|A| := (|a_{ij}|)_{i,j=1}^s$ ,  $L$  una constante de lipschitz de  $f(t, y)$  respecto de  $y$ , y  $\rho(\cdot)$  el radio espectral de una matriz.

**Corolario 1.1** Si un método RK(A,b,c) cumple  $b^T e = 1$  entonces es convergente.

**Demostración:** (Teorema 1.7)

Pongamos  $\phi := \phi(t, y, h) = \sum_{i=1}^s b_i K_i$  y  $\bar{\phi} := \phi(t, \bar{y}, h) = \sum_{i=1}^s b_i \bar{K}_i$ , donde

$$K_i = f(t + c_i h, y + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j), \quad \bar{K}_i = f(t + c_i h, \bar{y} + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} \bar{K}_j), \quad 1 \leq i \leq s.$$

Dado que  $f$  es Lipschitz respecto de  $y$ :

$$\begin{aligned} \|\phi - \bar{\phi}\| &\leq \sum_{i=1}^s |b_i| \cdot \|K_i - \bar{K}_i\|, \text{ con} \\ \|K_i - \bar{K}_i\| &\leq L \cdot \left( \|y - \bar{y}\| + |h| \cdot \sum_{j=1}^s |a_{ij}| \cdot \|K_j - \bar{K}_j\| \right), \quad 1 \leq i \leq s. \end{aligned}$$

Definiendo  $\Delta K := (\|K_1 - \bar{K}_1\|, \dots, \|K_s - \bar{K}_s\|)^T$ , tenemos que

$$\Delta K \leq L \cdot \|y - \bar{y}\| \cdot e + |h_0| \cdot L \cdot |A| \cdot \Delta K,$$

esto es  $(I - h_0 L |A|) \Delta K \leq L \cdot \|y - \bar{y}\| e$ , donde la desigualdad anterior se entiende componente a componente. Ahora bien,  $\rho(h_0 \cdot L \cdot |A|) = h_0 \cdot L \cdot \rho(|A|) < 1$  por hipótesis, y por el teorema de Neumann

$$I - h_0 \cdot L \cdot |A|, \text{ es inversible y } [I - h_0 \cdot L \cdot |A|]^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} (h_0 \cdot L \cdot |A|)^l.$$

En particular,  $[I - h_0 \cdot L \cdot |A|]^{-1}$  tiene todas sus componentes no negativas. Por lo tanto:

$$\Delta K \leq L \cdot \|y - \bar{y}\| \cdot (I - h_0 \cdot L \cdot |A|)^{-1} \cdot e.$$

Finalmente tenemos que

$$\|\phi - \bar{\phi}\| \leq |b|^T \cdot \Delta K \leq (L \cdot |b|^T (I - h_0 \cdot L \cdot |A|)^{-1} \cdot e) \cdot \|y - \bar{y}\|.$$

■

# Condiciones de orden de métodos RK.

## 2.1. Diferenciales elementales y árboles.

Consideramos un sistema diferencial autónomo  $y' = f(y)$ ,  $y, f \in \mathbb{R}^m$  con  $f$  suficientemente regular. Usando la regla de la cadena, la derivada de un producto y la simetría de las derivadas parciales, se pueden expresar las derivadas de orden superior de  $y$  en términos de las derivadas de Fréchet de  $f$ , [3, Sec. III.1] y [4, Sec. II.2],

$$\begin{aligned} \dot{y} &= f(y) \\ \ddot{y} &= f'(y)\dot{y} \\ y^{(3)} &= f''(y)(\dot{y}, \dot{y}) + f'(y)\ddot{y} \\ y^{(4)} &= f'''(y)(\dot{y}, \dot{y}, \dot{y}) + 3f''(y)(\dot{y}, \ddot{y}) + f'(y)y^{(3)} \end{aligned}$$

Utilizando las expresiones  $y^{(q)}$  anteriores, tenemos:

$$\begin{aligned} \dot{y} &= f \\ \ddot{y} &= f'(f) \\ y^{(3)} &= f''(f, f) + f'(f'(f)) \\ y^{(4)} &= f'''(f, f, f) + 3f''(f'(f), f) + f'(f''(f, f)) + f'(f'(f'(f))) \end{aligned}$$

donde se ha omitido la dependencia de  $y$  para evitar sobrecargar la notación. A cada término de las expresiones anteriores, se le denomina diferencial elemental.

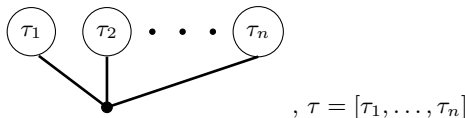
Denotaremos las diferenciales elementales por  $F(\tau)$ , donde  $\tau$  representará un grafo, en forma de “árbol”. Dicho grafo estará asociado a la diferencial elemental.



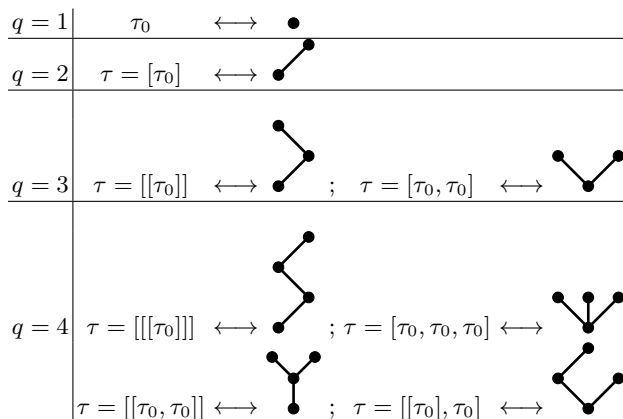
Por lo tanto, se asociará a la función  $f$  con un vértice, y a las derivadas  $k$ -ésimas  $f^{(k)}$  a un vértice del que saldrán  $k$  ramas.

**Definición 2.1 (Árboles T)** . El conjunto de árboles  $T$  se define recursivamente de la siguiente manera:

1. El grafo  $\bullet$  con un único vértice pertenece a  $T$ , y se denota por  $\tau_0$ .
2. Si  $\tau_1, \dots, \tau_n \in T$ , entonces el grafo que se obtiene al injertar  $\tau_1, \dots, \tau_n$  a un nuevo vértice también pertenece a  $T$ . Pondremos  $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_n]$ .



**Ejemplo 2.1** A continuación se presentan los árboles que existen con 1, 2, 3 y 4 nodos:



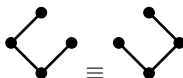
**Definición 2.2** Para un árbol  $\tau \in T$ , la diferencial elemental  $F(\tau)$  es una aplicación  $F(\tau) : \mathbb{R}^n \leftarrow \mathbb{R}^n$  definida recursivamente por  $F(\tau_0) = f$  y  $F(\tau)(y) = f^{(n)}(y)(F(\tau_1)(y), \dots, F(\tau_n)(y))$ , para  $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_n]$ .

**Definición 2.3** Llamamos orden del árbol  $\tau$  al número de vértices de dicho árbol, y lo denotamos por  $\varrho(\tau)$ . Obsérvese que, si  $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_n]$  entonces  $\varrho(\tau) = 1 + \varrho(\tau_1) + \dots + \varrho(\tau_n)$ .

**Definición 2.4** Se llama cardinal del árbol  $\tau$  al coeficiente que acompaña a la diferencial elemental  $F(\tau)(y)$  en la derivada de  $y$  de orden  $\varrho(\tau)$  ( $y^{(\varrho(\tau))}$ ). Lo denotamos por  $\alpha(\tau)$ .

**Ejemplo 2.2** Si  $\tau = [[\tau_0], \tau_0]$  entonces  $\tau = \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad / \\ \bullet \end{array}$ , con  $F(\tau)(y) = f''(f'(f), f)$ ,  $\varrho(\tau) = 4$  y  $\alpha(\tau) = 3$ .

**Nota 2.1** Para un árbol  $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_n]$  no distinguimos el orden de colocación de sus hijos  $\tau_1, \dots, \tau_n$ .



**Teorema 2.1.** La derivada de orden  $q$  de la solución exacta  $y = y(t)$  satisface

$$y^{(q)}(t_0) = \sum_{\varrho(\tau)=q} \alpha(\tau)F(\tau)(y_0), \text{ si } f \in C^{q-1},$$

y si  $f$  es analítica en un entorno de  $y_0$

$$y(t_0 + h) = y_0 + \sum_{\tau \in T} \alpha(\tau)F(\tau)(y_0) \frac{h^{\varrho(\tau)}}{\varrho(\tau)!}.$$

**Nota 2.2 (Desarrollo en serie de la solución de un método Runge-Kutta)** .  
 Estudiemos ahora el desarrollo en potencias de  $h$  para la solución de un método RK en la forma:

$$\begin{cases} g_i = h \cdot f(u_i), & u_i = y_0 + \sum_{j=1}^s a_{ij} g_j, \quad 1 \leq i \leq s, \\ y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i g_i. \end{cases}$$

Observamos que  $y_1^{(q)}|_{h=0} = \sum_i b_i q_i^{(q)}|_{h=0}$ . Ahora bien, por la regla de Leibniz para la derivada enésima de un producto, tenemos que

$$g_i^{(q)} = h \cdot [f(u_i)]^{(q)} + \binom{q}{1} [f(u_i)]^{(q-1)}, \text{ y para } h = 0: g_i^{(q)}|_{h=0} = q \cdot [f(u_i)]_{h=0}^{(q-1)}.$$

Aplicando la regla de la cadena:

$$\dot{g}_i = 1 \cdot f(y_0)$$

$$\ddot{g}_i = 2 \cdot f'(y_0) \dot{u}_i$$

$$g_i^{(3)} = 3 \cdot (f''(y_0)(\dot{u}_i, \dot{u}_i) + f'(y_0)(\ddot{u}_i))$$

$$g_i^{(4)} = 4 \cdot (f'''(y_0)(\dot{u}_i, \dot{u}_i, \dot{u}_i) + 3f''(y_0)(\ddot{u}_i, \dot{u}_i) + f'(y_0)(u_i^{(3)}))$$

evaluando en  $h = 0$ . Teniendo en cuenta que  $u_i^{(q)} = \sum_j a_{ij} g_j^{(q)}$ , se sigue entonces:

$$\dot{g}_i = f$$

$$\dot{u}_i = 1 \cdot (\sum_j a_{ij}) f$$

$$\ddot{g}_i = (1 \cdot 2) (\sum_j a_{ij}) f'(f)$$

$$\ddot{u}_i = (1 \cdot 2) (\sum_j a_{ij} (\sum_k a_{jk}) f'(f)) = (1 \cdot 2) \cdot (\sum_{j,k} a_{ij} a_{jk}) f'(f)$$

$$g_i^{(3)} = (1 \cdot 3) (\sum_j a_{ij} (\sum_k a_{ik}) f''(f, f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot (\sum_{j,k} a_{ij} a_{jk}) f'(f'(f)))$$

$$u_i^{(3)} = (1 \cdot 3) \sum_j a_{ij} (\sum_k a_{jk} \sum_l a_{jl}) f''(f, f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot (\sum_{j,k,l} a_{ij} a_{jk} a_{kl}) f'(f'(f))$$

donde las derivadas de Fréchet de  $f$  están referidas a  $y_0$ . Así, en general, por inducción tenemos que, [3, Sec. III.1]

$$\begin{cases} g_i^{(q)}|_{h=0} = \sum_{\varrho(\tau)=q} \gamma(\tau) \cdot \phi_i(\tau) \cdot \alpha(\tau) \cdot F(\tau)(y_0), \\ u_i^{(q)}|_{h=0} = \sum_{\varrho(\tau)=q} \gamma(\tau) \cdot \chi_i(\tau) \cdot \alpha(\tau) \cdot F(\tau)(y_0), \end{cases} \quad 1 \leq i \leq s, \quad q \geq 1,$$

donde la función escalar  $\gamma(\tau)$  verifica

$$\begin{cases} \gamma(\tau_0) = 1 \\ \gamma(\tau) = \varrho(\tau) \cdot \gamma(\tau_1) \cdot \gamma(\tau_2) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_n), \text{ si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_n], \end{cases}$$

y se denomina densidad del árbol  $\tau$ . Por otra parte, los coeficientes  $\phi_i(\tau)$  y  $\chi_i(\tau)$  verifican:

$$\begin{cases} \chi_i(\tau) = \sum_j a_{ij} \phi_j(\tau), \quad 1 \leq i \leq s, \quad \forall \tau \in T, \\ \phi_i(\tau_0) = 1 \\ \phi_i(\tau) = \chi_i(\tau_1) \cdot \dots \cdot \chi_i(\tau_n), \quad \tau = [\tau_1, \dots, \tau_n]. \end{cases}$$

Denotando  $\chi(\tau) = (\chi_1(\tau), \dots, \chi_s(\tau))^T \in \mathbb{R}^s$ ,  $\phi(\tau) = (\phi_1(\tau), \phi_2(\tau), \dots, \phi_n(\tau))^T \in \mathbb{R}^s$ , entonces tenemos que:

$$\begin{aligned} \phi(\tau_0) &= e \\ \phi(\tau) &= \chi(\tau_1) \bullet \dots \bullet \chi(\tau_n) = [A\phi(\tau_1)] \bullet \dots \bullet [A\phi(\tau_n)], \quad \text{si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_n], \end{aligned} \quad (2.1)$$

donde  $\bullet$  denota el producto de vectores componente a componente. Luego, en definitiva, para la solución de avance tendremos:

$$\begin{aligned}
 y_1 &= y_0 + \sum_i b_i g_i = y_0 + \sum_i b_i \left( \sum_{q=1}^{\infty} g_i^{(q)}|_{h=0} \cdot \frac{h^q}{q!} \right) \\
 &= y_0 + \sum_i b_i \cdot \left( \sum_{q=1}^{\infty} \frac{q!}{h^q} \cdot \left( \sum_{\varrho(\tau)=q} \gamma(\tau) \cdot \phi_i(\tau) \cdot \alpha(\tau) F(\tau)(y_0) \right) \right) \\
 &= y_0 + \sum_{\tau \in T} \gamma(\tau) \left( \sum_i b_i \phi_i(\tau) \right) \alpha(\tau) F(\tau)(y_0) \frac{h^{\varrho(\tau)}}{\varrho(\tau)!} \\
 &= y_0 + \sum_{\tau \in T} \omega(\tau) \alpha(\tau) F(\tau)(y_0) \frac{h^{\varrho(\tau)}}{\varrho(\tau)!}
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

siendo

$$\omega(\tau) = \gamma(\tau) b^T \phi(\tau), \tag{2.3}$$

con  $\phi(\tau)$  definida en (2.1). Comparando el desarrollo de la solución numérica  $y_1$  con el de la solución exacta del Teorema 2.1, se deduce entonces que un método RK es consistente de orden  $p$  si y solo si

$$\omega(\tau) = 1, \quad \forall \tau \in T, \text{ con } \varrho(\tau) = p, \text{ esto es:}$$

$$b^T \phi(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}, \quad \forall \tau \in T, \text{ con } \varrho(\tau) \leq p.$$



**Ejemplo 2.3** Para el árbol de orden 9

$$\begin{aligned}
 \phi(\tau) &= (AAe) \bullet (Ae) \bullet (A(Ae \bullet A(Ae \bullet Ae))) = Ac \bullet c \bullet [A(c \bullet Ac^2)], \quad \text{con } c = Ae \\
 \gamma(\tau) &= 9 \cdot (2) \cdot (1) \cdot (5 \cdot 3) = 270.
 \end{aligned}$$

## 2.2. B-series.

**Definición 2.5** El coeficiente de simetría  $\sigma(\tau)$  de un árbol  $\tau$  se define de manera recurrente como

$$\begin{aligned}
 \sigma(\tau_0) &= 1 \\
 \sigma(\tau) &= \sigma(\tau_1) \cdot n_1! \cdot \sigma(\tau_2) \cdot n_2! \cdot \dots \cdot \sigma(\tau_m) \cdot n_m!
 \end{aligned}$$

Si  $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_2, \dots, \tau_n, \dots, \tau_n]$ , con  $\tau_i \neq \tau_j, \forall i \neq j$ .

**Definición 2.6** Dada una aplicación  $a : T \cup \{\phi\} \rightarrow \mathbb{R}$ , se llama B-serie a una serie formal de la forma

$$B(a, y) = a(\phi)y + \sum_{\tau \in T} \frac{a(\tau)}{\sigma(\tau)} F(\tau)(y) h^{\varrho(\tau)}.$$

**Ejemplo 2.4**

1.  $y_0$  se expresa como B-serie tomando  $a(\phi) = 1, a(\tau) = 0, \forall \tau \in T$ .
2.  $h \cdot f(y_0)$  se expresa como B-serie tomando  $a(\phi) = 0, a(\tau_0) = 1, a(\tau) = 0, \forall \tau \in T$ , con  $\varrho(\tau) \geq 2$ . Observar que  $\sigma(\tau_0) = 1$ .

3.  $y(t_0 + h)$  también se expresa como B-serie. En efecto, teníamos del Teorema 2.1:

$$y(t_0 + h) = y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{\alpha(\tau)}{\varrho(\tau)!} F(\tau)(y_0) h^{\varrho(\tau)}$$

y, por lo tanto, basta con elegir  $a(\phi) = 1$ ,  $a(\tau) = \frac{\sigma(\tau) \cdot \alpha(\tau)}{\varrho(\tau)!}$ ,  $\forall \tau \in T$ .

4. La solución de avance de un método RK se expresa como B-serie:

$$y_1 = y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{\gamma(\tau) \cdot b^T \phi(\tau) \cdot \alpha(\tau)}{\varrho(\tau)!} F(\tau)(y_0) h^{\varrho(\tau)}, \text{ con}$$

$$a(\phi) = 1, a(\tau) = \frac{\sigma(\tau) \cdot \gamma(\tau) \cdot b^T \cdot \phi(\tau) \alpha(\tau)}{\varrho(\tau)!}, \quad \forall \tau \in T.$$

**Teorema 2.2 (Composición de B-series).** *Sea  $a : T \cup \{\phi\} \rightarrow \mathbb{R}$  una aplicación cumpliendo  $a(\phi) = 1$ . Entonces, la correspondiente B-serie insertada en  $hf(\cdot)$  es nuevamente una B-serie. Esto es,  $h \cdot f(B(a, y)) = B(a', y)$ , donde  $a'(\phi) = 0$ ,  $a'(\tau_0) = 1$  y  $a'(\tau) = a(\tau_1) \cdot \dots \cdot a(\tau_n)$ , para  $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_n]$ .*

**Demostración:**

Ya que  $a(\phi) = 1$ , tenemos que  $B(a, y) = y + \mathcal{O}(h)$ , y por lo tanto  $h \cdot f(B(a, y))$  también puede ser desarrollada en serie formal en torno a  $y$ . Tenemos que

$$\begin{aligned} B(a, y) - y &= \sum_{\tau \in T} \frac{a(\tau)}{\sigma(\tau)} F(\tau)(y) h^{\varrho(\tau)}. \text{ Entonces} \\ h \cdot f(B(a, y)) &= h \cdot f(y + [B(a, y) - y]) \\ &= h \cdot \sum_{m \geq 0} \frac{1}{m!} f^{(m)}(y) \cdot [B(a, y) - y, \dots, B(a, y) - y] \\ &= h \cdot \sum_{m \geq 0} \frac{1}{m!} \cdot \sum_{\tau_1, \dots, \tau_n \in T} \frac{a(\tau_1) \cdot \dots \cdot a(\tau_n)}{\sigma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \sigma(\tau_n)} \cdot h^{\varrho(\tau_1) + \dots + \varrho(\tau_n)} \\ &\quad \cdot f^{(m)}(y) [F(\tau_1)(y), \dots, F(\tau_n)(y)] \\ &= \sum_{m \geq 0} \sum_{\tau_1, \dots, \tau_n \in T} \frac{a(\tau_1) \cdot \dots \cdot a(\tau_n)}{\sigma(\tau_1) \cdot n_1! \cdot \dots \cdot \sigma(\tau_n) \cdot n_m!} \cdot \frac{n_1! \cdot \dots \cdot n_m!}{m!} \cdot h^{1 + \varrho(\tau_1) + \dots + \varrho(\tau_m)} \\ &\quad \cdot f^{(m)}(y) [F(\tau_1)(y), \dots, F(\tau_m)(y)] \\ &= \sum_{\tau \in T} \frac{a'(\tau)}{\sigma(\tau)} \cdot F(\tau)(y) \cdot h^{\varrho(\tau)} \end{aligned}$$

donde la última igualdad es consecuencia de que hay  $\binom{m}{n_1, n_2, \dots, n_m}$  posibilidades para escribir el árbol  $\tau$  en la forma  $[\tau_1, \dots, \tau_m]$ . ■

**Nota 2.3** Este teorema previo también se puede usar para obtener las condiciones de orden de un método RK. No obstante, lo usaremos aquí para obtener una expresión cerrada para el cardinal  $\alpha(\tau)$ .

