

Fabrício Adolfo Veríssimo

**Métodos Estendidos de Passo Um para
Solução Numérica de Equações
Diferenciais Ordinárias**



**MÉTODOS ESTENDIDOS DE PASSO
UM PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
ORDINÁRIAS**

Fabício Adolfo Veríssimo

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada
MAP-035

Métodos Estendidos de Passo Um para Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

Fabício Adolfo Veríssimo

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

Orientadora: Profa. Dra. Heloisa Helena Marino Silva



845/99

São José do Rio Preto

1998

já zerocado



“(…)

mesmo que o tempo e a distância digam não

(…)”

Milton Nascimento.



A meus pais, Luiz Carlos e Marlene.

A minha esposa, Adriana.

A minha filha, Tamires.

A meu filho.

Agradecimentos

À Profa. Dra. Heloisa Helena Marino Silva
pela orientação e paciência na elaboração
deste trabalho.

A todos os professores e funcionários,
que de alguma forma contribuíram
durante este período.

A todos os colegas pós-graduandos
pelo companheirismo.

À CAPES, pelo auxílio
financeiro.

A Deus.



Resumo

O objetivo deste trabalho é estudar e analisar uma classe de métodos estendidos, voltados para a resolução numérica de problemas de valor inicial para equações diferenciais ordinárias, principalmente problemas do tipo *stiff*, devido às propriedades de estabilidade desses métodos. Desenvolveremos os passos necessários para a obtenção de famílias de métodos desta classe, das quais, através de uma análise das propriedades de estabilidade, obteremos esquemas particulares A e L —estáveis, que serão utilizados em avaliações computacionais.



Abstract

The purpose of this work is to study a class of extended methods applied to the numerical solution of initial value problems for ordinary differential equations. Special emphasis is given in the application of these methods to stiff problems due to their good stability properties. We have developed the necessary steps for obtaining families of methods of this class. Through the analysis of their stability properties we have derived particular A and L -stable schemes which have been used for computational evaluations.



Índice

Introdução	1
1 Problemas de Valor Inicial	4
1.1 Introdução	4
1.2 Conceitos Básicos	5
1.3 Existência e Unicidade de Solução	6
1.4 Métodos Lineares de Passo Múltiplo	7
1.5 Estabilidade	11
1.6 Aproximações Racionais para a Exponencial	14
2 Métodos Estendidos de Passo Um de Terceira Ordem	18
2.1 Introdução	18
2.2 A Regra Trapezoidal Estendida	19
2.2.1 Análise da Estabilidade para a Regra Trapezoidal Es- tendida	23
2.3 Uma Família de Métodos Estendidos de Terceira Ordem	25

2.3.1	Análise da Estabilidade	30
3	Métodos Estendidos de Passo Um de Quarta Ordem	33
3.1	Introdução	33
3.2	Uma Família de Métodos Estendidos de Quarta Ordem	34
3.3	Análise da Estabilidade	40
4	Forma Geral dos Métodos Estendidos de Passo Um	43
4.1	Introdução	43
4.2	Generalização dos Métodos Estendidos de Passo Um	44
4.3	Obtenção de Métodos Estendidos de Passo Um de Quinta Ordem	46
4.4	Análise da Estabilidade	50
5	Métodos Estendidos de Passo Um de Sexta Ordem	54
5.1	Introdução	54
5.2	Construção de Métodos Estendidos de Passo Um e Ordem $p = 6$	55
5.3	Análise da Estabilidade	59
6	Resultados Numéricos	62
6.1	Introdução	62
6.2	Problemas Testes	62
6.3	Os Resultados	65
6.4	Considerações Finais	82



7 Conclusão**83****Referências Bibliográficas****86**

Introdução

As equações diferenciais ordinárias aparecem freqüentemente quando tentamos modelar um fenômeno ou um experimento, principalmente problemas que descrevem quantitativamente fenômenos físicos, químicos e biológicos. Estas equações, quando associadas a uma condição inicial, constituem o que denominamos um problema de valor inicial.

Em certos casos, não sendo possível determinarmos analiticamente a solução de um problema de valor inicial embora estejam garantidas sua existência e unicidade, surge a necessidade de utilizarmos técnicas numéricas que gerem aproximações para a mesma em diferentes pontos do seu intervalo de existência. Esta necessidade tem estimulado a busca de métodos numéricos que permitem gerar, com o menor esforço computacional possível, aproximações com a precisão desejada.

Dentre estes métodos numéricos voltados para resolução de uma equação diferencial ordinária, encontram-se os Métodos Lineares de Passo Múltiplo que permitem determinar, com um esforço computacional razoável, aproximações com a precisão desejada mas, para problemas do tipo *stiff*, não possuem bons representantes. O objetivo principal deste trabalho é apresentar uma outra classe de métodos denominados Métodos Estendidos.