Partiendo de la ecuación de etapas  $g_i = h \cdot f(y_0 + \sum_j a_{ij} g_j)$ ,  $1 \leq i \leq s$ , observamos

que  $g_i = B(\hat{\phi}_i, y_0)$ , donde

$$\begin{cases} \hat{\phi}_i(\phi) = 0, \hat{\phi}_i(\tau_0) = 1, \text{ y por el teorema previo:} \\ \hat{\phi}_i(\tau) = (\sum a_{ij} \hat{\phi}_j(\tau_1)) \cdot \dots \cdot (\sum a_{ij} \hat{\phi}_j(\tau_n)), \text{ si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_n]. \end{cases}$$

En forma vectorial, para  $\hat{\phi}(\tau) = (\hat{\phi}_1(\tau), \dots, \hat{\phi}_s(\tau))^T$ :

$$\begin{cases} \hat{\phi}(\tau_0) = e \\ \hat{\phi}(\tau) = [A\hat{\phi}(\tau_1)] \bullet \dots \bullet \hat{\phi}(\tau_n), \text{ si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_n]. \end{cases}$$

Por tanto,  $\hat{\phi}(\tau) = \phi(\tau)$ . Luego, el desarrollo en B-serie de  $y_1$  será:

$$y_1 = y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{b^T \phi(\tau)}{\sigma(\tau)} F(\tau)(y_0) h^{e(\tau)}$$

e igualando con el desarrollo (2.2):  $y_1 = y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{\gamma(\tau) b^T \phi(\tau) \alpha(\tau)}{\varrho(\tau)!} F(\tau)(y_0) h^{e(\tau)}$ , sigue que  $\frac{\gamma(\tau) \cdot \alpha(\tau)}{\varrho(\tau)!} = \frac{1}{\sigma(\tau)}$ . Por lo tanto,  $\alpha(\tau) = \frac{\varrho(\tau)!}{\sigma(\tau) \cdot \gamma(\tau)}$ .

**Nota 2.4** Observar que en el Teorema 2.1 habíamos obtenido para  $y(t_0 + h)$  la B-serie:

$$y(t_0 + h) = y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{1}{\sigma(\tau)} \left[ \frac{\sigma(\tau) \cdot \alpha(\tau)}{\varrho(\tau)!} \right] \cdot F(\tau)(y_0) \cdot h^{e(\tau)} = y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{1}{\sigma(\tau) \gamma(\tau)} \cdot F(\tau)(y_0) \cdot h^{e(\tau)}$$

y comparando con  $y_1 = y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{b^T \phi(\tau)}{\sigma(\tau)} F(\tau)(y_0) \cdot h^{e(\tau)}$ , se deducen nuevamente las condiciones de orden  $p$ :  $b^T \phi(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}$ , para  $1 \leq \varrho(\tau) \leq p$ .

### 2.3. Árboles etiquetados.

Sea  $y_i(t)$  la componente  $i$ -ésima de  $y(t)$  y considerando nuevamente sus derivadas sucesivas:

$$\begin{aligned} y_i'(t_0) &= f_i(y_0) \equiv f_i \quad \bullet^i \\ y_i''(t_0) &= \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial y_j} f_i(y(t_0)) \cdot y_j'(t_0) \equiv \sum_j f_i^j f_j \quad \begin{array}{c} \bullet^j \\ | \\ \bullet^i \end{array} \\ y_i'''(t_0) &= \sum_{j,k} (f_i^{j,k} f_j f_k + f_i^j f_j^k f_k) \quad \begin{array}{c} \bullet^k \\ | \\ \bullet^j \\ | \\ \bullet^i \end{array} \quad \begin{array}{c} \bullet^k \\ | \\ \bullet^i \end{array} \\ y_i^{iv}(t_0) &= \sum_{j,k,l} (f_i^{j,k,l} f_j f_k f_l + f_i^{j,k} f_j^l f_k f_l + f_i^{j,k} f_j f_k^l f_l \\ &\quad + f_i^{j,l} f_j^k f_k f_l + f_i^j f_j^{k,l} f_k f_l + f_i^j f_j^k f_k^l f_l) \quad \begin{array}{c} \bullet^l \\ | \\ \bullet^k \\ | \\ \bullet^j \\ | \\ \bullet^i \end{array} \quad \begin{array}{c} \bullet^l \\ | \\ \bullet^j \\ | \\ \bullet^i \end{array} \quad \begin{array}{c} \bullet^l \\ | \\ \bullet^k \\ | \\ \bullet^i \end{array} \\ &\quad \begin{array}{c} \bullet^k \\ | \\ \bullet^j \\ | \\ \bullet^i \end{array} \quad \begin{array}{c} \bullet^k \\ | \\ \bullet^l \\ | \\ \bullet^j \\ | \\ \bullet^i \end{array} \quad \begin{array}{c} \bullet^l \\ | \\ \bullet^k \\ | \\ \bullet^j \\ | \\ \bullet^i \end{array} \end{aligned}$$

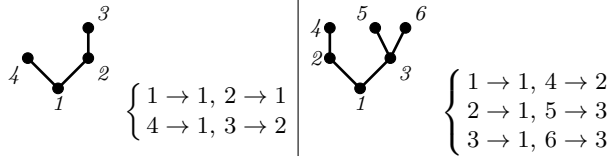
Observamos entonces que, inductivamente, fijados  $q$  índices  $i_1, i_2, \dots, i_q$ , la derivada  $q$ -ésima  $y_{i_1}^{(q)}$  contiene  $(q-1)!$  derivadas elementales asociadas a los índices  $i_1, i_2, \dots, i_q$ . En otras palabras, esto nos dice que



$$\sum_{\substack{\tau \in T \\ \varrho(\tau)=q}} \alpha(\tau) = (q-1)!$$

**Definición 2.7** Un árbol etiquetado (o árbol monótonamente ordenado) de orden  $q \geq 1$  es una aplicación  $\tau : \{1, 2, \dots, q\} \rightarrow \{1, 2, \dots, q\}$  tal que  $\tau(1) = 1$  y  $\tau(i) < i$ ,  $\forall i \in \{2, \dots, q\}$ . Consideramos  $LT_q$  el conjunto de árboles etiquetados de orden  $q$  y  $LT = \bigcup_{q \geq 1} LT_q$ . Convenimos que  $LT_0 = \{\phi\}$  y que  $F(\phi)(y_0) = y_0$ .

**Ejemplo 2.5**



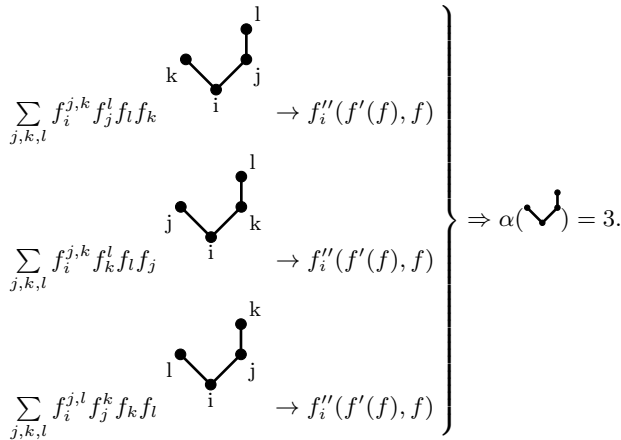
**Teorema 2.3.** La derivada de orden  $q$  de la solución exacta  $y = y(t)$  está dada por

$$y^{(q)}(t_0) = \sum_{\tau \in LT_q} F(\tau)(y_0), \text{ si } f \in C^{q-1},$$

y si  $f$  es analítica en un entorno de  $y_0$

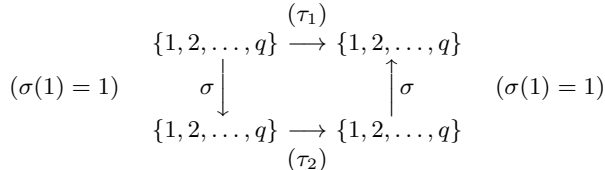
$$y(t_0 + h) = y_0 + \sum_{\tau \in LT} F(\tau)(y_0) \frac{h^{\varrho(\tau)}}{\varrho(\tau)!}.$$

**Nota 2.5** Observamos que, para  $q \geq 4$ , existen árboles etiquetados de orden  $q$  que dan lugar a la misma diferencial elemental:




**Nota 2.6** En el conjunto de árboles etiquetados de orden  $q$ ,  $LT_q$ , definimos la siguiente relación de equivalencia:

$\tau_1 R \tau_2 \Leftrightarrow \exists \sigma : \{1, \dots, q\} \rightarrow \{1, \dots, q\}$  biyectiva, con  $\sigma(1) = 1$ , tal que  $\tau_1 = \sigma^{-1} \circ \tau_2 \circ \sigma$ .



Así, tenemos que  $LT_q/R = T_q$ , conjunto de árboles de orden  $q$  sin etiquetar. Además, si  $[\tau] \in T_q$  entonces  $\alpha([\tau]) = \#[\tau]$ , cardinal de la clase de equivalencia.

**Ejemplo 2.6** Para  $q=5$ ,  $\tau \equiv$  ,  $\alpha(\tau) = \frac{4 \cdot 3}{2} = 6$

**Proposición:** Si un método RK(A,b,c) tiene orden  $p$ , entonces

$$\begin{aligned} y(t_0 + h) - y_{RK}(t_0 + h) &= \sum_{q=p+1}^{\infty} \left( \sum_{\tau \in T_q} \alpha(\tau) \cdot (1 - \omega(\tau)) F(\tau)(y_0) \right) \frac{h^q}{q!} \\ &= \sum_{q=p+1}^{\infty} \left( \sum_{\tau \in LT_q} (1 - \omega(\tau)) F(\tau)(y_0) \right) \frac{h^q}{q!} \end{aligned}$$

donde  $\omega(\tau)$  se define como en (2.3). ■

**Definición 2.8** Se denomina término principal de error local del método RK a

$$\begin{aligned} TPEL(t_0, h) &= \left( \sum_{\tau \in T_{p+1}} \alpha(\tau) \cdot (1 - \omega(\tau)) F(\tau)(y_0) \right) \frac{h^{p+1}}{(p+1)!} \\ &= \left( \sum_{\tau \in LT_{p+1}} (1 - \omega(\tau)) F(\tau)(y_0) \right) \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}. \end{aligned}$$

Para comparar métodos del mismo orden (en problemas no stiff) se suele considerar la norma  $l_2$  de los coeficientes de error:

$$TPEL = \frac{1}{(p+1)!} \sqrt{\sum_{\tau \in LT_{p+1}} (1 - \omega(\tau))^2} = \frac{1}{(p+1)!} \sqrt{\sum_{\tau \in T_{p+1}} \alpha(\tau) \cdot (1 - \omega(\tau))^2}.$$

Así, entre métodos del mismo orden se tendrá preferencia por métodos con TPEL pequeño.

**Nota 2.7** No se conoce una fórmula explícita para el número de árboles  $a_q$  de orden  $q$  (en  $T_q$ ). Sin embargo, un resultado debido a Cayley (1857) indica que ([1, p.142] y [4, p.154])

$$a_1 + a_2x + a_3x^2 + a_4x^3 + \dots = (1-x)^{-a_1} \cdot (1-x^2)^{-a_2} \cdot (1-x^3)^{-a_3} \dots$$

## 2.4. Acotación del error local y global para métodos RK.

Consideremos el PVI (1.1), con las condiciones necesarias sobre  $f$  de modo que la solución sea única. Tomemos además un entorno tubular de la solución:

$$T_\delta = \{(t, y) / t \in [0, T], \|y - y(t)\| < \delta\}.$$

Sea un método RK(A,b), con  $c = A \cdot e$ , dado por (1.4). El error local del método RK es  $l(t, h) = y(t + h) - y_{RK}(t + h; t, y(t))$ , donde

$$y_{RK}(t + h; y(t), t) = y(t) + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i K_i(t, h).$$

**Teorema 2.4.** *Si el método RK(A,b) (1.4) es de orden  $p$  y  $f \in C^p(T_\delta)$ , entonces existe  $h^* > 0$  tal que*

$$\|l(t, h)\| \leq \frac{h^{p+1}}{(p+1)!} \cdot (M_{p+1} + (p+1) \cdot \sum_{i=1}^s |b_i| M_{p,i}), \quad 0 \leq h \leq h^*, \text{ donde}$$

$$M_{p+1} = \max_{t \in [0, T]} \|y^{(p+1)}(t)\| \text{ y } M_{p,i} = \max_{\substack{h \in [0, h^*] \\ t \in [0, T]}} \left\| \frac{\partial^p K_i}{\partial h^p}(t, h) \right\|, \quad 1 \leq i \leq s.$$

**Demostración:**

Para  $t$  fijo:  $y(t + h) = \sum_{l=0}^p \frac{h^l}{l!} \cdot y^{(l)}(t) + \frac{h^{p+1}}{p!} \cdot \int_0^1 (1-s)^p y^{(p+1)}(t + sh) ds$ , mientras que:

$$K_i(t, h) = \sum_{l=0}^{p-1} \frac{h^l}{l!} K_i^{(l)}(t, 0) + \frac{h^p}{(p-1)!} \int_0^1 (1-s)^{p-1} K_i(t, s \cdot h) ds, \quad 1 \leq i \leq s,$$

para  $0 \leq h \leq h^*$ , donde las derivadas de  $K_i$  son respecto a  $h$ . Luego, puesto que el método tiene orden  $p$ ,

$$\begin{aligned} y(t + h) - y_{RK}(t + h) &= y(t + h) - \left( y(t) + h \cdot \sum_{i=1}^s K_i(t, h) b_i \right) \\ &= \left( \sum_{l=0}^p \frac{h^l}{l!} y^{(l)}(t) + \frac{h^{p+1}}{p!} \int_0^1 (1-s)^p y^{(p+1)}(t + sh) ds \right) \\ &\quad - \left( y(t) + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i \left[ \sum_{l=0}^{p-1} \frac{h^l}{l!} K_i^{(l)}(t, 0) + \frac{h^p}{(p-1)!} \int_0^1 (1-s)^{p-1} K_i^{(p)}(t, sh) ds \right] \right) \\ &= \frac{h^{p+1}}{p!} \left[ \int_0^1 (1-s)^p y^{(p+1)}(t + sh) ds - p \cdot \sum_{i=1}^s b_i \int_0^1 (1-s)^{p-1} K_i^{(p)}(t, sh) ds \right]. \end{aligned}$$

Por tanto,

$$\|l(t, h)\| \leq \frac{h^{p+1}}{p!} \left[ \frac{1}{p+1} M_{p+1} + p \sum_{i=1}^s |b_i| \frac{1}{p} M_{p,i} \right] = \frac{h^{p+1}}{(p+1)!} \cdot (M_{p+1} + (p+1) \cdot \sum_{i=1}^s |b_i| M_{p,i}).$$

■

**Teorema 2.5 (Convergencia).** *Con la misma notación del teorema previo, si un RK(A,b) tiene orden  $p$  y  $f \in C^p(T_\delta)$ , entonces existe  $h^* > 0$  tal que para toda  $P$  partición de  $[0, T]$  con  $h_{m\acute{a}x} = |P| \leq h^*$  se tiene que*

$$\|y(t_n) - y_n\| \leq (h_{m\acute{a}x})^p \cdot \frac{C_{p+1}}{L_\phi} (e^{L_\phi T} - 1), \quad 0 \leq n \leq N,$$

donde  $C_{p+1} = \frac{1}{(p+1)!} \cdot (M_{p+1} + (p+1) \cdot \sum_{i=1}^s |b_i| M_{p,i})$  y  $L_\phi$  es la constante de Lipschitz de la función incremento del método  $\phi(t, y, h)$  en  $T_\delta \times [0, h^*]$ .

**Demostración:**

Denotemos  $y(t_n) = \hat{y}$  e  $y_n$  la solución de avance del RK tras  $n$  pasos. Entonces

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h_n \phi(t_n, y_n, h_n) \\ \hat{y}_{n+1} = \hat{y}_n + h_n \phi(t_n, \hat{y}_n, h_n) + l_{n+1} \end{cases}, \quad 0 \leq n \leq N-1,$$

siendo  $l_{n+1} = l(t_n, h_n)$ , con  $\|l_{n+1}\| \leq h_n^{p+1} \cdot C_{p+1}$ ,  $0 \leq h_n \leq h^*$ .

Denotemos  $\varepsilon_n = \|\hat{y}_n - y_n\|$ ,  $0 \leq n \leq N$ . Entonces

$$\varepsilon_{n+1} \leq \varepsilon_n + h_n L_\phi \cdot \varepsilon_n + \|l_{n+1}\| = (1 + h_n L_\phi) \varepsilon_n + \|l_{n+1}\| \leq e^{h_n L_\phi} \varepsilon_n + \|l_{n+1}\|.$$

Por tanto:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &\leq \|l_n\| + e^{L_\phi(t_n - t_{n-1})} \|l_{n-1}\| + e^{L_\phi(t_n - t_{n-2})} \|l_{n-2}\| + \dots + e^{L_\phi(t_n - t_1)} \|l_1\| + e^{L_\phi t_n} \|l_0\| \\ &= e^{L_\phi t_n} \cdot \left[ \|l_n\| e^{-L_\phi t_n} + \|l_{n-1}\| e^{-L_\phi t_{n-1}} + \dots + \|l_1\| e^{-L_\phi t_1} \right] \\ &\leq C_{p+1} e^{L_\phi t_n} \cdot \left[ h_{n-1}^{p+1} e^{-L_\phi t_n} + h_{n-2}^{p+1} e^{-L_\phi t_{n-1}} + \dots + h_0^{p+1} e^{-L_\phi t_1} \right] \\ &\leq C_{p+1} e^{L_\phi t_n} h_{\max}^p \cdot \left[ h_{n-1} e^{-L_\phi t_n} + h_{n-2} e^{-L_\phi t_{n-1}} + \dots + h_0 e^{-L_\phi t_1} \right] \\ &\leq C_{p+1} e^{L_\phi t_n} h_{\max}^p \cdot \int_0^{t_n} e^{-L_\phi t} dt \\ &= e^{L_\phi t_n} \cdot C_{p+1} \cdot h_{\max}^p \left( \frac{1 - e^{-L_\phi t_n}}{L_\phi} \right) \leq h_{\max}^p \frac{C_{p+1}}{L_\phi} (e^{L_\phi T} - 1). \end{aligned}$$

■

## Métodos RK implícitos de alto orden y de colocación.

### 3.1. Condiciones simplificadoras de orden.

Para un método RK(A,b,c) general, introduciremos las siguientes condiciones simplificadoras:

- $B(p)$ :  $b^T c^{j-1} = \frac{1}{j}$ ,  $1 \leq j \leq p$ .
- $C(q)$ :  $Ac^{j-1} = \frac{1}{j}c^j$ ,  $1 \leq j \leq q$ .
- $D(r)$ :  $(bc^{j-1})^T = \frac{1}{j}(b - bc^j)^T$ ,  $1 \leq j \leq r$ .

#### Nota 3.1

1.  $B(p)$  equivale a decir que la fórmula de cuadratura

$$\int_0^1 f(x)dx \simeq \sum_{i=1}^s b_i f(c_i) \quad (3.1)$$

tiene grado de precisión  $p-1$ . En efecto:

$$\int_0^1 x^{j-1} dx = \sum_{i=1}^s b_i c_i^{j-1}, \quad 1 \leq j \leq p \Leftrightarrow \frac{1}{j} = b^T c^{j-1}, \quad 1 \leq j \leq p.$$

2.  $C(q)$  equivale a decir que las fórmulas de cuadratura

$$\int_0^{c_i} f(x)dx \simeq \sum_{j=1}^s a_{ij} f(c_j), \quad 1 \leq i \leq s. \quad (3.2)$$

tienen grado de precisión  $q-1$ .

3. Un resultado célebre de J. Butcher (1964) establece que si un método RK cumple  $B(p)$ ,  $C(q)$ ,  $D(r)$ , con  $p \leq 2q + 2$  y  $p \leq q + r + 1$ , entonces el método es de orden al menos  $p$ . En otras palabras, el orden del método es mayor o igual que  $\min\{p, 2q + 2, q + r + 1\}$ . Véase el Teorema 3.4.

**Nota 3.2** Consideramos un método RK(A,b,c) aplicado a la EDO  $y' = f(t, y)$

$$\begin{cases} Y_i = y_n + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j \cdot h, Y_j), & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, Y_i). \end{cases}$$

Veamos cómo se obtiene esta formulación a partir de las fórmulas (3.1) y (3.2):

$$\begin{aligned} y(t_n + h) &= y(t_n) + \int_{t_n}^{t_n+h} y'(t) dt = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_n+h} f(t, y(t)) dt \\ &= y(t_n) + h \cdot \int_0^1 f(t_n + sh, y(t_n + sh)) ds \\ &\simeq y(t_n) + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, y(t_n + c_i h)). \end{aligned}$$

Análogamente:

$$\begin{aligned} y(t_n + c_i h) &= y(t_n) + h \int_0^{c_i} f(t_n + sh, y(t_n + sh)) ds \\ &\simeq y(t_n) + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n c_j h, y(t_n + c_j h)), \quad 1 \leq i \leq s. \end{aligned}$$

Se obtiene así la formulación de un método RK tal que  $Y_i \simeq y(t_n + c_i h)$ ,  $1 \leq i \leq s$ . El siguiente teorema precisa el orden en la aproximación.

**Teorema 3.1.** *Si el método RK verifica  $C(q)$ , entonces las etapas internas del método  $\{Y_i\}_{i=1}^s$  satisfacen:*

$$Y_i - y(t_n + c_i h) = \mathcal{O}(h^{q+1}), \quad h \rightarrow 0, \quad 1 \leq i \leq s.$$

**Demostración:** Si el método cumple  $C(q)$ , por el desarrollo de Taylor, tenemos que

$$y(t_n + c_i h) = y(t_n) + y'(t_n) c_i h + \frac{y''(t_n)}{2!} (c_i h)^2 + \cdots + \frac{y^{(q)}(t_n)}{q!} (c_i h)^q + \mathcal{O}(h^{q+1}).$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} y(t_n) + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} y'(t_n + c_j h) &= y(t_n) + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} \left\{ y'(t_n) + y''(t_n) c_j h \right. \\ &\quad \left. + \frac{y^{(3)}(t_n)}{2!} (c_j h)^2 + \cdots + \frac{y^{(q)}(t_n)}{(q-1)!} (c_j h)^{q-1} + \mathcal{O}(h^q) \right\} \\ &= y(t_n) + h \cdot \left( \sum_{j=1}^s a_{ij} \cdot 1 \right) y'(t_n) + h^2 \cdot \left( \sum_{j=1}^s a_{ij} \cdot c_j \right) y''(t_n) \\ &\quad + \cdots + \frac{h^q}{(q-1)!} \cdot \left( \sum_{j=1}^s a_{ij} \cdot c_j^{q-1} \right) y^{(q)}(t_n) + \mathcal{O}(h^{q+1}) \\ &= y(t_n) + y'(t_n) c_i h + \frac{y''(t_n)}{2!} (c_i h)^2 \\ &\quad + \cdots + \frac{y^{(q)}(t_n)}{q!} (c_i h)^q + \mathcal{O}(h^{q+1}), \end{aligned}$$

puesto que, por  $C(q)$ ,  $Ac^{j-1} = \frac{1}{j} c^j$ ,  $1 \leq j \leq q-1$ . Comparando ambos desarrollos, llegamos a:

$$y(t_n + c_i h) = y(t_n) + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, y(t_n + c_j h)) + \mathcal{O}(h^{q+1}), \quad h \rightarrow 0.$$

Como  $Y_i = y(t_n) + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, Y_j)$ , restando, tenemos que:

$$Y_i - y(t_n + c_i h) = h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} [f(t_n + c_j, Y_j) - f(t_n + c_j h, y(t_n + c_j h))] + \mathcal{O}(h^{q+1}),$$

y, como  $f$  es Lipschitz respecto de  $y$ , sigue que  $Y_i - y(t_n + c_i h) = \mathcal{O}(h^{q+1})$ ,  $h \rightarrow 0$ ,  $1 \leq i \leq s$ . ■

Estudiamos ahora cómo se reducen las condiciones de orden si se impone la condición  $C(q)$ .

**Teorema 3.2.** Si un método  $RK(A, b, c)$  cumple  $C(q)$  entonces  $A\phi(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)} c^{e(\tau)}$ ,  $\forall \tau \in T$ ,  $\varrho(\tau) \leq q$ .

**Demostración:**

Lo probamos por inducción sobre  $q$ . Para  $q = 1$ ,  $A\phi(\tau_0) = A \cdot e = c = \frac{c^{e(\tau_0)}}{\gamma(\tau_0)}$ .

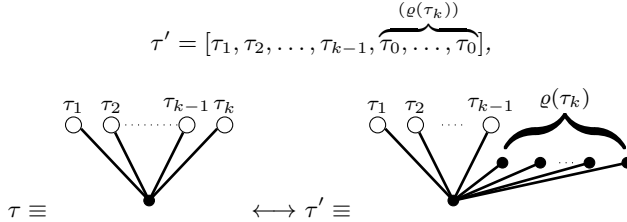
Supongamos cierta la propiedad hasta  $q-1$ ,  $q \geq 2$ , y sea  $\tau \in T$  tal que  $\varrho(\tau) = q$ .

Tendremos  $\tau = [\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n]$ , con  $\varrho(\tau_i) < q$ ,  $\forall i = 1, \dots, n$  y, por tanto

$$\begin{aligned} A\phi(\tau) &= A[A\phi(\tau_1) \bullet \dots \bullet A\phi(\tau_n)] = A \cdot \left[ \frac{c^{e(\tau_1)}}{\gamma(\tau_1)} \bullet \dots \bullet \frac{c^{e(\tau_n)}}{\gamma(\tau_n)} \right] = \\ &= \frac{\varrho(\tau)}{\gamma(\tau)} A \cdot c^{e(\tau)-1} = \frac{\varrho(\tau)}{\gamma(\tau)} \frac{c^{e(\tau)}}{\varrho(\tau)} = \frac{c^{e(\tau)}}{\gamma(\tau)}. \end{aligned}$$

Empleando que  $\gamma(\tau) = \varrho(\tau)\gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_n)$  y  $\varrho(\tau) = 1 + \varrho(\tau_1) + \dots + \varrho(\tau_n)$ . ■

**Corolario 3.1** Sea un  $RK(A, b, c)$  cumpliendo  $C(q)$  y  $\tau = [\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k]$  con  $\varrho(\tau_k) \leq q$ . Se cumple la condición de orden sobre  $\tau$  si y solo si se cumple sobre:



**Demostración:**

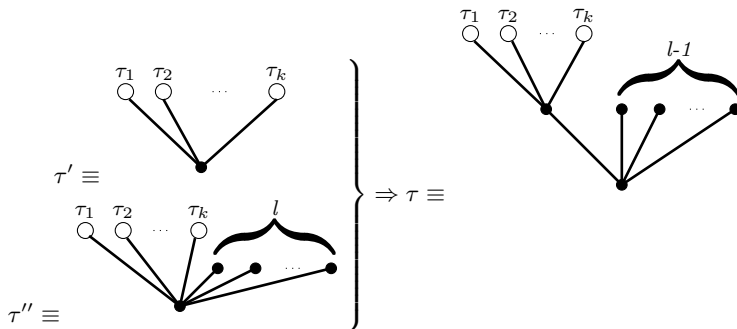
$$\begin{aligned} \omega(\tau) &= \gamma(\tau) b^T \phi(\tau) = \varrho(\tau) \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_k) b^T (A\phi(\tau_1) \bullet \dots \bullet A\phi(\tau_k)) \\ &= \varrho(\tau) \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_{k-1}) b^T (A\phi(\tau_1) \bullet \dots \bullet A\phi(\tau_{k-1}) \bullet c^{e(\tau_k)}) \\ &= \gamma(\tau') b^T \phi(\tau') = \omega(\tau'). \end{aligned}$$

Luego,  $\omega(\tau) = 1$  si y solo si  $\omega(\tau') = 1$ . ■

Veamos ahora cómo se simplifican las condiciones de orden bajo la condición simplificadora  $D(r)$ .

**Teorema 3.3.** Sea un método  $RK(A, b, c)$  cumpliendo  $D(r)$  y  $\tau' = [\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k]$ ,

$\tau = [\tau', \overbrace{\tau_0, \dots, \tau_0}^{(l-1)}]$  y  $\tau'' = [\tau_1, \dots, \tau_k, \overbrace{\tau_0, \dots, \tau_0}^{(l)}]$ . Si se verifican las condiciones de orden sobre  $\tau'$  y  $\tau''$  entonces se verifican sobre  $\tau$ , para cada  $l=1, \dots, r$ .



**Nota 3.3** En la demostración del teorema usaremos la siguiente propiedad del producto de vectores componente a componente  $(u \bullet v)^T w = u^T (v \bullet w) = \sum_{i=1}^n u_i v_i w_i$ .

**Demostración del Teorema 3.3:**

Para el árbol  $\tau$  tenemos:

$$\begin{aligned} \omega(\tau) &= \gamma(\tau) b^T \phi(\tau) = \gamma(\tau) b^T \cdot [A\phi(\tau') \bullet c^{l-1}] = \gamma(\tau) (b \bullet c^{l-1})^T (A\phi(\tau')) = \\ &= \gamma(\tau) \frac{1}{l} (b - b \bullet c^l)^T \phi(\tau') = \frac{\gamma(\tau)}{l} b^T \phi(\tau') - \frac{\gamma(\tau)}{l} b^T (\phi(\tau') \bullet c^l). \end{aligned}$$

Ahora bien,  $\phi(\tau'') = A\phi(\tau_1) \bullet \dots \bullet A\phi(\tau_k) = \phi(\tau') \bullet c^l$ , mientras que

$$\gamma(\tau) = \varrho(\tau) \cdot \gamma(\tau') \cdot 1 \cdot 1 \cdot \dots \cdot 1 = \varrho(\tau) \varrho(\tau') \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_k) \Rightarrow \frac{\gamma(\tau)}{\gamma(\tau')} = \varrho(\tau),$$

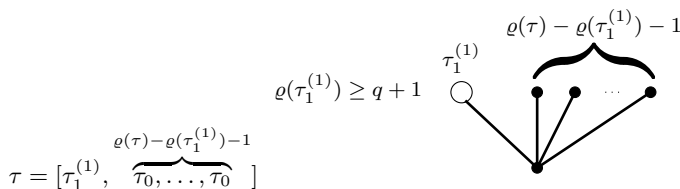
$$\gamma(\tau'') = \varrho(\tau'') \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_k) = \varrho(\tau) \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_k) \Rightarrow \frac{\gamma(\tau)}{\gamma(\tau'')} = \varrho(\tau') = \varrho(\tau) - l.$$

Luego,  $\omega(\tau) = \frac{\gamma(\tau)}{l} \cdot \frac{\omega(\tau')}{\gamma(\tau')} - \frac{\gamma(\tau)}{l} \cdot \frac{\omega(\tau'')}{\gamma(\tau'')} = \frac{\varrho(\tau)}{l} \cdot \omega(\tau') - \frac{\varrho(\tau)-l}{l} \omega(\tau'')$ . De aquí tenemos que si  $\omega(\tau') = 1 = \omega(\tau'')$  entonces  $\omega(\tau) = 1$ . ■

**Teorema 3.4 (Butcher).** Si un  $RK(A, b, c)$  cumple  $B(p)$ ,  $C(q)$  y  $D(r)$ , con  $p \leq 2q + 2$  y  $p \leq q + r + 1$ , entonces el método es de orden  $p$ .

**Demostración:**

Sea  $\tau = [\tau_1^{(1)}, \tau_2^{(1)}, \dots, \tau_{m_1}^{(1)}]$  con  $\varrho(\tau) \leq p$ . Existe a lo sumo un único árbol hijo tal que  $\varrho(\tau_i^{(1)}) \geq q + 1$  (en caso contrario, tendríamos  $p \geq \varrho(\tau) \geq 1 + 2 \cdot (q + 1)$ ). Luego, por la reducción  $C(q)$ , podemos suponer que  $\tau$  es de la forma  $\tau = [\tau_0, \tau_0, \dots, \tau_0]$ , en cuyo caso se satisface la condición de orden por  $B(p)$ , o bien  $\tau$  tiene un único hijo (de orden  $\geq q + 1$  diferente de  $\tau_0$ )



Ahora bien,  $\varrho(\tau) - \varrho(\tau_1^{(1)}) - 1 \leq r - 1$ , puesto que si esto no se diera

$$\varrho(\tau) - \varrho(\tau_1^{(1)}) - 1 \geq r \Rightarrow p \geq \varrho(\tau) \geq r + 1 + \varrho(\tau_1^{(1)}) \geq q + r + 2. \text{ Absurdo.}$$



Luego, por  $D(r)$ , la condición de orden sobre  $\tau$  se reduce a los árboles

$$\begin{aligned} \tau_1^{(1)} &= [\tau_1^{(2)}, \tau_2^{(2)}, \dots, \tau_{m_2}^{(2)}] \quad (\text{para el que } \varrho(\tau_1^{(1)}) < \varrho(\tau) \quad \text{y} \\ \tau'' &= [\tau_1^{(2)}, \tau_2^{(2)}, \dots, \tau_{m_2}^{(2)}, \overbrace{\tau_0, \dots, \tau_0}^{\varrho(\tau) - \varrho(\tau_1^{(1)})}], \quad \text{con } \varrho(\tau_i^{(2)}) < \varrho(\tau_1^{(1)}) < \varrho(\tau). \end{aligned}$$

El mismo razonamiento se aplica ahora a los árboles  $\tau_1^{(1)}$  y  $\tau''$ , y, tras aplicar las reducciones (en algún momento todos los hijos serán de orden  $\leq q$ ), solo quedarán los árboles de máxima ramificación  $[\tau_0, \dots, \tau_0]$  (de orden  $\leq p$ ). Para estos árboles, se satisface la condición de orden, en virtud de  $B(p)$ . ■

### 3.2. Métodos RK implícitos de alto orden.

**Lema 3.1** *Sea un RK(A,b,c) de s etapas verificando B(p). Entonces  $p \leq 2s$ . En particular, no existen métodos de s etapas y orden  $2s+1$ .*

**Demostración:**

Si el método cumpliera  $B(2s + 1)$  entonces, por  $B(2s)$ , la fórmula de cuadratura con nodos  $\{c_i\}_{i=1}^s$  y pesos  $\{b_i\}_{i=1}^s$  tendría grado de precisión al menos  $2s - 1$ :

$$\int_0^1 \phi(x) dx = \sum_{i=1}^s b_i \phi(c_i), \quad \forall \phi \in \Pi_{2s-1}.$$

Luego, esta fórmula de cuadratura es la cuadratura de Gauss de s nodos, que en particular, no tiene grado de precisión  $2s$ :

$$\phi(x) = \prod_{i=1}^s (x - c_i)^2 \in \Pi_{2s} : 0 < \int_0^1 \phi(x) dx \quad \text{y} \quad 0 = \sum_{i=1}^s b_i \phi(c_i).$$

Por tanto,  $B(2s + 1)$  no se puede cumplir. ■

**Lema 3.2** *Sea un RK(A,b,c) de una etapa cumpliendo C(2). Entonces  $A=0=c$  y el método verifica  $C(q)$ ,  $\forall q \geq 1$ .*

**Demostración:**

Es elemental. Denotando  $A = (a)$ ; tenemos que  $a[1,c] = [c, \frac{c^2}{2}] \Rightarrow$

$$\begin{cases} a = c \\ c \cdot (a - \frac{c}{2}) \end{cases} \Rightarrow a = c = 0. \quad \blacksquare$$

**Lema 3.3** *Sea un RK(A,b,c) de s etapas,  $s \geq 2$ , y nodos distintos dos a dos  $c_i \neq c_j$ ,  $\forall i \neq j$ . Si el método cumple  $C(q)$  entonces  $q \leq s$ .*

**Nota 3.4** Un método con nodos distintos dos a dos se dice no confluyente, [5, p.186].

Para métodos confluentes la propiedad anterior no tiene por qué ser cierta. Por ejemplo, para  $A = \begin{bmatrix} a & -a \\ a & -a \end{bmatrix}$ ,  $a \neq 0$ , y  $c = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ , se verifica  $C(q)$ ,  $\forall q \geq 1$ . No obstante, este método sería reducible pues sus etapas son iguales.