Os métodos estendidos são obtidos pelo acoplamento de métodos lineares de passo múltiplo e, apesar de serem de passo um, utilizam informações nos pontos imediatamente posteriores ao ponto de integração.

Estes métodos foram originariamente propostos por Usmani e Agarwal [15] e estudados posteriormente por Jacques [9]. Métodos com ordem maior e uma generalização destes foi dada por Chawla *et al.* [4] [5].

O presente trabalho encontra-se subdividido em 7 capítulos. No capítulo 1, apresentaremos alguns conceitos básicos relacionados aos problemas de valor inicial e daremos os principais resultados relacionados aos métodos lineares de passo múltiplo, conforme proposto na literatura consultada, tomando tais conceitos e resultados como base para o desenvolvimento dos capítulos seguintes.

Procuraremos, então, desenvolver, nos capítulos 2 e 3, os passos necessários à obtenção de particulares métodos estendidos de terceira e quarta ordem, respectivamente, que possuam as melhores propriedades de estabilidade, A - e L -estabilidade. No capítulo 4, introduziremos métodos estendidos de passo um, generalizando os métodos de terceira e quarta ordem e, impondo certas restrições sobre a ordem dos erros de truncamento local, mostraremos que a ordem máxima alcançada por métodos dessa classe é cinco. Particulares métodos de quinta ordem, A - e L -estáveis, serão obtidos.

No capítulo 5, a partir da generalização dos métodos estendidos proposta no capítulo 4, contruiremos particulares métodos de sexta ordem A - e L -estáveis, desconsiderando, para isso, as restrições sobre os erros de truncamento local.

No capítulo 6, apresentaremos algumas avaliações computacionais comparando o desempenho dos métodos estudados ao longo dos capítulos anteriores.



Finalmente, no capítulo 7, faremos algumas considerações finais sobre este trabalho.

A fim de tornarmos mais simples o entendimento do conteúdo desta dissertação, procuramos desenvolvê-la da forma mais organizada e detalhada possível, usando uma linguagem singular, podendo vir a ser um ponto de partida àqueles que desejam aprofundar os estudos sobre esses métodos estendidos.



Capítulo 1

Problemas de Valor Inicial

1.1 Introdução

Neste capítulo, introduziremos problemas de valor inicial, que denotaremos por p.v.i., para equações diferenciais ordinárias e apresentaremos alguns resultados teóricos sobre existência e unicidade de solução para esses problemas.

Definiremos a fórmula geral dos métodos lineares de passo múltiplo utilizados para a resolução numérica de problemas de valor inicial. Para esta classe de métodos, definiremos alguns conceitos básicos qualitativos que, ajustados convenientemente, serão utilizados nos capítulos posteriores.

Abordaremos, também, conceitos referentes às propriedades de estabilidade para métodos lineares de passo um, como a A-estabilidade e L-estabilidade, e, para concluir, relacionaremos tais propriedades com a noção de aceitabilidade aplicada as aproximações racionais.

1.2 Conceitos Básicos

Uma equação envolvendo uma função incógnita e suas derivadas com relação a uma ou mais variáveis independentes é chamada de *equação diferencial*. Se a função incógnita depende de uma variável independente, apenas derivadas ordinárias estarão presentes na equação diferencial, que é então denominada *equação diferencial ordinária*.

A forma geral de uma equação diferencial de ordem m é dada por

$$y^{(m)} = f(x, y, y^{(1)}, \dots, y^{(m-1)}), \quad a \leq x \leq b, \quad (1.1)$$

onde $y^{(i)} \equiv \frac{d^i y}{dx^i}$, $i = 1(1)m$, e x é a variável independente.

Considerando uma mudança adequada de variável, podemos reescrever a equação (1.1) como um sistema de m equações diferenciais de primeira ordem, denotado por

$$y' = f(x, y), \quad a \leq x \leq b, \quad (1.2)$$

onde a função incógnita y é um vetor do $\mathbb{R}^m$ representado por

$$y = [{}^1y, {}^2y, \dots, {}^my]^T$$

e

$$f = [{}^1f, {}^2f, \dots, {}^mf]^T,$$

sendo $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m$ uma função geralmente não linear. Para problemas lineares, (1.2) pode ser escrita na forma:

$$y' = A(x)y + q(x), \quad a \leq x \leq b, \quad (1.3)$$

onde a matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$, o vetor $q \in \mathbb{R}^m$ e ambos são funções de x .

Uma equação diferencial ordinária (ou um sistema de equações) definida num dado intervalo, juntamente com condições subsidiárias, as quais

são todas especificadas num mesmo ponto inicial, constitui um *problema de valor inicial* (p.v.i.).