**Demostración:** Supongamos por reducción al absurdo que se cumple  $C(s + 1)$ :

$$A \cdot c^{j-1} = \frac{1}{j} c^j, \quad 1 \leq j \leq s + 1.$$

En particular, por  $C(s)$ :  $A \cdot [e|c|c^2|\dots|c^{s-1}] = [c|\frac{c^2}{2}|\frac{c^3}{3}|\dots|\frac{c^s}{s}]$ , siendo  $V = [e|c|c^2|\dots|c^{s-1}]$  una matriz de tipo Vandermonde regular (pues  $c_i \neq c_j$ ,  $\forall i \neq j$ ) y  $M := [c|\frac{c^2}{2}|\dots|\frac{c^s}{s}] = \text{Diag}(c_i)_{i=1}^s \cdot V \cdot \text{Diag}(\frac{1}{i})_{i=1}^s$ . Luego,  $A = \text{Diag}(c_i) \cdot V \cdot \text{Diag}(\frac{1}{i})V^{-1}$  está definida completamente por los nodos. Impongamos ahora la condición  $A \cdot c^s = \frac{1}{s+1}c^{s+1}$ . Como  $\{e, c, \dots, c^{s-1}\}$  es base de  $\mathbb{R}$ , tendremos  $c^s = \sum_{j=1}^s \lambda_{j-1}c^{j-1}$ ,  $\{\lambda_{j-1}\}_{j=1}^s \subset \mathbb{R}^s$ . Luego,  $c^{s+1} = c \bullet c^s = \sum_{j=1}^s \lambda_{j-1} \cdot c^j$ . Entonces, dado que  $V \cdot e_j = c^{j-1}$

$$\begin{aligned} A \cdot c^s &= \text{Diag}(c_i)V\text{Diag}(\frac{1}{i})V^{-1}c^s = \text{Diag}(c_i)V\text{Diag}(\frac{1}{i})V^{-1}\left(\sum_{j=1}^s \lambda_{j-1}c^{j-1}\right) \\ &= \sum_{j=1}^s \lambda_{j-1}\text{Diag}(c_i)V\text{Diag}(\frac{1}{i})e_j = \sum_{j=1}^s \frac{\lambda_{j-1}}{j}\text{Diag}(c_i)Ve_j \\ &= \sum_{j=1}^s \frac{\lambda_{j-1}}{j}\text{Diag}(c_i)c^{j-1} = \sum_{j=1}^s \frac{\lambda_{j-1}}{j}c^j. \end{aligned}$$

Igualando  $A \cdot c^s = \frac{1}{s+1}c^{s+1}$ :  
 $\lambda_0c + \frac{\lambda_1}{2}c^2 + \dots + \frac{\lambda_{s-2}}{s-1}c^{s-1} + \frac{\lambda_{s-1}}{s}(\lambda_0e + \lambda_1c + \dots + \lambda_{s-1}c^{s-1}) = \frac{\lambda_0}{s+1}c + \frac{\lambda_1}{s+1}c^2 + \dots + \frac{\lambda_{s-2}}{s+1}c^{s-1} + \frac{\lambda_{s-1}}{s+1}(\lambda_0e + \lambda_1c + \dots + \lambda_{s-1}c^{s-1})$ .

Igualando componentes respecto a la base  $\{e, c, \dots, c^{s-1}\}$ :

$$\begin{aligned} e: d \frac{\lambda_0 \cdot \lambda_{s-1}}{s} &= \frac{\lambda_0 \cdot \lambda_{s-1}}{s+1} \Rightarrow \lambda_{s-1} = 0 \quad o \quad \lambda_0 = 0 \\ c^j: \frac{\lambda_{j-1}}{j} + \frac{\lambda_{s-1}}{s} \cdot \lambda_j &= \frac{\lambda_{j-1}}{s+1} + \frac{\lambda_{s-1}}{s+1} \cdot \lambda_j, \quad 1 \leq j \leq s-1. \\ \text{Si } \lambda_{s-1} = 0: \frac{\lambda_{j-1}}{j} &= \frac{\lambda_{j-1}}{s+1} \Rightarrow \lambda_{j-1} = 0, \quad 1 \leq j \leq s-1 \end{aligned}$$

$$\text{Si } \lambda_0 = 0, \text{ entonces para } j=1: \frac{\lambda_{s-1}}{s} \cdot \lambda_1 = \frac{\lambda_{s-1}}{s+1} \cdot \lambda_1 \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = 0 \\ o \\ \lambda_{s-1} = 0. \end{cases}$$

Llegamos entonces en todo caso a que  $\lambda_{j-1} = 0, \forall j = 1, \dots, s$ . Pero entonces:

$$c^s = 0 \Rightarrow c_i = 0, \forall i = 1, \dots, s. \text{ Esto es absurdo, pues } c_i \neq c_j, \quad \forall i \neq j. \quad \blacksquare$$

**Lema 3.4** Sea un RK(A,b,c) de s etapas cumpliendo B(s+r), con  $c_i \neq c_j, \forall i \neq j$ , para algún r,  $1 \leq r \leq s$ . Entonces:

- (a)  $C(s) \Rightarrow D(r)$
- (b) Si  $b_i \neq 0, 1 \leq i \leq s$ , entonces  $D(s) \Rightarrow C(r)$ .

**Demostración:**

(a) Sea  $d_j^T := (b \bullet c^{j-1})^T A - \frac{1}{j}(b - b \bullet c^j)^T, 1 \leq j \leq r$ , y veamos que  $d_j = 0, \forall j$ . Consideramos la base  $\{e, c, \dots, c^{s-1}\}$  de  $\mathbb{R}^s$  ( $c_i \neq c_j$ ) y veamos que

$$\begin{aligned} d_j^T \cdot c^{k-1} &= 0, \quad \forall j = 1, \dots, r, \quad \forall k = 1, \dots, s \\ d_j^T \cdot c^{k-1} &= (b \bullet c^{j-1})^T A c^{k-1} - \frac{1}{j}b^T c^{k-1} + \frac{1}{j}(b \bullet c^j)^T \cdot c^{k-1} \\ &= \frac{1}{k} \cdot b^T c^{j+k-1} - \frac{1}{j}b^T c^{k-1} + \frac{1}{j}b^T c^{j+k-1} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{k} \cdot \frac{1}{j+k} - \frac{1}{j \cdot k} + \frac{1}{j \cdot (j+k)} = 0, \quad \forall j = 1, \dots, r, \quad k = 1, \dots, s.$$

(b) Como  $b_i \neq 0, \forall i$ , y  $c_i \neq c_j, \forall i \neq j$ ,  $\{b, b \bullet c, \dots, b \bullet c^{s-1}\}$  es base de  $\mathbb{R}^s$  (ver que la matriz  $[b|b \bullet c|\dots|b \bullet c^{s-1}] = \text{Diag}(b_i) \cdot [e|c|\dots|c^{s-1}]$  es regular). Con esto:

$$\begin{aligned} (b \bullet c^{k-1})^T \cdot [Ac^{j-1} - \frac{1}{j}c^j] &= (b \bullet c^{k-1})^T Ac^{j-1} - \frac{1}{j}b^T c^{j+k-1} \\ &= \frac{1}{k}(b - b \bullet c^k)^T \cdot c^{j-1} - \frac{1}{j}b^T c^{j+k-1} \\ &= \frac{1}{k} \cdot \frac{1}{j} - \frac{1}{k} \cdot \frac{1}{j+k} - \frac{1}{j} \cdot \frac{1}{j+k} = 0, \forall j = 1, \dots, r, \quad \forall k = 1, \dots, s. \end{aligned}$$

Luego,  $Ac^{j-1} - \frac{1}{j}c^j = 0, \forall j = 1, \dots, r.$  ■

**Nota 3.5** Por el Teorema 3.4, si un método cumple  $C(s)$  y  $B(s+r)$ , el orden del método será  $p \geq \min \{s+r, 2s+2, s+r+1\} = s+r$ . En el caso (b) del lema previo,  $p \geq \min \{s+r, 2r+2, s+r+1\} = \min \{s+r, 2r+2\}$ .

**Teorema 3.5 (Métodos RK-Gauss o de Butcher-Kuntzmann).**

Un  $RK(A,b,c)$  de  $s$  etapas tiene orden  $2s$  si y sólo si cumple  $B(2s)$  y  $C(s)$ . Además, existe un único método de orden  $2s$ , cuyos nodos son los ceros del  $s$ -ésimo polinomio ortogonal de Legendre en  $[0,1]$ ,  $L_s(x) = \frac{\partial^s}{\partial x^s}(x^s \cdot (x-1)^s)$ .

**Demostración:**

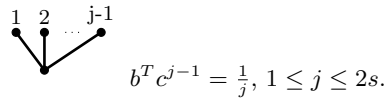
"  $\Leftarrow$  " Si el método cumple  $B(2s)$ , por la demostración del Lema 3.1 entonces sus nodos  $\{c_i\}_{i=1}^s$  y pesos  $\{b_i\}_{i=1}^s$  son los de la correspondiente cuadratura de Gauss. En particular  $b_i > 0, \forall i, c_i \neq c_j, \forall i \neq j$  (y  $\{c_i\}_{i=1}^s$  son las raíces de  $L_s(x)$ ). Como el método cumple  $C(s)$  y  $c_i \neq c_j, \forall i \neq j$  entonces por el Lema 3.4 se verifica  $D(2s-s) = D(s)$ . Finalmente, por el Teorema 3.4, el orden del método es:

$$p \geq \min \{2s, 2s+2, s+s+1\} = 2s.$$

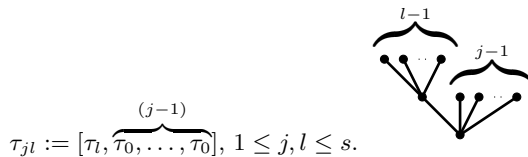
Como  $p \leq 2s$ , sigue que  $p = 2s$ .

"  $\Rightarrow$  " Si el método es de orden  $2s$ , en particular cumple  $B(2s)$ , pues esta condición

recoge las condiciones de orden sobre los árboles  $\tau_j := \overbrace{[\tau_0, \dots, \tau_0]}^{(j-1)}$ :



En virtud de  $B(2s)$ ,  $\{b_i, c_i\}_{i=1}^s$  son los pesos y nodos de la cuadratura gaussiana. En particular,  $b_i > 0, 1 \leq i \leq s$ , y  $0 < c_1 < \dots < c_s < 1$ . Veamos que el método cumple  $C(s)$ . Para ello consideramos árboles de la forma



La condición de orden sobre  $\tau_{jl}$  da:  $b^T(c^{j-1} \bullet Ac^{l-1}) = \frac{1}{(j+l-1)}$ ,  $1 \leq l, j \leq s$ .

La condición de orden sobre  $\tau_{j+l}$  da:  $b^T c^{j+l-1} = \frac{1}{j+l}$ ,  $1 \leq l, j \leq s$ . Luego:

$$\begin{aligned}
 b^T(c^{j-1} \bullet Ac^{l-1}) &= \frac{1}{l} b^T c^{j+l-1}, \quad 1 \leq j, l \leq s, \\
 b^T(c^{j-1} \bullet [Ac^{l-1} - \frac{1}{l}c^l]) &= 0, \quad 1 \leq j, l \leq s, \\
 (b \bullet c^{j-1})^T [Ac^{l-1} - \frac{1}{l}c^l] &= 0, \quad 1 \leq j, l \leq s.
 \end{aligned}$$

Como  $\{b, b \bullet c, \dots, b \bullet c^{s-1}\}$  es una base de  $\mathbb{R}^s$  (pues  $b_i \neq 0, c_i \neq c_j$ ), sigue que

$$Ac^{l-1} = \frac{1}{l}c^l, \quad 1 \leq l \leq s.$$

Finalmente, obsérvese que la condición  $C(s)$  define unívocamente a la matriz  $A$  en términos de los nodos  $\{c_i\}_{i=1}^s$  ( $c_i \neq c_j, \forall i \neq j$ ):

$$\begin{aligned}
 A \cdot [e|c|c^2|\dots|c^{s-1}] &= [c|\frac{c^2}{2}|\frac{c^3}{3}|\dots|\frac{c^s}{s}] \Rightarrow \\
 A &= [c|\frac{c^2}{2}|\frac{c^3}{3}|\dots|\frac{c^s}{s}] \cdot [e|c|c^2|\dots|c^{s-1}]^{-1}. \quad \blacksquare
 \end{aligned}$$

**Ejemplo 3.1** Métodos de Gauss de  $s$  etapas:  $B(2s), C(s)$  y  $D(s)$ :

- $s=1$ , Regla implícita del punto medio
 
$$\left. \begin{aligned}
 L_1(x) &= \frac{\partial}{\partial x}(x(x-1)) = 2x-1 \Rightarrow c_1 = \frac{1}{2} \\
 B(1) : b^T e &= 1 \Leftrightarrow b_1 = 1 \\
 C(1) : Ae &= c \Leftrightarrow a_{11} = c_1
 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\frac{1}{2}|\frac{1}{2}}{1}$$
- $s=2$ 

$$L_2(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x^2(x-1)^2) = 12x^2 - 12x + 2 \Rightarrow \begin{cases} c_1 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ c_2 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} \end{cases}$$

$$B(2) : b^T [e|c] = [1, \frac{1}{2}] \Rightarrow b^T = (1, \frac{1}{2}) \cdot \begin{pmatrix} 1 & c_1 \\ 1 & c_2 \end{pmatrix}^{-1} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

$$C(2) : A \cdot [e|c] = [c|\frac{c^2}{2}] \Rightarrow A = \begin{bmatrix} c_1 & \frac{c_1^2}{2} \\ c_2 & \frac{c_2^2}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & c_1 \\ 1 & c_2 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

### 3.3. Métodos RK basados en las cuadraturas de Radau y Lobatto.

Si se consideran fórmulas de cuadratura de  $s$  nodos y pesos  $\{c_i, b_i\}_{i=1}^s$  en  $[0,1]$ , con grado de precisión (g.p.)  $2s-2$  y un nodo fijo en los extremos del intervalo (a la izquierda  $c_1 = 0$ , o a la derecha  $c_s = 1$ ), se obtiene una única fórmula de cuadratura, denominada cuadratura de Radau (izquierda o derecha, respectivamente).

1. La cuadratura de Radau izquierda verifica las siguientes propiedades:  
 Tiene g.p.= $2s-2$  (en particular, es de tipo interpolatorio, esto es, g.p.  $\geq s-1$ ),  
 $b_i > 0, \forall i, 0 = c_1 < c_2 < \dots < c_s < 1$ , y sus nodos son las raíces del polinomio

$$R_s^-(x) = \frac{\partial^{s-1}}{\partial x^{s-1}}(x^s \cdot (x-1)^{s-1}).$$

2. La cuadratura de Radau derecha tiene propiedades análogas, pero con nodos  $0 < c_1 < c_2 < \dots < c_{s-1} < c_s = 1$  raíces del polinomio

$$R_s^+(x) = \frac{\partial^{s-1}}{\partial x^{s-1}}(x^{s-1}(x-1)^s).$$

Una vez determinados los nodos, los pesos se obtienen imponiendo que la cuadratura sea de tipo interpolatorio (es decir, la condición  $B(s)$ ).

**Nota 3.6 (RK-Radau IIA)** . Están basados en la cuadratura de Radau derecha ( $c_s = 1$ ). Quedan definidos por las condiciones  $B(2s-1)$  y  $C(s)$ . El método verifica entonces  $D(s-1)$  y es de orden  $p \geq 2s-1$ . Como el único método de orden  $2s$  es el de Gauss, tenemos que  $p = 2s - 1$ .

Como  $c_i \neq c_j, \forall i \neq j$ , la matriz  $A$  queda definida por  $C(s)$ :

$$A = [c, \frac{c^2}{2}, \dots, \frac{c^s}{s}] \cdot [e, c, \dots, c^{s-1}]^{-1}.$$

Obsérvese que en los métodos Radau IIA la última fila de  $A$  coincide con  $b^T$ ,

$$\begin{aligned} e_s^T \cdot A \cdot [e, c, \dots, c^{s-1}] &= e_s^T \cdot [c, \frac{c^2}{2}, \dots, \frac{c^s}{s}] \\ (e_s^T \cdot A) \cdot [e, c, \dots, c^{s-1}] &= [1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{s}] \\ (e_s^T \cdot A) \cdot [e, c, \dots, c^{s-1}] &= b^T [e, c, \dots, c^{s-1}] \Rightarrow e_s^T \cdot A = b^T. \end{aligned}$$

**Ejemplo 3.2** Métodos de Radau IIA de  $s$  etapas:  $B(2s-1)$ ,  $C(s)$  y  $D(s-1)$ .

1.  $s=1$ , Euler implícito

$$\left. \begin{aligned} R_1^+(x) &= \frac{\partial^0}{\partial x^0}(x-1) = x-1 \Rightarrow c_1 = 1 \\ B(1) : b^T e &= 1 \Rightarrow b_1 = 1 \\ C(1) : Ae &= c \Rightarrow a_{11} = c_1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{1|1}{|1}$$

2.  $s=2$

$$R_2^+(x) = \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot (x-1)^2) = 3x^2 - 4x + 1 \Rightarrow \begin{cases} c_1 = \frac{1}{3} \\ c_2 = 1 \end{cases}$$

$$B(3) : \begin{cases} b^T e = 1 \\ b^T c = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ b_1 \cdot \frac{1}{3} + b_2 = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b_1 = \frac{3}{4} \\ b_2 = \frac{1}{4} \end{cases}, \text{ cumpliéndose } b^T c^2 = \frac{1}{3}.$$

$$C(2) : A \cdot [e, c] = [c, \frac{c^2}{2}] \Rightarrow A = \begin{bmatrix} c_1 & \frac{c_1^2}{2} \\ c_2 & \frac{c_2^2}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & c_1 \\ 1 & c_2 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{5}{12} & \frac{-1}{12} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \end{bmatrix}.$$

**Nota 3.7 (Métodos RK-Radau IA)** . Están basados en la cuadratura de Radau izquierda ( $c_1 = 0$ ) y quedan definidas por las condiciones  $B(2s-1)$  y  $D(s)$ . El método verifica ahora  $C(s-1)$  y vuelve a ser de orden  $p = 2s - 1$ . Estas condiciones vuelven a definir unívocamente a la matriz  $A$  (se obtiene directamente de  $D(s)$  pues  $\{b, b \cdot c, \dots, b \cdot c^{s-1}\}$  es base de  $\mathbb{R}^s$ ), y además su primera columna es constante e igual a  $b_1 \cdot A \cdot e_1 = b_1 \cdot e$ . En efecto:

$$\begin{aligned} (b \bullet c^{j-1})^T \cdot (Ae_1 - b_1 e) &= \frac{1}{j} (b - b \bullet c^j)^T e_1 - b_1 (b \bullet c^{j-1})^T \cdot e \\ &= \frac{1}{j} [b_1 - b_1 c_1^j] - b_1 \cdot b^T \cdot c^{j-1} = 0, \quad 1 \leq j \leq s. \end{aligned}$$

Luego,  $Ae_1 = b_1 \cdot e$ .

**Ejemplo 3.3** Métodos Radau IA de  $s$  etapas:  $B(2s-1)$ ,  $D(s)$  y  $C(s-1)$

$$1. \left. \begin{array}{l} s=1 \\ c_1 = 0 \\ B(1) : b^T e = 1 \Rightarrow b_1 = 1 \\ D(1) : b^T A = (b - bc)^T \Rightarrow b_1 a_{11} = b_1 \Rightarrow a_{11} = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{0|1}{|1}$$

Observemos que no cumple C(1).

$$2. \left. \begin{array}{l} s=2 \\ R_2^-(x) = \frac{\partial}{\partial x}(x^2 \cdot (x - 1)) = 3x^2 - 2x \Rightarrow \begin{cases} c_1 = 0 \\ c_2 = \frac{2}{3} \end{cases} \\ B(3) : \begin{cases} b^T e = 1 \\ b^T c = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ b_1 \cdot 0 + b_2 \cdot \frac{2}{3} = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b_1 = \frac{1}{4} \\ b_2 = \frac{3}{4} \end{cases} \text{ (y se cumple } b^T c^2 = \frac{1}{3}). \end{array} \right\}$$

$$D(2) : \begin{cases} b^T A = (b - b \cdot c)^T \\ (b \cdot c)^T \cdot A = \frac{1}{2}(b - b \cdot c^2)^T \end{cases} \Rightarrow A = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{5}{12} \end{bmatrix}$$

La cuadratura de Lobatto se obtiene al fijar ambos extremos,  $c_1 = 0, c_s = 1$ , e imponer grado de precisión  $2s - 3$ . Los ceros de Lobatto (nodos) son las raíces del polinomio

$$L_s(x) = \frac{\partial^{s-2}}{\partial x^{s-2}}((x - 1)^{s-1} \cdot x^{s-1}), \text{ con } s \geq 2$$

Los nodos verifican entonces  $c_1 = 0 < c_2 < \dots < c_{s-1} < c_s = 1$ . Los pesos se determinan unívocamente imponiendo que la fórmula sea de tipo interpolatorio (esto es,  $B(s)$ ), de tal suerte que  $b_i > 0, \forall i$ . Los métodos RK basados en la cuadratura de Lobatto más populares son los siguientes.

**Nota 3.8 (Métodos RK-Lobatto IIIA)** . Se obtienen unívocamente imponiendo  $c_1 = 0, c_s = 1, B(2s - 2)$  y  $C(s)$ . El método verifica además  $D(s - 2)$  y tiene orden  $p = 2s - 2$ . Del mismo modo que antes, puede comprobarse para estos métodos que

$$a_{sj} = b_j, 1 \leq j \leq s, \text{ y } a_{1j} = 0, 1 \leq j \leq s$$

**Ejemplo 3.4** Método Lobatto IIIA de  $s$  etapas:  $B(2s - 2), C(s)$  y  $D(s - 2)$ :

$$1. \left. \begin{array}{l} s=2, \text{ Regla trapezoidal implícita} \\ c_1 = 0, c_2 = 1, a_{11} = a_{12} = 0 \\ B(2) : \begin{cases} b^T e = 1 \\ b^T c = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow b_1 = b_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow a_{2j} = b_j \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{0|0 \ 0}{|1 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}}$$

$$2. \ s=3 \ L_3(x) = \frac{\partial}{\partial x}(x^2 \cdot (x - 1)^2) = 4x^3 - 6x^2 + 2x \Rightarrow x = 0, \frac{1}{2}, 1.$$

$$\text{Imponiendo } B(4) \text{ y } C(3) \text{ se obtiene: } \begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{5}{24} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{24} \\ 1 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

**Nota 3.9 (Métodos RK-Lobatto IIIB)** . Se obtienen exigiendo  $c_1 = 0, c_s = 1, B(2s - 2)$  y  $D(s)$ . En particular, el correspondiente método de  $s$  etapas verifica:

- $C(s-2)$  y orden  $p=2s - 2$ .
- $a_{i1} = b_1$  y  $a_{is}, 1 \leq i \leq s$

**Ejemplo 3.5** Método Lobatto IIIB de  $s$  etapas:  $B(2s - 2), D(s)$  y  $C(s - 2)$ .

$$\begin{array}{c|cc}
 s = 2 & & \\
 \hline
 0 & \frac{1}{2} & 0 \\
 1 & \frac{1}{2} & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{c|ccc}
 s = 3 & & & \\
 \hline
 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & 0 \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & 0 \\
 1 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6}
 \end{array}$$

**Nota 3.10 (Métodos RK-Lobatto IIIC)** . En este caso se impone  $c_1 = 0, c_s = 1, B(2s - 2), C(s - 1)$ , y  $Ae_1 = b_1e$ . El método resultante cumple  $D(s - 1)$ , tiene orden  $p = 2s - 2$  y además verifica  $a_{sj} = b_j, 1 \leq j \leq s$ .

**Ejemplo 3.6** Método de Lobatto IIIC de  $s$  etapas:  $B(2s - 2), C(s - 1)$ , y  $D(s - 1)$ .

$$\begin{array}{c|cc}
 s = 2 & & \\
 \hline
 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\
 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\
 \hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{c|ccc}
 s = 3 & & & \\
 \hline
 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{5}{12} & -\frac{1}{12} \\
 1 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6}
 \end{array}$$

### 3.4. Métodos Runge-Kutta de colocación.

Consideremos el PVI  $\begin{cases} y'(t) = f(t, y) \\ y(t_n) = y_n \end{cases}$ ,  $y, f \in \mathbb{R}^m$  y  $s$  nodos distintos dos a dos  $\{c_i\}_{i=1}^s, c_i \neq c_j, \forall i \neq j$ . La *colocación polinómica* en los nodos  $\tau_i = t_n + c_i \cdot h, 1 \leq i \leq s$ , consiste en hallar un polinomio  $u(t) = (u_k(t))_{k=1}^n$  de grado  $\leq s$  tal que

$$u(t_n) = y_n \quad u'(\tau_i) = f(\tau_i, u(\tau_i)), \quad 1 \leq i \leq s.$$

Sabemos entonces (por interpolación polinómica) que  $u'(t) = \sum_{i=1}^s f(\tau_i, u(\tau_i)) \cdot L_i(t)$ ,

siendo  $L_i(t) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s \frac{t - \tau_j}{\tau_i - \tau_j}, 1 \leq i \leq s$ , los polinomios fundamentales de Lagrange

asociados a los nodos  $\{\tau_i\}_{i=1}^s$ . Obsérvese ahora que

$$u(t) = u(t_n) + \int_{t_n}^t u'(\tau) d\tau = u(t_n) + \sum_{i=1}^s f(\tau_i, u(\tau_i)) \cdot \int_{t_n}^t L_i(\tau) d\tau.$$

Se define el método de colocación como:

$$\begin{cases} Y_i = u(\tau_i) = u(t_n + c_i \cdot h), & 1 \leq i \leq s \\ y_{n+1} = u(t_n + h) = u(t_n) + \sum_{i=1}^s f(t_n + c_i \cdot h, u(t_n + c_i \cdot h)) \cdot \int_{t_n}^{t_n+h} L_i(\tau) d\tau. \end{cases} \quad (3.3)$$

Veamos que este método (3.3) es un método Runge-Kutta. En efecto, con el cambio  $t = t_n + \theta \cdot h$ , sigue  $L_i(t) = \prod_{j=1, j \neq i}^s \frac{h \cdot (\theta - c_j)}{h \cdot (c_i - c_j)} = \prod_{j=1, j \neq i}^s \frac{(\theta - c_j)}{(c_i - c_j)} = l_j(\theta)$  donde  $\{l_i(\theta)\}_{i=1}^s$  son los polinomios de Lagrange asociados a  $\{c_i\}_{i=1}^s$ . Ahora

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i \cdot f(t_n + c_i \cdot h, Y_i), \quad \text{con } b_i := \int_0^1 l_i(\theta) d\theta,$$

siendo

$$Y_i = y_n + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} \cdot f(t_n + c_j \cdot h, Y_j), \quad 1 \leq i \leq s, \quad \text{con } a_{ij} := \int_0^{c_i} l_j(\theta) d\theta.$$

En definitiva, hemos probado el siguiente teorema.

**Teorema 3.6.** *Todo método de colocación polinómica sobre  $s$  nodos distintos  $c_i \neq c_j$ ,  $\forall i \neq j$ , es un  $RK(A, b)$  de  $s$  etapas cuyos coeficientes son*

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\theta) d\theta, \quad b_i = \int_0^1 l_i(\theta) d\theta, \quad 1 \leq i, j \leq s, \text{ siendo}$$

$$l_j(\theta) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s \frac{\theta - c_j}{c_i - c_j} = \frac{\pi(\theta)}{\pi'(c_i) \cdot (\theta - c_i)}, \quad 1 \leq i \leq s, \text{ y } \pi(\theta) = \prod_{j=1}^s (\theta - c_j).$$

**Teorema 3.7.** *Un  $RK(A, b, c)$  de  $s$  etapas y  $s$  nodos distintos dos a dos,  $c_i \neq c_j$ ,  $\forall i \neq j$ , es de colocación si y solo si verifica  $B(s)$  y  $C(s)$ .*

**Demostración:**

”  $\Rightarrow$  ” Supongamos que el método es de colocación, entonces:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^s a_{ik} \cdot c_k^{j-1} &= \sum_{k=1}^s \left( \int_0^{c_i} l_k(\theta) d\theta \right) \cdot c_k^{j-1} = \int_0^{c_i} \left( \sum_{k=1}^s l_k(\theta) \cdot c_k^{j-1} \right) d\theta \\ &= \int_0^{c_i} \theta^{j-1} d\theta = \frac{c_i^j}{j}, \quad 1 \leq i, j \leq s. \end{aligned}$$

Luego  $A \cdot c^{j-1} = \frac{c^j}{j}$ ,  $1 \leq j \leq s$ , y se cumple  $C(s)$ . Del mismo modo,  $\sum_{k=1}^s b_k \cdot c_k^{j-1} = \int_0^1 \theta^{j-1} d\theta = \frac{1}{j}$ ,  $1 \leq j \leq s$ , y se cumple  $B(s)$ .

”  $\Leftarrow$  ” Supongamos que el método cumple  $B(s)$  y  $C(s)$ . Entonces las fórmulas de cuadratura (3.1) y (3.2) tienen grado de precisión  $s-1$  (al menos). Tomando

$$f(x) = l_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s \frac{x - c_j}{c_i - c_j} \in \Pi_{s-1}. \text{ Luego}$$

$$\int_0^{c_i} l_j(x) dx = \sum_{k=1}^s a_{ik} l_j(c_k) = a_{ij} \text{ y } \int_0^1 l_j(x) dx = \sum_{k=1}^s b_k l_j(c_k) = b_j, \quad 1 \leq i, j \leq s.$$

En definitiva, el método es de colocación. ■

**Nota 3.11** Por el Teorema 3.4, el orden de consistencia de un RK de colocación de  $s$  etapas en  $s$  nodos distintos verifica (en virtud de  $B(s)$ ,  $C(s)$  y  $D(r)$ , para algún  $r \geq 0$ ),  $p \geq \min \{s, 2s + 2, s + r + 1\} = s$ . La cuestión ahora es estudiar si se pueden elegir los nodos  $\{c_i\}_{i=1}^s$  convenientemente de modo que el orden sea mayor.

**Teorema 3.8.** *Sean  $s$  nodos distintos dos a dos  $\{c_i\}_{i=1}^s$  elegidos de forma que  $\pi(x) \perp x^{j-1}$ ,  $1 \leq j \leq r$ , con  $r \leq s$ , siendo  $\pi(x) = \prod_{i=1}^s (x - c_i)$  y el producto interior  $\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(x)g(x)dx$ . Entonces el método RK de colocación asociado tiene orden  $s+r$ .*

**Demostración:** Basta con probar que el método cumple  $B(s+r)$ . En tal caso, en virtud del Lema 3.4 y del Teorema 3.4 se cumplirían  $C(s)$  y  $D(r)$ . Veamos entonces que la fórmula de cuadratura  $\int_0^1 f(x)dx = \sum_{k=1}^s b_k f(c_k)$  tiene grado de precisión

$s+r-1$ . Sea  $f(x) \in \Pi_{s+r-1}$ . Dividiendo entre  $\pi(x) \in \Pi_s$ :

$$f(x) = q(x) \cdot \pi(x) + R(x), \text{ con } R \in \Pi_{s-1} \text{ y } q \in \Pi_{r-1}.$$

Luego  $\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 q(x) \cdot \pi(x)dx + \int_0^1 R(x)dx = \int_0^1 R(x)dx$ . Como el método es de colocación, cumple  $B(s)$  y entonces, dado que  $R \in \Pi_{s-1}$ :

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 R(x)dx = \sum_{k=1}^s b_k R(c_k) = \sum_{k=1}^s b_k \cdot f(c_k). \quad \blacksquare$$

**Nota 3.12** Los métodos de Gauss, Radau IIA y Lobatto IIIA son ejemplos de métodos de colocación.



## Métodos RK diagonalmente implícitos y métodos linealmente implícitos.

### 4.1. Resolución de la ecuación de etapas en métodos RK implícitos. Métodos DIRK.

Sea la ecuación de etapas (1.6) de un método RK implícito de  $s$  etapas:

$$K_i = h \cdot f(t_n + c_i \cdot h, y_n + \sum_{j=1}^s a_{ij} \cdot K_j), \quad 1 \leq i \leq s,$$

y consideremos  $K = (K_1^T, \dots, K_s^T)^T \in \mathbb{R}^{m \cdot s}$  y

$$F(t_n \cdot e + h \cdot c, e \otimes y_n + (A \otimes I)K) := (f(t_n + c_i \cdot h, y_n + \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j)^T)_{i=1, \dots, s}^T \in \mathbb{R}^{m \cdot s}.$$

En forma compacta, usando el producto de Kronecker  $A \otimes B = (a_{ij} B)_{i,j=1}^s$  la ecuación de etapas queda como:

$$K = h \cdot F(t_n \cdot e + h \cdot c, e \otimes y_n + (A \otimes I)K), \quad e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s. \quad (4.1)$$

Observar que  $c = (c_1, \dots, c_s)^T$  y

$$e \otimes y_n + (A \otimes I)K = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \otimes y_n + \begin{pmatrix} a_{11} I_n & \cdots & a_{1s} I_n \\ \vdots & & \vdots \\ a_{s1} I_n & \cdots & a_{ss} I_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} K_1 \\ \vdots \\ K_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n + \sum_{j=1}^s a_{1j} \cdot K_j \\ \vdots \\ y_n + \sum_{j=1}^s a_{sj} \cdot K_j \end{pmatrix}.$$

**Nota 4.1** Sabemos que si  $|h| \cdot L \cdot \varrho(|A|) < 1$ , siendo  $L$  una constante de Lipschitz para  $f$ , entonces (4.1) admite una única solución  $K$ . Esta solución puede, al menos teóricamente, obtenerse mediante iteración funcional:

$$K^{(\nu+1)} = h \cdot F(t_n \cdot e + hc, e \otimes y_n + (A \otimes I)K^{(\nu)}), \quad \nu \geq 0, \quad K^{(0)} \text{ dado,}$$

esto es, componente a componente:

$$K_i^{(\nu+1)} = h \cdot f(t_n + c_i \cdot h, y_n + \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j^{(\nu)}), \quad 1 \leq i \leq s, \quad \nu \geq 0.$$

Además

$$\| \|K - K^{(\nu+1)}\| \| = \mathcal{O}(h \cdot \| \|K - K^{(\nu)}\| \|) = \mathcal{O}(h^{\nu+1} \cdot \| \|K - K^{(0)}\| \|), \quad h \rightarrow 0$$

La iteración funcional puede tener interés práctico en aquellos problemas en la que  $L$  es moderada (diremos en tal caso que el PVI es no stiff o no rígido). En general, y en particular si  $L \gg 1$ , el cálculo efectivo de la solución (4.1) se lleva a cabo mediante iteraciones de tipo Newton. Teniendo en cuenta (4.1) definimos

$$G(K) := K - h \cdot F(t_n \cdot e + hc, e \otimes y_n + (A \otimes I)K).$$

El método de Newton sobre el sistema  $G(K) = 0$ , queda en la forma

$$G'(K^{(\nu)}) \cdot (K^{(\nu+1)} - K^{(\nu)}) = -G(K^{(\nu)}), \nu \geq 0,$$

o bien, introduciendo  $\Delta^{(\nu)} := K^{(\nu+1)} - K^{(\nu)}$ :

$$\begin{cases} G'(K^{(\nu)}) \cdot \Delta^{(\nu)} = -G(K^{(\nu)}) \\ K^{(\nu+1)} := K^{(\nu)} + \Delta^{(\nu)} \end{cases}, \nu \geq 0. \quad (4.2)$$

Una elección natural posible para  $K^{(0)}$  es  $K_i^{(0)} = 0$ ,  $1 \leq i \leq s$ . Observamos que

$$G(K) = (G_1^T, \dots, G_s^T)^T \text{ con } G_i = K_i - hf(t_n + c_i h, y_n + \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j), 1 \leq i \leq s \text{ y}$$

entonces  $\frac{\partial G_i}{\partial K_j} = \delta_{ij} \cdot I_m - h \cdot a_{ij} \cdot J_j$ ,  $1 \leq i, j \leq s$ , siendo  $\delta_{ij}$  la delta de Kronecker y

$J_i = \frac{\partial f}{\partial y}(t_n + c_i \cdot h, y_n + \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j)$ ,  $1 \leq i \leq s$ . Luego, la matriz jacobiana  $G'(K)$  viene dada por

$$G'(K) = \begin{bmatrix} I_m - ha_{11} \cdot J_1 & -ha_{12} J_2 & \cdots & -ha_{1s} J_s \\ -ha_{21} \cdot J_1 & I_m - ha_{22} \cdot J_2 & \cdots & -ha_{2s} J_s \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -ha_{s1} \cdot J_1 & -ha_{s2} \cdot J_2 & \cdots & I_m - ha_{ss} J_s \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(sm) \times (sm)}. \quad (4.3)$$

A efectos de reducir el costo computacional involucrado en (4.2)-(4.3), una posibilidad consiste en reemplazar  $J_i$  por  $J := \frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n)$ ,  $1 \leq i \leq s$ , lo cual da lugar al método de Newton simplificado (o cuasi-Newton):

$$\begin{cases} [I_{ms} - h(A \otimes J)] \cdot \Delta^{(\nu)} = -G(K^{(\nu)}) \\ K^{(\nu+1)} = K^{(\nu)} + \Delta^{(\nu)} \end{cases}, \nu \geq 0. \quad (4.4)$$

La implementación del esquema iterativo (4.4) típicamente requiere una descomposición LU de la matriz  $I_{ms} - h(A \otimes J) \in \mathbb{R}^{(s \cdot m) \times (s \cdot m)}$ , que puede ser especialmente costosa si la dimensión  $m$  del PVI es grande. El esquema (4.4) es particularmente simple de implementar en el caso de métodos diagonalmente implícitos (DIRK), para los que  $a_{ij} = 0$ , si  $j > i$ . En tal caso, en vez de una factorización LU para la matriz de dimensión  $ms$   $I_{ms} - h(A \otimes J)$ , se reduce el álgebra a  $s$  factorizaciones LU para las matrices de dimensión  $m$   $I_m - ha_{ii} J$ ,  $1 \leq i \leq s$ . Especialmente atractivos resultan entonces los métodos simplemente diagonalmente implícitos (SDIRK) para los que  $a_{ij} = 0$ ,  $j > i$ , y  $a_{ii} = \gamma$ ,  $1 \leq i \leq s$ , que solo requieren una descomposición LU para la matriz de dimensión  $m$   $I_m - h\gamma J$  en cada paso de la integración temporal:

$$\begin{bmatrix} I - h\gamma J & 0 & \cdots & 0 \\ -ha_{21} J & I - h\gamma J & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -ha_{s1} J & -ha_{s2} J & \cdots & I - h\gamma J \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta_1^{(\nu)} \\ \Delta_2^{(\nu)} \\ \vdots \\ \Delta_s^{(\nu)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} G_1^{(\nu)} \\ G_2^{(\nu)} \\ \vdots \\ G_s^{(\nu)} \end{bmatrix}, \nu \geq 0,$$

o bien, para  $\nu \geq 0$ ,

$$\begin{cases} (I - h\gamma J)\Delta_i^{(\nu)} = -G_i^{(\nu)} + h \cdot \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} J \Delta_j^{(\nu)}, & 1 \leq i \leq s, \\ K_i^{(\nu+1)} = K_i^{(\nu)} + \Delta_i^{(\nu)}, \end{cases} \quad (4.5)$$

siendo  $G_i^{(\nu)} = K_i^{(\nu)} - h \cdot f(t_n + c_i \cdot h, y_n + \sum_{j=1}^i a_{ij} \cdot K_j^{(\nu)})$ ,  $1 \leq i \leq s$ .

**Nota 4.2** Si en el esquema iterativo (4.5) para un método SDIRK aplicado a un problema autónomo  $y' = f(y)$  se fija  $K_i^{(0)} = 0$ ,  $1 \leq i \leq s$ , y el número de iteraciones a  $\nu = 0$ , resulta el método (con  $K_i := K_i^{(1)}$ ):

$$\begin{cases} (I - h\gamma J)K_i = hf(y_n) + hJ \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j, & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s b_i K_i. \end{cases}$$

Puesto que este método en general solo alcanzará orden de consistencia 1, introduciendo en  $f$  una combinación lineal adecuada de las etapas previamente computadas se obtiene la familia de métodos:

$$\begin{cases} K_i = hf(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} K_j) + hJ \sum_{j=1}^i a_{ij} K_j, & 1 \leq i \leq s \quad (a_{ii} = \gamma, \quad 1 \leq i \leq s) \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s b_i K_i. \end{cases}$$

Este tipo de métodos se conocen como métodos de Rosenbrock-Wanner (o métodos ROW) y estudiaremos su consistencia, así como su extensión a PVIs no autónomos, en las siguientes secciones.