Um sistema de primeira ordem como (1.2) é normalmente suplementado por m condições iniciais, tomando o p.v.i. a seguinte forma:

$$y' = f(x, y), \quad y(a) = \eta, \quad a \leq x \leq b, \quad (1.4)$$

onde

$$\eta = [{}^1\eta, {}^2\eta, \dots, {}^m\eta]^T.$$

1.3 Existência e Unicidade de Solução

Uma solução de um p.v.i. é uma função que, simultaneamente, satisfaz a equação diferencial e verifica todas as condições subsidiárias dadas. Nem todos os problemas possuem uma única solução, ou, de fato, possuem alguma solução. O seguinte teorema fundamental dará condições suficientes sobre $f(x, y)$ que garantem a existência e unicidade da solução, sempre que supusermos, para tais problemas, que as hipóteses do teorema são satisfeitas.

Usaremos como medida entre dois pontos no espaço de dimensão m a *norma do máximo* definida por

$$\|u - v\| \equiv \max_{1 \leq k \leq m} |u_k - v_k|.$$

Teorema 1.3.1 *Seja $f(x, y)$, onde $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m$, definida e contínua para todo (x, y) na região D definida por $a \leq x \leq b$, $-\infty < {}^t y < \infty$, $t = 1(1)m$, onde a e b são finitos, e suponha que exista uma constante L tal que*

$$\|f(x, y) - f(x, y^*)\| \leq L\|y - y^*\| \quad (1.5)$$

para todo $(x, y), (x, y^) \in D$. Então, para qualquer $\eta \in \mathbb{R}^m$, existe uma única solução $y(x)$ para o problema (1.4), onde $y(x)$ é contínua e diferenciável para todo $(x, y) \in D$.*

A condição (1.5) é conhecida como *condição de Lipschitz* e, a constante L , como *constante de Lipschitz*.

A demonstração do teorema para $m = 1$ pode ser encontrada em Henrici [8].

1.4 Métodos Lineares de Passo Múltiplo

Neste trabalho, nos preocuparemos apenas com métodos numéricos para problemas de valor inicial onde a solução será procurada sobre o intervalo $[a, b]$ e admitiremos que as hipóteses do Teorema 1.3.1 são asseguradas.

Todos os métodos numéricos que discutiremos envolvem a idéia de *discretização*, isto é, o intervalo contínuo é substituído por um conjunto discreto de pontos $\{x_n\}$ definidos por $x_n = a + nh$, $n = 0, 1, 2, \dots, N$ e com $h = (b - a)/N$.

O valor h é denominado *comprimento do passo* da discretização construída. Vamos desenvolver os conceitos e as implementações computacionais considerando h uma constante fixa.

Denotaremos por y_n a aproximação da solução $y(x)$ de (1.4) no ponto x_n ,

$$y_n \simeq y(x_n)$$

e o objetivo será produzir uma seqüência de valores $\{y_n\}$ que aproximam a solução de (1.4) sobre o conjunto discreto de pontos $\{x_n\}$. Esta seqüência constitui uma *solução numérica* do problema (1.4).

O caminho a ser considerado será a utilização de métodos numéricos definidos como equações de diferenças, das quais conhecemos um conjunto de soluções y_{n+j} , $j = 0(1)k-1$ e queremos obter y_{n+k} . O valor inteiro k é denomi-



nado número de passos do método numérico. Se $k = 1$, o mesmo é denominado *método de passo um* (ou passo simples) e, caso $k > 1$, *método de passo k* (ou passo múltiplo).

Visando simplificar as notações neste trabalho, vamos considerar, em (1.4), $m = 1$, sem nenhum prejuízo em qualquer resultado, uma vez que, em cada instante, estará claro qual é o objetivo de estudo.

No estudo a ser desenvolvido trabalharemos com a classe dos métodos lineares de passo múltiplo que são definidos como segue:

Definição 1.4.1 Denominamos *método linear de passo múltiplo*, ou *linear de passo k* , todo método numérico para a discretização do p.v.i. (1.4), dado por:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_{n+j}, y_{n+j}), \quad (1.6)$$

onde α_j e β_j são constantes reais sujeitas às condições

$$\alpha_k = 1, \quad |\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0.$$

Os valores numéricos da função f avaliados sobre (x_{n+j}, y_{n+j}) , serão abreviados usando a seguinte notação

$$f_{n+j} := f(x_{n+j}, y_{n+j}), \quad j = 0, 1, \dots, k.$$

A classe dos métodos lineares de passo múltiplo pode ser dividida em duas subclasses:

- Se $\beta_k = 0$, temos a subclasse dos métodos lineares de passo múltiplo *explícitos*.
- Se $\beta_k \neq 0$, temos a subclasse dos métodos lineares de passo múltiplo *implícitos*.

Definição 1.4.2 O operador de diferença linear $\mathcal{L}$ associado ao método linear de passo múltiplo (1.6) é definido por

$$\mathcal{L}[z(x); h] := \sum_{j=0}^k [\alpha_j z(x + jh) - h\beta_j z'(x + jh)], \quad (1.7)$$

onde $z(x) \in C^1[a, b]$ é uma função arbitrária.

Escolhendo a função $z(x)$ diferenciável quantas vezes forem necessárias e fazendo o desenvolvimento em série de Taylor de $z(x + jh)$ e $z'(x + jh)$ em uma vizinhança do ponto x , podemos reescrever o operador $\mathcal{L}$ como

$$\mathcal{L}[z(x); h] = C_0 z(x) + C_1 h z'(x) + \dots + C_q h^q z^{(q)}(x) + \dots \quad (1.8)$$

onde C_q são constantes, $q = 0, 1, 2, \dots$, cujas fórmulas são facilmente estabelecidas:

$$\begin{aligned} C_0 &= \sum_{j=0}^k \alpha_j \\ C_1 &= \sum_{j=0}^k (j\alpha_j - \beta_j) \\ C_q &= \sum_{j=0}^k \left[\frac{1}{q!} j^q \alpha_j - \frac{1}{(q-1)!} j^{q-1} \beta_j \right], \quad q = 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Definição 1.4.3 O método linear de passo múltiplo (1.6) e o operador de diferença associado $\mathcal{L}$, definido por (1.7), têm **ordem** p se, em (1.8), $C_0 = C_1 = \dots = C_p = 0$ e $C_{p+1} \neq 0$. E, ainda, a constante C_{p+1} é denominada **constante de erro do método**.

Na obtenção de um método linear de passo múltiplo dispomos de $2k+1$ parâmetros livres α_j e β_j . Por outro lado, para que um método de passo múltiplo tenha ordem p , devemos ter $C_0 = C_1 = \dots = C_p = 0$. Logo, a ordem máxima alcançável por um método linear de passo múltiplo será:

$p = 2k$, se o método for implícito;

$p = 2k - 1$, se o método for explícito.

Uma medida que nos fornece a precisão de um método linear de passo múltiplo é o erro de truncamento local obtido ao substituímos, em (1.6), as aproximações y_n por $y(x_n)$.

Definição 1.4.4 O erro de truncamento local do método (1.6) em x_{n+k} , denotado por T_{n+k} , é definido por

$$T_{n+k} = \mathcal{L}[y(x_n); h], \quad (1.9)$$

onde $\mathcal{L}$ é o operador de diferença associado definido por (1.7) e $y(x)$ é a solução exata do p.v.i. (1.4).

A natureza local de T_{n+k} pode ser observada se admitirmos a seguinte hipótese artificial, conhecida como *hipótese local*. Supomos que $y_{n+j} = y(x_{n+j})$, $j = 0, 1, \dots, k-1$, e denotamos por $\tilde{y}_{n+k}$ a aproximação em x_{n+k} gerada pelo método (1.6) quando admitimos a hipótese local. Logo,

$$\tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{n+j} = h \beta_k f(x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k}) + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f(x_{n+j}, y_{n+j}). \quad (1.10)$$

Usando (1.9) e (1.10) podemos concluir que

$$T_{n+k} = y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k}. \quad (1.11)$$

Portanto, quando admitimos a hipótese local, o erro de truncamento local resume-se na diferença entre a solução exata e a solução numérica no ponto x_{n+k} .

Estabeleceremos, agora, a relação entre a ordem do método e o comportamento assintótico do erro de truncamento local para h pequeno, quando o método é aplicado a problemas com soluções suficientemente suaves.

Teorema 1.4.1 Se $y \in C^{p+1}[x_n, x_{n+k}]$ e o método dado por (1.6) é de ordem p , então o erro de truncamento local é $O(h^{p+1})$, quando $h \rightarrow 0$.

A demonstração desse teorema pode ser encontrada em Butcher [2].



1.5 Estabilidade

Nesta seção, examinaremos algumas propriedades de estabilidade dos métodos lineares de passo múltiplo, importantes para a solução eficiente de equações diferenciais ordinárias do tipo *stiff*. Concentraremos nossa atenção nos métodos de passo um, uma vez que são os de maior interesse neste trabalho.

Usaremos como equação teste o problema escalar

$$y' = \lambda y, \quad (1.12)$$

onde $\lambda \in \mathbb{C}$, com $\text{Re}(\lambda) < 0$.

Aplicando a forma geral do método linear de passo k (1.6) para $k = 1$ em (1.12), vamos obter uma equação de diferenças de passo um da forma

$$y_{n+1} = R(\mu)y_n, \quad (1.13)$$

onde $\mu = h\lambda$ e $R(\mu)$ é a *função de estabilidade* do método.