**Teorema 4.1.** *El orden de consistencia  $p$  de un método DIRK(A,b) de  $s$  etapas verifica  $p \leq s + 1$ .*

**Demostración:**

Sea el método DIRK(A,b) aplicado al problema escalar autónomo  $\begin{cases} y' = \lambda y \\ y(0) = y_0 \end{cases}$ ,

$\lambda \in \mathbb{C}$ , cuya solución exacta es  $y(t) = e^{\lambda t} \cdot y_0$ ,  $t \geq 0$ .

$$\begin{cases} K_i = h \cdot \lambda [y_0 + \sum_{j=1}^i a_{ij} K_j], & 1 \leq i \leq s, \\ y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i K_i. \end{cases}$$

Poniendo  $z := \lambda h$  y  $K = (K_1, \dots, K_s)^T \in \mathbb{C}^s$ . Tenemos que,

$$\begin{cases} K = zy_0 e + zAK \\ y_1 = y_0 + b^T K \end{cases}, \text{ o bien } \begin{bmatrix} I - zA & 0 \\ -zb^T & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K \\ z \cdot y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e \\ 1 \end{bmatrix} zy_0.$$

Aplicando la regla de Cramer para obtener  $z \cdot y_1$ :

$$z \cdot y_1 = \frac{\det \begin{bmatrix} I - zA & e \cdot (zy_0) \\ -zb^T & 1 \cdot (zy_0) \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} I - zA & 0 \\ -zb^T & 1 \end{bmatrix}} = zy_0 \cdot \frac{\det \begin{bmatrix} I - zA & e \\ -zb^T & 1 \end{bmatrix}}{\det(I - zA)} = zy_0 \cdot \frac{\det \begin{bmatrix} I - zA + zeb^T & 0 \\ -zb^T & 1 \end{bmatrix}}{\det(I - zA)}$$

Luego  $y_1 = y_0 \cdot \frac{\det(I - zA + zeb^T)}{\det(I - zA)}$ . Puesto que  $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$  es triangular inferior,  
 $R(z) := \frac{\det(I - zA + zeb^T)}{\det(I - zA)} = \frac{P_s(z)}{\prod_{i=1}^s (1 - za_{ii})}$  es una función racional con numerador y

denominador de grado menor o igual que  $s$ , con  $s$  polos reales  $(\frac{1}{a_{ii}}, 1 \leq i \leq s)$ .

Usando [5, Teorema 4.18 p. 61] sigue que  $e^z - R(z) = \mathcal{O}(z^{p+1})$ , con  $p \leq s + 1$ . Así,  $y(h) - y_1 = y_0 \cdot [e^z - R(z)] = \mathcal{O}(h^{p+1})$ ,  $h \rightarrow 0$ , con  $p \leq s + 1$ . ■

## 4.2. Métodos linealmente implícitos de tipo ROW y W.

Consideramos inicialmente un PVI autónomo para una EDO de primer orden:

$$\begin{cases} y' = f(y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}, \quad t \in [t_0, T], \quad y, f \in \mathbb{R}^m. \quad (4.6)$$

**Definición 4.1** Un método de tipo Rosenbrock-Wanner (o ROW) de  $s$  etapas aplicado a (4.6) con paso  $h > 0$  computa una solución de avance  $y_{n+1}$  en  $t = t_n + h$  dada por

$$\begin{cases} K_i = h \cdot f(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} K_j) + h J_n \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j, & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^s b_j K_j, \end{cases} \quad (4.7)$$

partiendo de la aproximación de  $y_n$  en  $t = t_n$ , siendo  $J_n = f'(y_n)$ .

La etapa  $K_i$  del método (4.7) se obtiene, en cada paso de la integración, resolviendo un sistema lineal con matriz de coeficientes  $I - h\gamma_{ii}J_n$ . En particular, resultan especialmente atractivos aquellos métodos ROW con  $\gamma_{ii} = \gamma$ ,  $1 \leq i \leq s$ , pues solo se requiere una factorización LU de la matriz  $I - h\gamma J_n$  por paso de integración. Observamos que el método (4.7) requiere computar  $J_n = f'(y_n)$  en cada paso de la integración. Identificaremos al método (4.7) por ROW( $A, \Gamma, b$ ), siendo  $A = (\alpha_{ij})_{i,j=1}^s$  triangular inferior estricta,  $\Gamma = (\gamma_{ij})_{i,j=1}^s$  triangular inferior y  $b = (b_i)_{i=1}^s$  los coeficientes del método. Nuestro objetivo principal consiste en determinar qué relaciones deben satisfacer los coeficientes  $(A, \Gamma, b)$  de modo que el método (4.7) sea consistente de orden  $p$ , esto es, determinar las condiciones de orden para un método ROW. A efectos de reducir el costo computacional de los métodos de tipo ROW introducimos a continuación la clase de métodos W, en los que  $J_n = f'(y_n)$  se sustituye por una matriz W arbitraria de dimensión  $m \times m$ .

**Definición 4.2** Un método de tipo W de  $s$  etapas aplicado a (4.6) con paso  $h > 0$  desde  $(t_n, y_n)$  genera una solución de avance  $y_{n+1}$  en  $t = t_n + h$  dada por

$$\begin{cases} K_i = h \cdot f(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} K_j) + h \cdot W_n \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} K_j, & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s b_i K_i \end{cases} \quad (4.8)$$

siendo  $W_n \in \mathbb{R}^{m \times m}$  arbitraria. Denotaremos al método (4.8) por  $W(A, \Gamma, b)$ , siendo  $A = (\alpha_{ij})_{i,j=1}^s$  triangular inferior estricta,  $\Gamma = (\gamma_{ij})_{i,j=1}^s$  triangular inferior y  $b = (b_i)_{i=1}^s$ .

**Nota 4.3**

1. Obviamente los métodos ROW(A,Γ,b) (4.7) y W(A,Γ,b) (4.8) obedecen a una formulación análoga en la que la matriz  $J_n = f'(y_n)$  se reemplaza por una matriz arbitraria  $W_n$ . No obstante, se suele considerar en la práctica

$$W_n = J_n + \mathcal{O}(h), \quad h \rightarrow 0, \tag{4.9}$$

que es el caso resultante de fijar  $J_n = J$  una determinada cantidad de pasos consecutivos.

2. Abordaremos el estudio de consistencia de los métodos W(A,Γ,b) (4.8) en paralelo al estudio de consistencia de los métodos ROW(A,Γ,b) (4.7). Para un orden  $p \geq 1$  dado, esperamos que el número de condiciones de orden a satisfacer por un método W (4.8) sea mayor que para un método ROW (4.7). Estudiaremos además cómo se reduce el número de condiciones de orden en un método W cuando la matriz  $W_n$  satisface (4.9).

**Nota 4.4** Veamos cómo obtener la formulación de un método ROW (4.7) aplicado a un PVI no autónomo

$$\begin{cases} y' = f(t, y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}, \quad y, f \in \mathbb{R}^m. \tag{4.10}$$

Para ello consideremos el PVI autónomo asociado  $Y' = F(Y)$ , con  $Y = \begin{pmatrix} t \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m+1}$

y  $F(Y) := \begin{pmatrix} 1 \\ f(t, y) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m+1}$ , esto es, aumentamos el sistema (4.10) con la EDO

$t' = 1$ . El método (4.7) aplicado a  $Y' = F(Y)$  con paso  $h$  y valor de arranque

$Y_n = \begin{pmatrix} t_n \\ y_n \end{pmatrix}$ , queda,

$$\begin{cases} \hat{K}_i = h \cdot F(Y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \hat{K}_j) + h \cdot \hat{J}_n \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \hat{K}_j, & 1 \leq i \leq s \\ Y_{n+1} = Y_n + \sum_{i=1}^s b_i \hat{K}_i, \end{cases} \tag{4.11}$$

siendo  $\hat{J}_n = F'(Y_n) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \partial_t f(t_n, y_n) & \partial_y f(t_n, y_n) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+1) \times (m+1)}$ . Poniendo

$\hat{K}_i = \begin{pmatrix} \tau_i \\ K_i \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m+1}$ ,  $Y_{n+1} = \begin{pmatrix} t_{n+1} \\ y_{n+1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m+1}$ , resulta, igualando componentes en (4.11):

- $\tau_i = h \cdot 1 + 0 = h$ ,  $t_{n+1} = t_n + \sum_{i=1}^s b_i \cdot h$

- $K_i = h \cdot f(t_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} K_j) + h \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} [h \cdot \partial_t f(t_n, y_n) + \partial_y f(t_n, y_n) \cdot K_j]$   
 $1 \leq i \leq s$
- $y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s b_i K_i.$

Se obtiene entonces la formulación de un método ROW (4.7) aplicado a un PVI no autónomo (4.10) como

$$\begin{cases} K_i = h \cdot f(t_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} K_j) + h^2 \gamma_i \cdot \partial_t f(t_n, y_n) + h J_n \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} K_j, & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s b_i K_i, \end{cases} \quad (4.12)$$

siendo  $J_n = \frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n)$ , y  $\alpha_i := \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij}$ ,  $\gamma_i := \sum_{j=1}^i \gamma_{ij}$ ,  $1 \leq i \leq s$ .

Análogamente, un método W aplicado al PVI no autónomo (4.10) responde a la formulación:

$$\begin{cases} K_i = h \cdot f(t_n + \alpha_i \cdot h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot K_j) + h^2 \cdot \gamma_i \cdot w_n + h \cdot W_n \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j, \\ 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s b_i K_i, \end{cases} \quad (4.13)$$

siendo  $W_n \in \mathbb{R}^{m \times m}$  y  $w_n \in \mathbb{R}^m$  arbitrarios, aunque típicamente  $W_n \simeq \partial_y f(t_n, y_n)$  y  $w_n \simeq \partial_t f(t_n, y_n)$ .

#### Nota 4.5

1. Observamos que, si en (4.13) se toma  $w_n = 0$  y  $W_n = 0$  entonces se recupera la formulación de los métodos de tipo Runge-Kutta explícitos.
2. En [8, p. 133] y [7, p. 288] se definen los métodos W aplicados al PVI no autónomo (4.10) en la forma (4.13) con  $w_n = 0$ . Se indica allí que esta elección mejora la estabilidad de los métodos.

**Teorema 4.2.** *El orden de consistencia  $p$  de un método ROW( $A, \Gamma, b$ ) de  $s$  etapas verifica  $p \leq s + 1$ .*

**Demostración:**

El método ROW aplicado a  $y' = f(y) = \lambda \cdot y$ ,  $\lambda \in \mathbb{C}$ , coincide con el método DIRK( $\beta, b$ ), con  $\beta = A + \Gamma$ . El orden de un método DIRK de  $s$  etapas cumple  $p \leq s + 1$  por el Teorema 4.1. ■

### 4.3. Consistencia de métodos ROW.

Consideremos el método ROW( $A, \Gamma, b$ ) de  $s$  etapas

$$\begin{cases} K_i = h \cdot f(y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} K_j) + h \cdot J \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot k_j, & 1 \leq i \leq s, \\ y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i \cdot K_i \end{cases} \quad (4.14)$$

aplicado al PVI autónomo  $\begin{cases} y' = f(y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$ ,  $y, f \in \mathbb{R}^m$ , con paso  $h > 0$ , siendo

$J = f'(y_0)$ . Tenemos que  $y(t_0 + h) = y_0 + \sum_{\tau \in T} \alpha(\tau) \cdot F(\tau)(y_0) \cdot \frac{h e(\tau)}{e(\tau)!}$  según obtuvimos en el Teorema 2.1. De modo análogo al estudio de consistencia realizado para métodos Runge-Kutta, pretendemos obtener un desarrollo formal en potencias de  $h$  para la solución de avance  $y_1$  del método ROW, de tal modo que este desarrollo nos permita obtener las correspondientes condiciones algebraicas de orden a efectos de garantizar que

$$y_1 - y(t_0 + h) = \mathcal{O}(h^{p+1}), h \rightarrow 0,$$

esto es, garantizar que el método ROW sea consistente de orden  $p$  ( $p \geq 1$ ,  $p \in \mathbb{N}$ ).

Observamos de (4.14) que, para  $q \geq 1$ , denotando  $u_i := y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot K_j$ ,  $1 \leq i \leq s$ ,

$$\begin{aligned} y_1^{(q)}|_{h=0} &= \sum_{i=1}^s b_i \cdot K_i^{(q)}|_{h=0}, \text{ con} \\ K_i^{(q)} &= h \cdot [f(u_i)]^{(q)} + \binom{q}{1} [f(u_i)]^{(q-1)} + h \cdot J \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} K_j^{(q)} + \binom{q}{1} \cdot J \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j^{q-1}, \text{ y} \\ \begin{cases} K_i^{(q)}|_{h=0} = q \cdot [f(u_i)]_{h=0}^{(q-1)} + q \cdot J \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j^{(q-1)}|_{h=0} \\ u_i^{(q)}|_{h=0} = \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot K_j^{(q)}|_{h=0}. \end{cases} &, 1 \leq i \leq s, q \geq 1. \end{aligned}$$

aplicando la regla de la cadena (puesto que  $K_i|_{h=0} = 0$ ):

$$\begin{aligned} K_i^{(1)}|_{h=0} &= f(y_0) \\ K_i^{(2)}|_{h=0} &= 2 \cdot f'(y_0) \cdot u_i^{(1)}|_{h=0} + 2 \cdot J \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j^{(1)}|_{h=0} \\ K_i^{(3)}|_{h=0} &= 3 \cdot (f''(y_0) \cdot [u_i^{(1)}|_{h=0}, u_i^{(1)}|_{h=0}] + f'(y_0) \cdot u_i^{(2)}|_{h=0}) + 3 \cdot J \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j^{(2)}|_{h=0} \\ K_i^{(4)}|_{h=0} &= 4 \cdot \left\{ f'''(y_0)[u_i^{(1)}|_{h=0}, u_i^{(1)}|_{h=0}, u_i^{(1)}|_{h=0}] \right. \\ &\quad \left. + 3 \cdot f''(y_0)[u_i^{(2)}|_{h=0}, u_i^{(1)}|_{h=0}] + f'(y_0) \cdot u_i^{(3)}|_{h=0} \right\} + 4J \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j^{(4)}|_{h=0}. \end{aligned}$$

Usando que  $u_i^{(a)}|_{h=0} = \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot k_j^{(a)}|_{h=0}$ , y, a efectos de simplificar notación,

entendiendo que las derivadas de  $K_j$  y  $u_j$  están evaluadas en  $h = 0$  y las derivadas de Fréchet de  $f$  lo están en  $y_0$ , concluimos denotando  $\beta_{ij} = \alpha_{ij} + \gamma_{ij}$  y usando

$$J = f'(y_0), \text{ que } K_i^{(1)} = 1 \cdot f$$

$$u_i^{(1)} = 1 \cdot \left( \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \right) \cdot f$$

$$K_i^{(2)} = (1 \cdot 2) \cdot \left( \sum_j \alpha_{ij} \right) \cdot f'(f) + (1 \cdot 2) \cdot \left( \sum_j \gamma_{ij} \right) \cdot J \cdot f = (1 \cdot 2) \cdot \left( \sum_j \beta_{ij} \right) \cdot f'(f)$$

$$u_i^{(2)} = (1 \cdot 2) \cdot \left( \sum_{j,k} \alpha_{ij} \beta_{jk} \right) f'(f)$$

$$\begin{aligned}
 K_i^{(3)} &= (1 \cdot 3) \cdot \left( \sum_j \alpha_{ij} \right) \cdot \left( \sum_k \alpha_{ik} \right) f''(f, f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k} \alpha_{ij} \cdot \beta_{jk} \right) \cdot f'(f'(f)) + (1 \cdot 2 \cdot \\
 &3) \left( \sum_{j,k} \gamma_{ij} \beta_{jk} \right) \cdot J \cdot f'(f) = (1 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k} \alpha_{ij} \cdot \alpha_{ik} \right) \cdot f''(f, f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k} \beta_{ij} \beta_{jk} \right) \cdot f'(f'(f)) \\
 u_i^{(3)} &= (1 \cdot 3) \left( \sum_{j,k,l} \alpha_{ij} \cdot \alpha_{jk} \cdot \alpha_{jl} \right) \cdot f''(f, f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k,l} \alpha_{ij} \cdot \beta_{jk} \cdot \beta_{jk} \right) \cdot f'(f'(f))
 \end{aligned}$$

En general, por inducción, tenemos que

$$\begin{cases} K_i^{(q)}|_{h=0} = \sum_{\varrho(\tau)=q} \gamma(\tau) \cdot \phi_i(\tau) \cdot \alpha(\tau) \cdot F(\tau)(y_0) \\ u_i^{(q)}|_{h=0} = \sum_{\varrho(\tau)=q} \gamma(\tau) \cdot \chi_i(\tau) \cdot \alpha(\tau) \cdot F(\tau)(y_0) \end{cases}, \quad 1 \leq i \leq s, \quad q \geq 1,$$

donde  $\gamma(\tau)$  y  $\alpha(\tau)$  representan la densidad y cardinal del árbol  $\tau$  (definidos en la Sección 2.1) y

- $\chi_i(\tau) = \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \phi_j(\tau), 1 \leq i \leq s, \forall \tau \in T,$
- $\phi_i(\tau) = \begin{cases} 1, & \text{si } \tau = \tau_0, \\ \sum_{j=1}^i \beta_{ij} \cdot \phi_j(\tau_1), & \text{si } \tau = [\tau_1], \text{ con } \varrho(\tau_1) \geq 1, \\ \chi_i(\tau_1) \cdot \dots \cdot \chi_i(\tau_n), & \text{si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m], \varrho(\tau_p) \geq 1, 1 \leq p \leq m, m \geq 2 \end{cases}$

De forma matricial  $\chi(\tau) = (\chi_1(\tau), \dots, \chi_s(\tau))^T = A \cdot \phi(\tau)$ , con  $\phi(\tau) = (\phi_1(\tau), \dots, \phi_s(\tau))^T$  cumpliendo

$$\begin{cases} \phi(\tau_0) = e \\ \phi([\tau_1]) = \beta \cdot \phi(\tau_1), \text{ con } \beta := A + \Gamma = (\alpha_{ij} + \gamma_{ij})_{i,j=1}^s \\ \phi(\tau) = \chi(\tau_1) \bullet \dots \bullet \chi(\tau_n) = [A\phi(\tau_1)] \bullet \dots \bullet [A\phi(\tau_n)], \text{ si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m], m \geq 2. \end{cases} \quad (4.15)$$

Luego, la solución de avance del método ROW se puede expresar como:

$$\begin{aligned}
 y_1 &= y_0 + \sum_{i=1}^s b_i K_i = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i \left\{ \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q!} \cdot K_i^{(q)}|_{h=0} \cdot h^q \right\} \\
 &= y_0 + \sum_{i=1}^s b_i \cdot \sum_{q=1}^{\infty} \frac{h^q}{q!} \sum_{\varrho(\tau)=q} \gamma(\tau) \cdot \phi_i(\tau) \cdot \alpha(\tau) \cdot F(\tau)(y_0) \\
 &= y_0 + \sum_{\tau \in T} \gamma(\tau) \left( \sum_{i=1}^s b_i \phi_i(\tau) \right) \cdot \alpha(\tau) \cdot F(\tau)(y_0) \cdot \frac{h^{\varrho(\tau)}}{\varrho(\tau)!} \\
 &= y_0 + \sum_{\tau \in T} \omega(\tau) \cdot \alpha(\tau) \cdot F(\tau)(y_0) \cdot \frac{h^{\varrho(\tau)}}{\varrho(\tau)!}
 \end{aligned}$$

siendo  $\omega(\tau) = \gamma(\tau) \cdot b^T \cdot \phi(\tau)$  y  $\phi(\tau)$  definida en (4.15).





Comparando los desarrollos en serie para  $y_1$  e  $y(t_0 + h)$  se obtiene que el método ROW es consistente de orden  $p$  si y solo si:

$$\omega(\tau) = 1, \quad \forall \tau \in T, \quad \varrho(\tau) \leq p,$$

o bien

$$b^T \cdot \phi(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}, \quad \forall \tau \in T, \quad \varrho(\tau) \leq p. \quad (4.16)$$



$p$	Diferencial elemental	Árbol	Condición de orden
1	$f$	$\bullet$	$b^T e = 1$
2	$f'(f)$		$b^T \beta e = \frac{1}{2}$
3	$f''(f, f)$ $f'(f'(f))$		$b^T c^2 = \frac{1}{3}$ $b^T \beta^2 e = \frac{1}{6}$
4	$f'''(f, f, f)$ $f''(f'(f), f)$ $f'(f''(f, f))$ $f'(f'(f'(f)))$		$b^T c^3 = \frac{1}{4}$ $b^T (c \bullet A \beta e) = \frac{1}{8}$ $b^T \beta c^2 = \frac{1}{12}$ $b^T \beta^3 e = \frac{1}{24}$
5	$f^{iv}(f, f, f, f)$ $f'''(f'(f), f, f)$ $f''(f''(f, f), f)$ $f''(f'(f'(f)), f)$ $f''(f'(f), f'(f))$ $f'(f''''(f, f, f))$ $f'(f''(f'(f), f))$ $f'(f'(f''(f, f)))$ $f'(f'(f'(f'(f))))$		$b^T c^4 = \frac{1}{5}$ $b^T (A \beta e \bullet c^2) = \frac{1}{10}$ $b^T (A c^2 \bullet c) = \frac{1}{15}$ $b^T (A \beta^2 e \bullet c) = \frac{1}{30}$ $b^T (A \beta e)^2 = \frac{1}{20}$ $b^T \beta c^3 = \frac{1}{20}$ $b^T \beta (A \beta e \bullet c) = \frac{1}{40}$ $b^T \beta^2 c^2 = \frac{1}{60}$ $b^T \beta^4 e = \frac{1}{120}$

**Tabla 4.1.** Condiciones de orden 5 para un método ROW( $A, \Gamma, b$ ), con  $c = Ae$ .

Considerando (4.15) y (4.16) presentamos en la Tabla 4.1 las condiciones de orden para un método ROW( $A, \Gamma, b$ ), donde denotamos  $\beta := A + \Gamma$  y  $c = A \cdot e$ .

Observamos que para un mismo orden  $p$ , un método RK y un método ROW deben satisfacer la misma cantidad de condiciones de orden, aunque sean distintas. De hecho, las condiciones para métodos RK se obtienen poniendo  $\beta = A$  en la Tabla 4.1.

**Ejemplo 4.1** Métodos ROW de una etapa.

El método  $\begin{cases} K_1 = h \cdot f(y_0) + h \cdot \gamma \cdot J \cdot K_1 \\ y_1 = y_0 + K_1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} (I - \gamma \cdot h \cdot J) \cdot K_1 = h \cdot f(y_0) \\ y_1 = y_0 + K_1 \end{cases}$  es de orden  $p = 1, \forall \gamma \in \mathbb{R}, \gamma \neq \frac{1}{2}$ , y de orden  $p = 2$  si  $\gamma = \frac{1}{2}$ .

**Ejemplo 4.2** Métodos ROW de dos etapas, con  $\gamma_{ii} = \gamma, 1 \leq i \leq 2$ :

$$\begin{cases} K_1 = hf(y_0) + \gamma hJK_1 \\ K_2 = hf(y_0 + \alpha_{21}K_1) + \gamma_{21}hJK_1 + \gamma hJK_2 \\ y_1 = y_0 + b_1K_1 + b_2K_2 \end{cases}$$

Asumiendo  $b_2 \neq 0$  (pues si no, no se usaría  $K_2$ ), el método es de orden  $p \geq 2$  si

$$\begin{cases} b_1 = 1 - b_2 \\ (1 - b_2) \cdot \gamma + b_2 \cdot (\beta_{21} + \gamma) = \frac{1}{2} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} b_1 = 1 - b_2 \\ \beta_{21} = \frac{\frac{1}{2} - \gamma}{b_2} \end{cases}, \quad \beta_{21} = \alpha_{21} + \gamma_{21}. \quad (4.17)$$

Esto es,  $p \geq 2 \Leftrightarrow b_1 = 1 - b_2, \gamma_{21} = -\alpha_{21} + \frac{(\frac{1}{2} - \gamma)}{b_2}$ , con  $b_2 \neq 0$ .

Si se imponen las condiciones de orden 3:

$$\begin{cases} b_2 \cdot \alpha_{21}^2 = \frac{1}{3} \\ (1 - b_2) \cdot \gamma^2 + (2 \cdot \gamma \beta_{21} + \gamma^2) \cdot b_2 = \frac{1}{6} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha_{21}^2 = \frac{1}{3b_2} \\ \beta_{21} = \frac{\frac{1}{6} - \gamma^2}{2 \cdot \gamma \cdot b_2} \end{cases}. \quad (4.18)$$

De igualar  $\beta_{21}$  en (4.17)-(4.18) sigue que  $\gamma^2 - \gamma + \frac{1}{6} = 0$ , esto es,  $\gamma = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}$ . Se obtienen así 4 familias uniparamétricas de métodos de orden 3 (ninguno con  $p = 4$ )

$$\gamma = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}, \quad b_1 = 1 - b_2, \quad \alpha_{21} = \pm \frac{1}{\sqrt{3b_2}}, \quad \gamma_{21} = -\alpha_{21} + \frac{(\frac{1}{2} - \gamma)}{b_2}, \quad \text{con } b_2 \neq 0. \quad (4.19)$$

## 4.4. Consistencia de métodos W.

Consideramos ahora el método  $W(A, \Gamma, b)$  de  $s$  etapas

$$\begin{cases} K_i = h \cdot f(y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot K_j) + h \cdot W \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j, & 1 \leq i \leq s \\ y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s b_i \cdot K_i \end{cases} \quad (4.20)$$

aplicado al PVI autónomo  $\begin{cases} y' = f(y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$ ,  $y, f \in \mathbb{R}^m$ , con paso  $h > 0$ , donde ahora

$W \in \mathbb{R}^{m \times m}$  es una matriz arbitraria. El estudio de consistencia para el método (4.20) lo llevaremos a cabo de modo análogo al caso de métodos ROW. Sin embargo, dado que  $W \neq f'(y_0)$  en general se requerirá la introducción de nuevas diferenciales elementales (y árboles correspondientes) asociadas a la matriz  $W$ . Como en el caso de métodos ROW, denotamos  $u_i := y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} K_j$ ,  $1 \leq i \leq s$ . Así:

$$\begin{aligned} K_i^{(q)}|_{h=0} &= q \cdot [f(u_i)]^{(q-1)}|_{h=0} + q \cdot W \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \cdot K_j^{(q-1)}|_{h=0} \\ u_i^{(q)}|_{h=0} &= \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot K_j^{(q)}|_{h=0}, \quad 1 \leq i \leq s \\ y_1^{(q)}|_{h=0} &= \sum_{i=1}^s b_i \cdot K_i^{(q)}|_{h=0} \end{aligned} \quad (4.21)$$

para  $q \geq 1$ , siendo  $K_i^{(0)}|_{h=0} = 0$ ,  $1 \leq i \leq s$ . Nuevamente, aplicando la regla de la cadena:

$$K_i^{(1)} = f(y_0)$$

$$K_i^{(2)} = 2 \cdot f'(y_0) \cdot u_i^{(1)} + 2 \cdot W \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} K_j^{(1)}$$

$$K_i^{(3)} = 3 \cdot \left\{ f''(y_0)[u_i^{(1)}, u_i^{(1)}] + f'(y_0)u_i^{(2)} \right\} + 3W \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} K_j^{(2)}$$

$$K_i^{(4)} = 4 \left\{ f'''(y_0)[u_i^{(1)}, u_i^{(1)}, u_i^{(1)}] + 3f''(y_0)[u_i^{(2)}, u_i^{(1)}] + f'(y_0)u_i^{(3)} \right\} + 4W \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} K_j^{(3)},$$


donde  $K_i^{(q)}$ ,  $u_i^{(q)}$  están evaluadas en  $h = 0$ . Luego, tenemos que (entendiendo que  $f$  y sus derivadas de Fréchet se evalúan en  $y_0$ ):

$$K_i^{(1)} = 1 \cdot f$$

$$u_i^{(1)} = 1 \cdot \left( \sum_j \alpha_{ij} \right) f$$

$$K_i^{(2)} = (1 \cdot 2) \left( \sum_j \alpha_{ij} \right) f'(f) + (1 \cdot 2) \left( \sum_j \gamma_{ij} \right) W f$$

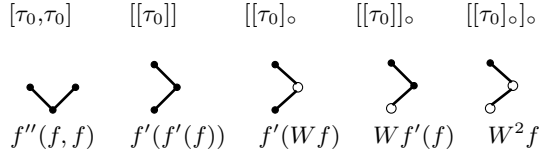
$$u_i^{(2)} = (1 \cdot 2) \left( \sum_{j,k} \alpha_{ij} \cdot \alpha_{jk} \right) f'(f) + (1 \cdot 2) \left( \sum_{j,k} \alpha_{ij} \cdot \gamma_{jk} \right) W f.$$

Observamos en este punto que, a diferencia de los métodos RK y ROW, aparece una nueva diferencial elemental  $Wf(y_0)$  asociada a la matriz  $W$ . Asociaremos a esta diferencial el grafo  donde el nodo  $\circ$  estará asociado a la matriz  $W$ . Veremos a continuación que este tipo de nodos solo pueden tener una ramificación. Esto es consecuencia de la multiplicación por  $W$  en (4.21).

$$\begin{aligned} K_i^{(3)} &= (1 \cdot 3) \cdot \left( \sum_j \alpha_{ij} \right) \cdot \left( \sum_k \alpha_{ik} \right) f''(f, f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k} \alpha_{ij} \alpha_{jk} \right) \cdot f'(f'(f)) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \\ &\quad \left( \sum_{j,k} \alpha_{ij} \gamma_{jk} \right) f'(Wf) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k} \gamma_{ij} \alpha_{jk} \right) \cdot W f'(f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k} \gamma_{ij} \gamma_{jk} \right) \cdot W^2 f \end{aligned}$$

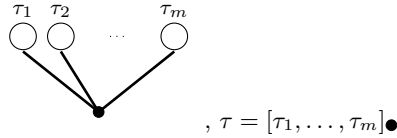
$$\begin{aligned} u_i^{(3)} &= (1 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k,l} \alpha_{ij} \alpha_{jk} \alpha_{kl} \right) \cdot f''(f, f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k,l} \alpha_{ij} \alpha_{jk} \alpha_{kl} \right) \cdot f'(f'(f)) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \\ &\quad \left( \sum_{j,k,l} \alpha_{ij} \alpha_{jk} \gamma_{kl} \right) \cdot f'(Wf) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k,l} \alpha_{ij} \gamma_{jk} \alpha_{kl} \right) \cdot W f'(f) + (1 \cdot 2 \cdot 3) \cdot \left( \sum_{j,k,l} \alpha_{ij} \gamma_{jk} \gamma_{kl} \right) W^2 f, \end{aligned}$$

donde intervienen las siguientes diferenciales y grafos asociados



**Definición 4.3** El conjunto de árboles TW se define recursivamente como sigue:

1. El grafo  $\bullet$  con un único vértice pertenece a TW, y lo denotamos por  $\tau_0$ ;
2. Si  $\tau_1, \dots, \tau_m \in TW$ ,  $m \geq 1$ , entonces el grafo que se obtiene al injertar  $\tau_1, \dots, \tau_m$  a un nuevo vértice de tipo  $\bullet$  también pertenece a TW. Pondremos  $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_m]_\bullet$ .



3. Si  $\tau_1 \in TW$  entonces el grafo que se obtiene al injertar  $\tau_1$  a un nuevo vértice del tipo  $\circ$  también pertenece a TW. Pondremos  $\tau = [\tau_1]_\circ$ .

**Nota 4.6**

1. El conjunto de árboles T es un subconjunto propio de TW.
2. Las definiciones de orden ( $\varrho(\tau)$ ), densidad ( $\gamma(\tau)$ ), simetría ( $\sigma(\tau)$ ) y cardinal ( $\alpha(\tau)$ ) para árboles  $\tau \in TW$  son análogas al caso de árboles  $\tau \in T$ . De hecho

$$\varrho(\tau) = \begin{cases} 1 + \varrho(\tau_1) + \dots + \varrho(\tau_m), & \text{si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m]_\bullet, \\ 1 + \varrho(\tau_1), & \text{si } \tau = [\tau_1]_\circ, \end{cases}$$

$$\gamma(\tau) = \begin{cases} \varrho(\tau) \cdot \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(\tau_m), & \text{si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m]_\bullet, \\ \varrho(\tau) \cdot \gamma(\tau_1), & \text{si } \tau = [\tau_1]_\circ, \end{cases}$$

$$\sigma(\tau) = \begin{cases} \sigma(\tau_1) \cdot n_1! \cdot \dots \cdot \sigma(\tau_m) \cdot n_m!, & \tau = [\tau_1, \dots, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_2, \dots, \tau_m, \dots, \tau_m]_\bullet, \\ \sigma(\tau_1), & \text{si } \tau = [\tau_1]_\circ, \end{cases}$$

y  $\alpha(\tau) = \frac{\varrho(\tau)!}{\sigma(\tau) \cdot \gamma(\tau)}$ ,  $\forall \tau \in TW$ . Observar que, dado  $\tau \in TW$ , esto equivale a definir  $\varrho(\tau)$ ,  $\gamma(\tau)$ ,  $\sigma(\tau)$  y  $\alpha(\tau)$  como los correspondientes al árbol  $\hat{\tau} \in T$  obtenido de  $\tau$  cambiando nodos  $\circ$  por nodos  $\bullet$

**Definición 4.4** Para un árbol  $\tau \in TW$ , la diferencial elemental  $F(\tau)$  es una aplicación  $F(\tau) : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$  definida recursivamente por  $F(\tau_0)(y) = f(y)$  y

$$F(\tau)(y) = \begin{cases} f^{(m)}(y)[F(\tau_1)(y), \dots, F(\tau_m)(y)], & \text{si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m]_\bullet, \\ W \cdot F(\tau_1)(y), & \text{si } \tau = [\tau_1]_\circ. \end{cases}$$

Teniendo en cuenta estos prolegómenos, retomando el desarrollo de (4.21), por inducción podemos escribir

$$K_i^{(q)}|_{h=0} = \sum_{\substack{\varrho(\tau)=q \\ \tau \in TW}} \gamma(\tau) \phi_i(\tau) \alpha(\tau) F(\tau)(y_0),$$

$$u_i^{(q)}|_{h=0} = \sum_{\substack{\varrho(\tau)=q \\ \tau \in TW}} \gamma(\tau) \chi_i(\tau) \alpha(\tau) F(\tau)(y_0), \quad 1 \leq i \leq s, \quad q \geq 1,$$

donde para  $\tau \in TW$ ,  $\chi_i(\tau) = \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot \phi_j(\tau)$ ,  $1 \leq i \leq s$ , y

$$\begin{cases} 1, & \text{si } \tau = \tau_0 \\ \chi_i(\tau_1) \cdot \dots \cdot \chi_i(\tau_m), & \text{si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m]_{\bullet}, \\ \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \phi_j(\tau_1), & \text{si } \tau = [\tau_1]_{\circ}, \end{cases}, \quad 1 \leq i \leq s$$

Nuevamente, en forma matricial,  $\chi(\tau) = (\chi_1(\tau), \dots, \chi_s(\tau))^T = A \cdot \phi(\tau)$ , y para  $\phi(\tau) = (\phi_1(\tau), \dots, \phi_s(\tau))^T$ :

$$\begin{aligned} \phi(\tau_0) &= e, \\ \phi(\tau) &= \chi(\tau_1) \bullet \dots \bullet \chi(\tau_m) = [A\phi(\tau_1)] \bullet \dots \bullet [A\phi(\tau_m)], \quad \text{si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m]_{\bullet}, \\ \phi(\tau) &= \Gamma \cdot \phi(\tau_1), \quad \text{si } \tau = [\tau_1]_{\circ}. \end{aligned} \tag{4.22}$$

Además, la solución de avance del método W se escribirá entonces como  $y_1 = y_0 + \sum_{\tau \in TW} \omega(\tau) \alpha(\tau) F(\tau)(y_0) \cdot \frac{h \varrho(\tau)}{\varrho(\tau)!}$ , siendo  $\omega(\tau) = \gamma(\tau) b^T \phi(\tau)$  y  $\phi(\tau)$  definida en (4.22). Comparando entonces los desarrollos en serie para  $y_1$  e  $y(t_0 + h)$  se obtiene el siguiente teorema.

**Teorema 4.3.** *Un método W (4.20), con W arbitraria, es consistente de orden p si y solo si*

$$\begin{cases} b^T \phi(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}, & \forall \tau \in T, \\ b^T \phi(\tau) = 0, & \forall \tau \in TW \setminus T, \end{cases} \quad \text{con } \varrho(\tau) \leq p.$$

De (4.21) y (4.22), presentamos en la Tabla 4.2 las condiciones de orden para un método  $W(A, \Gamma, b)$ , siendo  $c = Ae$ ; observamos en dicha tabla que para alcanzar orden  $p = 3$  se requieren ahora 8 condiciones de orden, mientras que para  $p = 4$  se requieren 21 [5, p.116].

orden p	1	2	3	4	5	6	7	8
$n^{\varrho}$ de condiciones de orden	1	3	8	21	58	166	498	1540

**Ejemplo 4.3** Métodos W de una etapa

$$\begin{cases} K_1 = h \cdot f(y_0) + h \cdot \gamma W K_1 \\ y_1 = y_0 + K_1 \end{cases}$$

es de orden  $p = 1$ ,  $\forall \gamma \in \mathbb{R}$ . No existen métodos de una etapa y  $p = 2$ , pues no se cumple  $b^T Ae = \frac{1}{2}$ .

**Ejemplo 4.4** Métodos W de dos etapas, con  $\gamma_{ii} = \gamma$ ,  $1 \leq i \leq 2$ .

$$\begin{cases} K_1 = h \cdot f(y_0) + \gamma \cdot hW \cdot K_1 \\ K_2 = h \cdot f(y_0 + \alpha_{21} K_1) + \gamma_{21} hW K_1 + \gamma hW k_2, \text{ es de orden } p \geq 2 \text{ si y solo si} \\ y_1 = y_0 + b_1 K_1 + b_2 K_2 \end{cases}$$

$$b_1 + b_2 = 1 \quad \Rightarrow \quad b_1 = 1 - b_2,$$

$$(1 - b_2, b_2) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \alpha_{21} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \Leftrightarrow \alpha_{21} = \frac{1}{2b_2}, \quad b_2 \in \mathbb{R} \setminus \{0\},$$

$$(1 - b_2, b_2) \cdot \begin{pmatrix} \gamma & 0 \\ \gamma_{21} & \gamma \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \Leftrightarrow \gamma_{21} = -\frac{\gamma}{b_2}, \quad \gamma \in \mathbb{R}.$$

Ninguno de estos métodos alcanza orden 3 (en particular, porque  $Ac = A^2e = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$  y  $b^T Ac = 0 \neq \frac{1}{6}$ ).