A solução geral de (1.13) é da forma

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

e claramente $y_n \rightarrow 0$ com $n \rightarrow \infty$ se, e somente se

$$|R(\mu)| < 1, \quad (1.14)$$

motivando, assim, a seguinte definição

Definição 1.5.1 Um método linear de passo um é **absolutamente estável** para os valores de μ que satisfazem (1.14).

A região $\mathcal{R}_A$ do plano complexo na qual se verifica (1.14) é a *região de estabilidade absoluta* do método, definida por

$$\mathcal{R}_A = \{\mu \in \mathbb{C}: |R(\mu)| < 1\}.$$



Certos problemas de valor inicial envolvendo sistemas de equações diferenciais ordinárias exibem um fenômeno que é conhecido como *stiff*. Na tentativa de usar os métodos já discutidos para resolver esses problemas encontramos dificuldades substanciais. Vários aspectos qualitativos podem ser tomados na tentativa de resumir a noção desse fenômeno, mas selecionamos o mais satisfatório e colocaremos como uma definição de *stiff*.

Definição 1.5.2 *Se um método numérico com uma região de estabilidade absoluta finita aplicado a um problema com quaisquer condições iniciais é forçado a usar, num certo intervalo de integração, um tamanho de passo que é excessivamente pequeno em relação à suavidade da solução exata naquele intervalo, então o problema é chamado **stiff** neste intervalo.*

A principal dificuldade na solução numérica dos problemas *stiff* é obter métodos que satisfaçam os requisitos da estabilidade absoluta. Para alguns métodos esses requisitos impõem restrições tão severas ao tamanho do passo que os tornam inadequados. Em virtude disso, procuraremos obter métodos cuja região de estabilidade é a maior possível. A classe mais indicada para este tipo de problema é a dos métodos *A-estáveis*.

Definição 1.5.3 *Um método numérico é dito ser **A-estável** se $\mathcal{R}_A \supseteq \{\mu : \operatorname{Re}(\mu) < 0\}$.*

A *A-estabilidade* garante que, para qualquer $h > 0$ escolhido, a solução numérica de (1.12) não crescerá indefinidamente com o aumento de n .

Entretanto, quando $\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty$, a exigência de que a solução numérica não cresça em magnitude pode não ser suficiente e uma nova condição deve ser imposta.

Se considerarmos, por exemplo, a aplicação da Regra Trapezoidal,

$$y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2}[f_n + f_{n+1}],$$

à equação escalar teste (1.12), obtemos

$$y_{n+1} = \frac{1 + \frac{1}{2}h\lambda}{1 - \frac{1}{2}h\lambda} y_n.$$

Como a Regra Trapezoidal é A-estável (ver Lambert [12]), $y_n \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, para todo valor positivo de h . Contudo,

$$\left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = \left| \frac{1 + \frac{h\lambda}{2}}{1 - \frac{h\lambda}{2}} \right| = \left[\frac{1 + h\operatorname{Re}(\lambda) + \frac{1}{4}h^2|\lambda|^2}{1 - h\operatorname{Re}(\lambda) + \frac{1}{4}h^2|\lambda|^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1.15)$$

e, se $|\operatorname{Re}(\lambda)| \gg 0$ e h não é pequeno, então $|y_{n+1}/y_n|$ estará próximo de $+1$. De fato, quando $\operatorname{Re}(\lambda) \rightarrow -\infty$, o lado direito de (1.15) tende para $+1$. Assim, $|y_n|$ decairá para zero muito vagarosamente, enquanto que a solução exata $y(x_n)$ vai para zero rapidamente quando $n \rightarrow \infty$, o que indica que um método A-estável pode não ser adequado para um sistema *stiff*. Ao contrário, o método $y_{n+1} - y_n = hf_{n+1}$ (método de Euler Implícito) fornecerá

$$\left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = \left| \frac{1}{1 - h\lambda} \right| = \left[\frac{1}{1 - 2h\operatorname{Re}(\lambda) + h^2|\lambda|^2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.16)$$

Neste caso, o lado direito de (1.16) tende a zero com $\operatorname{Re}(\lambda) \rightarrow -\infty$, e podemos esperar um rápido decaimento de $|y_n|$ mesmo para valores de h moderadamente grandes. Temos então a seguinte definição:

Definição 1.5.4 Um método de passo um é dito ser **L-estável** se for A-estável e, além disso, quando aplicado à equação teste escalar (1.12), produzir

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

onde $|R(\mu)| \rightarrow 0$ com $\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty$.

Constitui-se, então, a seguinte hierarquia

$$L\text{-estabilidade} \implies A\text{-estabilidade}.$$



Quando trabalhamos o conceito da A -estabilidade com métodos lineares de passo múltiplo, certas barreiras podem ser encontradas, como mostra o teorema de Dahlquist, conhecido também como *segunda barreira de Dahlquist*.