**Teorema 4.4.** *El orden de consistencia  $p$  de un método  $W(A, \Gamma, b)$  de  $s$  etapas verifica  $p \leq s$ .*

**Demostración:**

Si  $p \geq s + 1$ , entonces  $b^T A^s e = \frac{1}{s!}$ . Como  $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$  es estrictamente triangular inferior:  $A^s = 0$  y tenemos un absurdo. Luego  $p \leq s$ . ■

s	1	2	3
$\frac{p_{DIRK}^*}{s}$	2	3	4
$\frac{p_{ROW}^*}{s}$	2	3	4
$\frac{p_W^*}{s}$	1	2	2

**Tabla 4.3.** Orden máximo alcanzable por los métodos DIRK, ROW y W de  $s$  etapas.




**Nota 4.7** No existen métodos W de  $s = 3$  etapas y orden  $p = 3$  [6], siendo  $W$  arbitraria. En dicho trabajo se dan ejemplos de métodos W con  $s = 4$  y  $p = 3$ . En [9, p. 404] se presenta un ejemplo de método W con  $s = 3$  y  $p = 2$ .

**Nota 4.8** El hecho de que la matriz  $W$  en un método W sea una aproximación arbitraria al jacobiano exacto  $J = f'(y_0)$ , produce un aumento considerable en el número de condiciones de orden que debe satisfacer para alcanzar un orden de consistencia  $p$  dado. Así, para una cantidad de etapas  $s \geq 3$  se espera obtener un orden de consistencia  $p < s$ .

El número de condiciones de orden para un método W se reduce ligeramente si se asume que  $W = J + \mathcal{O}(h)$ ,  $h \rightarrow 0$ . Es decir,  $W$  es al menos una aproximación de primer orden al jacobiano exacto. En este caso, el método W alcanza orden  $p$  si y solo si cumple las condiciones de orden  $1 \leq q \leq p - 1$  para métodos W arbitrarios y las condiciones de orden para árboles  $\tau \in T$ , con  $\varrho(\tau) = p$ , del método Rosenbrock asociado. Por ejemplo, las condiciones de orden  $p$ ,  $1 \leq p \leq 4$ , para un método W, con  $W = J + \mathcal{O}$ ,  $h \rightarrow 0$ , quedan como sigue

- p=1:  $b^T e = 1$
- p=2:  $b^T e = 1, b^T \beta e = \frac{1}{2}$
- p=3:  $b^T e = 1, b^T c = \frac{1}{2}, b^T \Gamma e = 0, b^T c^2 = \frac{1}{3}, b^T \beta^2 e = \frac{1}{6}$
- p=4:  $b^T e = 1, b^T c = \frac{1}{2}, b^T \Gamma e = 0, b^T c^2 = \frac{1}{3}, b^T Ac = \frac{1}{6}, b^T A \Gamma e = b^T \Gamma A e = b^T \Gamma^2 e = 0, b^T c^3 = \frac{1}{4}, b^T (c \bullet A \beta e) = \frac{1}{8}, b^T \beta c^2 = \frac{1}{12}, b^T \beta^3 e = \frac{1}{24}$

Por lo tanto, el número de condiciones de orden 3 y 4 se reduce de 8 a 5 y de 21 a 12, respectivamente. Con esta simplificación es posible construir métodos W de 3 etapas y orden 3.

$p$	Diferencial elemental	Árbol	Condición de orden
1	$f$	•	$b^T e = 1$
2	$f'(f)$ $Wf$		$b^T Ae = \frac{1}{2} = b^T c$ $b^T \Gamma e = 0$
3	$f''(f, f)$ $f'(f'(f))$ $f'(Wf)$ $Wf'(f)$ $W^2 f$		$b^T c^2 = \frac{1}{3}$ $b^T Ac = \frac{1}{6}$ $b^T A\Gamma e = 0$ $b^T \Gamma Ae = 0$ $b^T \Gamma^2 e = 0$
4	$f'''(f, f, f)$ $f''(f'(f), f)$ $f'(f''(f, f))$ $f'(f'(f'(f)))$ $f''(Wf, f)$ $Wf''(f, f)$ $f'(f'(Wf))$ $f'(Wf'(f))$ $Wf'(f'(f))$ $f'(W^2 f)$ $Wf'(Wf)$ $W^2 f'(f)$ $W^3 f$		$b^T c^3 = \frac{1}{4}$ $b^T (c \bullet Ac) = \frac{1}{8}$ $b^T Ac^2 = \frac{1}{12}$ $b^T A^2 c = \frac{1}{24}$ $b^T (c \bullet A\Gamma e) = 0$ $b^T \Gamma c^2 = 0$ $b^T A^2 \Gamma e = 0$ $b^T A\Gamma c = 0$ $b^T \Gamma Ac = 0$ $b^T A\Gamma^2 e = 0$ $b^T \Gamma A\Gamma e = 0$ $b^T \Gamma^2 c = 0$ $b^T \Gamma^3 e = 0$

**Tabla 4.2.** Condiciones de orden 4 para un método  $W(A, \Gamma, b)$ , con  $c = Ae$ .

s	1	2	3
$P_{DIRK}^*$	2	3	4
$P_{ROW}^*$	2	3	4
$P_W^*$	2	3	3

**Tabla 4.4.** Orden máximo alcanzable por los métodos DIRK, ROW y W, con  $W = J + \mathcal{O}(h)$ , de  $s$  etapas.

**Ejemplo 4.5** Métodos W de una etapa, con  $W = J + \mathcal{O}(h)$ :

$$\begin{cases} K_1 = h \cdot f(y_0) + h \cdot \gamma W K_1 \\ y_1 = y_0 + K_1 \end{cases}, \text{ alcanza orden 2 con } W = J + \mathcal{O}(h), \text{ si } \gamma = \frac{1}{2}.$$

**Ejemplo 4.6** Métodos W de dos etapas, con  $W = J + \mathcal{O}(h)$

$$\begin{cases} K_1 = h \cdot f(y_0) + h\gamma W K_1 \\ K_2 = h \cdot f(y_0 + \alpha_{21} K_1) + \gamma_{21} h W K_1 + \gamma h W K_2 \\ y_1 = y_0 + b_1 K_1 + b_2 K_2 \end{cases}, \text{ alcanza orden 3 con } W = J + \mathcal{O}(h), \text{ si y solo si}$$

$b_1 = \frac{1}{4}, b_2 = \frac{3}{4}, \alpha_{21} = \frac{2}{3}, \gamma_{21} = \frac{-2}{9} \cdot (3 \pm \sqrt{3}), \gamma = \frac{1}{6} \cdot (3 \pm \sqrt{3})$ , esto es, se obtienen dos métodos de orden 3.

## 4.5. Ilustración numérica.

Dedicamos el último apartado de esta memoria a ilustrar el orden de convergencia y comparar la eficiencia de métodos SDIRK, ROW, y W a paso fijo sobre algunos problemas diferenciales. En concreto consideramos:

1. Las ecuaciones de Euler del sólido rígido [4, p. 277]:

$$\begin{cases} y_1' = (a - b)y_2 \cdot y_3, & y_1(0) = 0, \\ y_2' = (1 - a)y_3 \cdot y_1, & y_2(0) = 1, \\ y_3' = (b - 1)y_1 \cdot y_2, & y_3(0) = 1, \end{cases} \quad t \in [0, T], \quad T = 20, \quad (4.23)$$

$$\text{con } a := 1 + \frac{1}{\sqrt{1.51}}, \quad b := 1 - \frac{0.51}{1.51}.$$

2. La ecuación de Kepler para el problema de dos cuerpos [4, p. 9,12]

$$\begin{cases} y_1'' = -\frac{y_1}{(y_1^2 + y_2^2)^{3/2}}, & y_1(0) = 1 - e, \quad y_1'(0) = 0, \\ y_2'' = -\frac{y_2}{(y_1^2 + y_2^2)^{3/2}}, & y_2(0) = 0, \quad y_2'(0) = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}}, \end{cases} \quad t \in [0, T], \quad T = 4\pi, \quad (4.24)$$

$$\text{con } e := 0'4.$$

Los integradores numéricos considerados son

- el método SDIRK de una etapa y orden 2, con  $\gamma = \frac{1}{2}$ , denotado por SDIRK1;
- el método SDIRK de dos etapas y orden 3, con  $\gamma = \frac{3+\sqrt{3}}{6}$ , denotado por SDIRK2. [5, p. 97];
- el método ROW de una etapa y orden 2, con  $\gamma = \frac{1}{2}$ , ROW1 (ver Ejemplo 4.1);

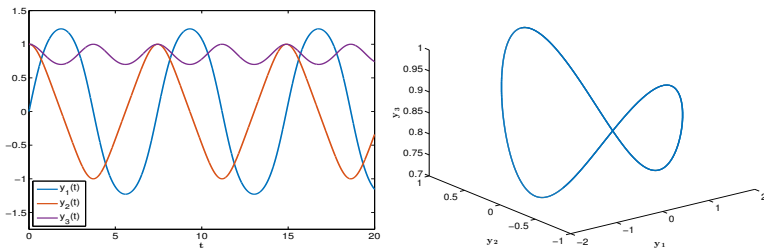


- el método ROW de dos etapas y orden 3, con  $\gamma = \frac{3+\sqrt{3}}{6}$ ,  $b_2 = \frac{3}{4}$  y  $\alpha_{21} = \frac{2}{3}$ , ROW2 (ver Ejemplo 4.2);
- el método W de una etapa, con  $\gamma = \frac{1}{2}$  (ver Ejemplos 4.3 y 4.5);
- el método W de dos etapas, con  $\gamma = \frac{3+\sqrt{3}}{6}$  y  $b_2 = \frac{3}{4}$  (ver Ejemplos 4.4 y 4.6).

Para cada uno de estos métodos W consideramos dos variantes respecto a la elección de las matrices  $W$  que los definen:

1.  $W_n = f'(y(0))$ ,  $n \geq 0$ , esto es,  $W_n$  se toma constante e igual a la matriz jacobiana de  $f$  en el valor inicial. Denotamos a los métodos  $W$  de 1 y 2 etapas resultantes como  $W1$  y  $W2$ .
2.  $W_{10 \cdot j + k} = f'(y_{10 \cdot j})$ ,  $k = 0, \dots, 9$ ,  $\forall j \geq 0$ , esto es,  $W_n$  se actualiza mediante la matriz jacobiana de  $f$  evaluada en la solución numérica cada 10 pasos consecutivos. En otras palabras,  $W_n$  es constante durante 10 pasos consecutivos. Denotamos a los métodos  $W$  de 1 y 2 etapas resultantes como  $W1(lag = 10)$  y  $W2(lag = 10)$ .

Aplicamos los 8 métodos así obtenidos a los problemas (4.23) y (4.24) considerando redes temporales uniformes con tamaño de paso  $h = \frac{T}{N}$ ,  $N = 250 \cdot 2^l$ , para  $l = 1, 2, \dots, 8$ . En las Figuras 4.2 y 4.4 se muestran los errores de cada método, para cada  $l = 1, \dots, 8$ , en comparación al tiempo de CPU (medido en un procesador intel core i5 a 2'8 GHZ). En dichas figuras se han incluido rectas con trazo discontinuo con pendientes respectivas 1, 2 y 3. Estas rectas permiten observar el orden de convergencia de cada método que coincide con el orden teórico esperado. Para ambos problemas, el método W de 2 etapas y orden 3 con jacobiano actualizado cada 10 pasos ( $W2(lag = 10)$ ) resulta la opción más eficiente.



**Figura 4.1.** Componentes y órbita en la ecuación de Euler (4.23).

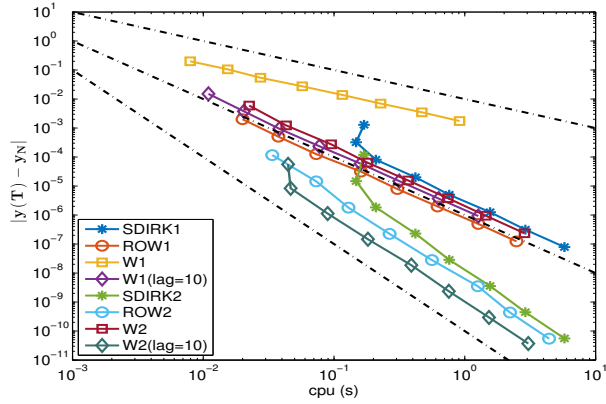


Figura 4.2. Órdenes de convergencia observados en la ecuación de Euler (4.23).

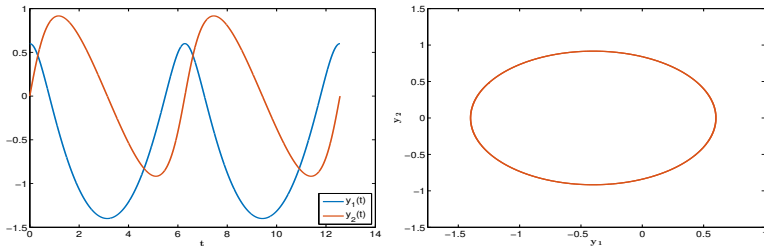


Figura 4.3. Componentes y órbita en la ecuación de Kepler (4.24).

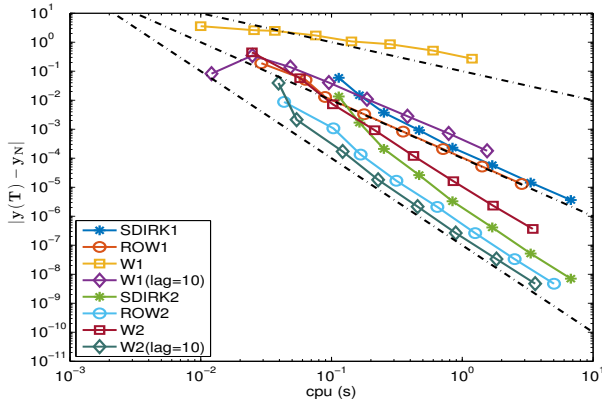


Figura 4.4. Órdenes de convergencia observados en la ecuación de Kepler (4.24).

---

# Bibliografía

- [1] J.C. Butcher, *Numerical methods for Ordinary Differential Equations*, John Wiley (2008).
- [2] M. Calvo, J.I. Montijano, L. Rández, *Métodos de Runge–Kutta para la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias*, Publicaciones de la Universidad de Zaragoza (1984).
- [3] E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, *Geometric Numerical Integration*, Springer–Verlag (2006).
- [4] E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner, *Solving ordinary differential equations I, Nonstiff problems*, Springer–Verlag (2008).
- [5] E. Hairer, G. Wanner, *Solving ordinary differential equations II, Stiff problems*, Springer–Verlag (2002).
- [6] J. Rang, L. Angermann, *New Rosenbrock W-methods of order 3 for PDAEs of Index 1*, BIT 45 (2005), 761–787.
- [7] K. Strehmel, R. Weiner, H. Podhaisky, *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Springer (2012).
- [8] K. Strehmel, R. Weiner, *Linear-implizite Runge-Kutta-Methoden und ihre Anwendung*, Teubner Stuttgart (1992).
- [9] W. Hundsdorfer, J.G. Verwer, *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 33, Berlin (2003).



# Métodos de tipo Runge-Kutta y linealmente implícitos para la resolución de EDOs.



Daniel Machín González

Facultad de Ciencias · Sección de Matemáticas  
Universidad de La Laguna

alu0101061283@ull.edu.es

## Abstract

IN THIS MANUSCRIPT we give an introduction to numerical methods to solve ordinary differential equations. To begin with, we define the concepts of stability, consistency and convergence for one-step methods. Through the Butcher tree theory we were able to give a characterization of the conditions that must be met to increase the convergence of the method. Then, we present some new methods based on Gauss, Radau and Lobatto quadratures, and RK collocation methods. We also present some methods that require less computational effort, the DIRK and SDIRK methods, as well as ROW and W type methods. Finally, we look for methods that are also computationally efficient.

## 1. Introduction

AN initial value problem for an ODE is defined as follows:

$$\begin{cases} y' = f(t, y), t \in [t_0, T], y, f \in D \subseteq \mathbb{R}^m \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

We present, and give examples, of some one-step methods to solve the previous problem. In particular, the Runge-Kutta methods:

$$\begin{cases} K_i = f(t_0 + c_i \cdot h, y_0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j), \quad 1 \leq i \leq s, \\ y_1 = y_0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i K_i, \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array} \equiv \frac{c}{b} \bigg| \frac{A}{b^T}$$

Table 1: Butcher Table. This table define an RK method.

## 2. B-series

TO give a solution to the problem of finding new methods with higher order of convergence, we introduce a graph theory, associating elementary differentials to a graph.

$$f'''(f, f, f) \leftrightarrow \text{graph} \quad f''(f'(f), f) \leftrightarrow \text{graph}$$

Table 2: An example of how the graphs are associated to the elementary differential.

Given an application  $a : T \cup \{\phi\} \rightarrow \mathbb{R}$ , a B-series is a formal series defined as follows

$$B(a, y) = a(\phi)y + \sum_{\tau \in T} \frac{a(\tau)}{\sigma(\tau)} F(\tau)(y) h^{\sigma(\tau)}$$

This is a key definition that allows us to describe the conditions of convergence for an RK method.

## 3. Order simplifying conditions

THE CONDITIONS obtained with the theory presented before, can be simplified by the introduction of simplifying conditions,

- $C(p): b^T c^{j-1} = \frac{1}{j}, 1 \leq j \leq p.$

- $D(r): (bc^{j-1})^T = \frac{1}{j}(b - bc^j)^T, 1 \leq j \leq r.$

Thanks to this, we can find new methods after analyzing the implications of the conditions previously presented. These allows the construction of high order implicit methods, such as those based on Radau-Lobatto quadrature and collocation methods.

### Butcher's Theorem:

If an RK(A,b,c) verifies B(p), C(q) y D(r), with  $p \leq 2q + 2$  and  $p \leq q + r + 1$ , then the order of the method is p.

## 4. DIRK ROW and W methods.

IN ORDER to simplify the computation, we consider diagonally implicit Runge-Kutta methods (DIRK) and singly-diagonally implicit R-K methods (SDIRK). To further reduce the computational cost associated to the staged equation, we also introduce ROW and W methods.

$$\begin{cases} K_i = h \cdot f(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} K_j) + h \cdot W_n \cdot \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} K_j, \quad 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s b_i K_i \end{cases} \quad (2)$$

## 5. Numerical illustration.

FINALLY we give a numerical illustration comparing the order of convergence of different methods applied to the Euler equations of a rigid body,

$$\begin{cases} y_1' = (a-b)y_2 \cdot y_3, & y_1(0) = 0, \\ y_2' = (1-a)y_3 \cdot y_1, & y_2(0) = 1, \\ y_3' = (b-1)y_1 \cdot y_2, & y_3(0) = 1, \end{cases} \quad t \in [0, T], T = 20, \quad (3)$$

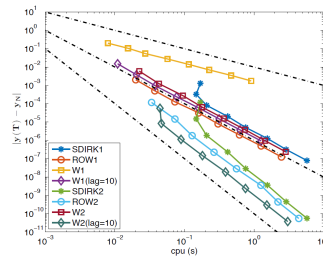


Figure 1: Observed convergence order in the Euler equation.

## References

- [1] E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner, *Solving ordinary differential equations I, Nonstiff problems*, Springer-Verlag (2008).
- [2] E. Hairer, G. Wanner, *Solving ordinary differential equations II, Stiff problems*, Springer-Verlag (2002).
- [3] K. Strehmel, R. Weiner, *Linear-implizite Runge-Kutta-Methoden und ihre Anwendung*, Teubner Stuttgart (1992).