Teorema 1.5.1 (*Dahlquist, 1963*)

- (i) *Um método linear de passo múltiplo explícito não pode ser A -estável.*
- (ii) *A ordem máxima de um método linear de passo múltiplo A -estável não pode exceder dois.*
- (iii) *O método linear de passo múltiplo A -estável de segunda ordem com a menor constante de erro é a Regra Trapezoidal.*

A restrição sobre a ordem do método imposta por (ii) é a mais severa de todas, pois indica que se a A -estabilidade é exigida, então, a Regra Trapezoidal é o método linear de passo múltiplo mais preciso. Assim, se olharmos para métodos com qualquer uma das propriedades de estabilidade definidas acima, a classe dos métodos de passo múltiplo não fornece, particularmente, bons representantes.

Nos próximos capítulos tentaremos contornar essa barreira, trabalhando com uma nova classe de métodos, que podem ser tanto A -estáveis como L -estáveis.

1.6 Aproximações Racionais para a Exponencial

Nesta seção, veremos um pouco sobre como tratar a função de estabilidade como uma aproximação racional para a exponencial e como essas aproximações serão relacionadas com as propriedades de estabilidade.



Particularmente, consideremos que um método linear de passo um implícito seja aplicado à equação teste (1.12). Nesse caso obtemos

$$y_{n+1} = R(\mu)y_n, \quad (1.17)$$

onde $\mu = h\lambda$ e $R(\cdot)$ é uma função racional.

A solução da equação teste é

$$y(x) = K \exp(\lambda x),$$

onde K é uma constante arbitrária. Daí,

$$y(x_{n+1}) = \exp(h\lambda)y(x_n) = \exp(\mu)y(x_n). \quad (1.18)$$

Se o método tiver ordem p , então, usando a hipótese local $y_n = y(x_n)$, segue, de (1.17) e (1.18) e da definição de erro de truncamento local, que

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = [\exp(\mu) - R(\mu)]y(x_n) = O(h^{p+1})$$

e concluímos que

$$R(\mu) = \exp(\mu) + O(h^{p+1}). \quad (1.19)$$

Logo, somos motivados a estudar a função de estabilidade como aproximação racional para a exponencial $\exp(q)$, $q \in \mathbb{C}$.

Seja, então, $q \in \mathbb{C}$, e seja $R_T^S(q)$, onde $S \geq 0$, $T \geq 0$, definido por

$$R_T^S(q) = \frac{(\sum_{i=0}^S a_i q^i)}{(\sum_{j=0}^T b_j q^j)}, \quad a_0 = b_0 = 1, \quad a_S \neq 0 \text{ e } b_T \neq 0, \quad (1.20)$$

onde $a_i, b_j \in \mathbb{R}$, $i = 0, 1, \dots, S$, $j = 0, 1, \dots, T$.

Dizemos que $R_T^S(q)$ é uma *aproximação racional* (S, T) de ordem p para a exponencial $\exp(q)$ se $R_T^S(q) = \exp(q) + O(q^{p+1})$. Segue de (1.20) que podemos encontrar a ordem de uma dada aproximação racional considerando que, se

$$1 + a_1 q + \dots + a_S q^S - (1 + b_1 q + \dots + b_T q^T) \left(1 + q + \frac{q^2}{2!} + \dots \right) = O(q^{p+1}) \quad (1.21)$$

então a aproximação é de ordem p .

Pelo número de parâmetros a_i e b_j em (1.21), podemos notar que a ordem máxima que uma aproximação $R_T^S(q)$ pode alcançar é $p = S + T$. Tal aproximação de ordem máxima é conhecida como *aproximação de Padé* e a denotaremos por $\hat{R}_T^S(q)$.

Pode-se mostrar que os coeficientes de $\hat{R}_T^S$ são dados por

$$a_i = \frac{S!}{(S+T)!} \frac{(S+T-i)!}{i!(S-i)!}, \quad i = 1, 2, \dots, S,$$

$$b_j = (-1)^j \frac{T!}{(S+T)!} \frac{(S+T-j)!}{j!(T-j)!}, \quad j = 1, 2, \dots, T.$$

Usando esse resultado, construímos a Tabela 1.1, denominada *tabela de Padé* de $\hat{R}_T^S(q)$ para $S, T = 0, 1, 2, 3$. Uma tabela maior e maiores detalhes sobre a obtenção dos coeficientes acima podem ser encontrados em Butcher [2].

Tabela 1.1: Tabela de Padé.

1	$1+q$	$1+q+\frac{1}{2}q^2$	$1+q+\frac{1}{2}q^2+\frac{1}{6}q^3$
$\frac{1}{1-q}$	$\frac{1+\frac{1}{2}q}{1-\frac{1}{2}q}$	$\frac{1+\frac{2}{3}q+\frac{1}{6}q^2}{1-\frac{1}{3}q}$	$\frac{1+\frac{3}{4}q+\frac{1}{4}q^2+\frac{1}{24}q^3}{1-\frac{1}{4}q}$
$\frac{1}{1-q+\frac{1}{2}q^2}$	$\frac{1+\frac{1}{3}q}{1-\frac{2}{3}q+\frac{1}{6}q^2}$	$\frac{1+\frac{1}{2}q+\frac{1}{12}q^2}{1-\frac{1}{2}q+\frac{1}{12}q^2}$	$\frac{1+\frac{3}{5}q+\frac{3}{20}q^2+\frac{1}{60}q^3}{1-\frac{2}{5}q+\frac{1}{20}q^2}$
$\frac{1}{1-q+\frac{1}{2}q^2-\frac{1}{6}q^3}$	$\frac{1+\frac{1}{4}q}{1-\frac{3}{4}q+\frac{1}{4}q^2-\frac{1}{24}q^3}$	$\frac{1+\frac{2}{5}q+\frac{1}{20}q^2}{1-\frac{3}{5}q+\frac{3}{20}q^2-\frac{1}{60}q^3}$	$\frac{1+\frac{1}{2}q+\frac{1}{10}q^2+\frac{1}{120}q^3}{1-\frac{1}{2}q+\frac{1}{10}q^2-\frac{1}{120}q^3}$

Como vimos, as propriedades de estabilidade de um método de passo um que gera a equação de diferenças (1.17) são determinadas pela função $R(\mu)$. Seguindo a nomenclatura de aceitabilidade usada por Lambert [12], consideremos a seguinte definição.

Definição 1.6.1 Uma aproximação racional $R(q)$ para $\exp(q)$ é dita ser

- (a) **A-aceitável** se $|R(q)| < 1$ com $\operatorname{Re}(q) < 0$,
- (b) **L-aceitável** se for A-aceitável e $|R(q)| \rightarrow 0$ quando $\operatorname{Re}(q) \rightarrow -\infty$.



Claramente o método será A- ou L-estável se $R(\mu)$ for A- ou L-aceitável. Fazendo uso da definição acima e observando (1.20) podemos notar que a aproximação racional $R_T^S(q)$ não pode ser A-aceitável se $S > T$, e que se $R_T^S(q)$ é A-aceitável e $T > S$, então $R_T^S(q)$ é também L-aceitável.

Alguns resultados sobre aceitabilidade referentes a aproximações de Padé $\hat{R}_T^S(q)$, são relacionados abaixo.

Teorema 1.6.1 (*Birkhoff e Varga, 1965*)

Se $T = S$, então a aproximação de Padé $\hat{R}_T^S(q)$ é A-aceitável.

Teorema 1.6.2 (*Ehle, 1969*)

Se $T = S + 1$ ou $T = S + 2$, então a aproximação de Padé $\hat{R}_T^S(q)$ é L-aceitável.

Desses teoremas podemos tirar algumas conclusões importantes referentes às aproximações racionais na Tabela 1.1. As aproximações sobre a diagonal principal e sobre as duas subdiagonais imediatamente abaixo da diagonal principal são A-aceitáveis, e qualquer aproximação A-aceitável abaixo da diagonal principal é automaticamente L-aceitável. Também está claro que não existem aproximações que sejam A-aceitáveis acima da diagonal principal.

Capítulo 2

Métodos Estendidos de Passo Um de Terceira Ordem

2.1 Introdução

Neste capítulo, introduziremos uma classe de métodos propostos por Usmani e Agarwal [15], que consideram o acoplamento de dois métodos lineares de passo múltiplo, obtendo um novo método de passo um de terceira ordem que utiliza não apenas a aproximação para a solução obtida no último ponto de integração, mas também necessita de informações no próprio ponto de integração e no ponto imediatamente posterior. Tais métodos serão denominados Métodos Estendidos de passo um.

Para esta classe de métodos, desenvolveremos uma análise da ordem de convergência e das propriedades de estabilidade que nos levará a um método convergente de terceira ordem com as melhores propriedades de estabilidade, o qual foi obtido por Jacques [9].

2.2 A Regra Trapezoidal Estendida

A Regra Trapezoidal para a integração do p.v.i.

$$y' = f(x, y); \quad y(a) = \eta, \quad a \leq x \leq b, \quad (2.1)$$

é definida por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \quad (2.2)$$

que é convergente de segunda ordem.

Para tentarem superar a barreira da ordem imposta pela A-estabilidade sobre métodos lineares de passo múltiplo, Usmani e Agarwal [15] definiram, através do acoplamento de dois métodos lineares de passo múltiplo, uma nova classe de métodos de passo um para a solução numérica de (2.1) da forma

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f(x_n, y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})], \quad (2.3)$$

onde

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20}y_n + \beta_{21}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f(x_n, y_n) + \gamma_{21}f(x_{n+1}, y_{n+1})], \quad (2.4)$$

para $n = 0, 1, 2, \dots$

Para contruirmos um método de terceira ordem escolhemos os coeficientes da fórmula principal (2.3), considerando-a como um método linear de passo múltiplo com erro de truncamento local da ordem de h^4 . Se o denotarmos por $t_{n+1}(h)$ e a solução exata do p.v.i. (2.1) no ponto x_n por Y_n , então, temos a seguinte discretização para a equação (2.1)

$$Y_{n+1} = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, Y_{n+2})] + t_{n+1}(h). \quad (2.5)$$

Assim, através do desenvolvimento em série de Taylor das funções Y_{n+1} e Y'_{n+i} , $i = 1, 2$, numa vizinhança do ponto x_n , obtemos os seguintes

termos

$$\begin{aligned}
 O(1) &: 0 \\
 O(h) &: (1 - \alpha_0 - \alpha_1 - \alpha_2)Y'_n \\
 O(h^2) &: \left(\frac{1}{2} - \alpha_1 - 2\alpha_2\right)Y''_n \\
 O(h^3) &: \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2}\alpha_1 - 2\alpha_2\right)Y^{(3)}_n \\
 O(h^4) &: \left(\frac{1}{24} - \frac{1}{6}\alpha_1 - \frac{4}{3}\alpha_2\right)Y^{(4)}_n \\
 O(h^5) &: \left(\frac{1}{120} - \frac{1}{24}\alpha_1 - \frac{2}{3}\alpha_2\right)Y^{(5)}_n.
 \end{aligned}$$

O correspondente sistema de equações lineares obtido, considerando nulos os termos das potências de h até h^3 , tem solução única, dada por

$$\alpha_0 = \frac{5}{12}, \quad \alpha_1 = \frac{2}{3}, \quad \alpha_2 = -\frac{1}{12}.$$

Substituindo esses valores nos termos das potências de h^4 e h^5 , obtemos a expressão do erro de truncamento, $t_{n+1}(h)$, da fórmula linear de passo múltiplo (2.3), dada por

$$t_{n+1}(h) = \frac{h^4}{24}Y^{(4)}_n + \frac{13h^5}{360}Y^{(5)}_n + O(h^6). \quad (2.6)$$

Agora, considerando a fórmula intermediária (2.4) como um método linear de passo múltiplo com erro de truncamento local $\tau_{n+1}(h)$ da ordem de h^4 , obtemos

$$Y_{n+2} = \beta_{20}Y_n + \beta_{21}Y_{n+1} + h[\gamma_{20}f(x_n, Y_n) + \gamma_{21}f(x_{n+1}, Y_{n+1})] + \tau_{n+1}(h). \quad (2.7)$$

Através do desenvolvimento em série de Taylor das funções Y_{n+i} , $i = 1, 2$, e Y'_{n+1} , numa vizinhança do ponto x_n , obtemos os seguintes termos

$$\begin{aligned}
 O(1) &: (1 - \beta_{20} - \beta_{21})Y_n \\
 O(h) &: (2 - \beta_{21} - \gamma_{20} - \gamma_{21})Y'_n
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
O(h^2) &: \left(2 - \frac{1}{2}\beta_{21} - \gamma_{21}\right) Y_n'' \\
O(h^3) &: \left(\frac{4}{3} - \frac{1}{6}\beta_{21} - \frac{1}{2}\gamma_{21}\right) Y_n^{(3)} \\
O(h^4) &: \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{24}\beta_{21} - \frac{1}{6}\gamma_{21}\right) Y_n^{(4)} \\
O(h^5) &: \left(\frac{4}{15} - \frac{1}{120}\beta_{21} - \frac{1}{24}\gamma_{21}\right) Y_n^{(5)}.
\end{aligned}$$

O correspondente sistema linear, igualando a zero os termos das potências de h^0 até h^3 , tem como solução única

$$\beta_{20} = 5, \quad \beta_{21} = -4, \quad \gamma_{20} = 2, \quad \gamma_{21} = 4.$$

Substituindo esses valores nos termos das potências de h^4 e h^5 , obtemos a expressão do erro de truncamento, $\tau_{n+1}(h)$, da fórmula linear de passo múltiplo (2.4), dada por

$$\tau_{n+1}(h) = \frac{h^4}{6} Y_n^{(4)} + \frac{2h^5}{15} Y_n^{(5)} + O(h^6). \quad (2.8)$$

A seguir, tomemos

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20}y_n + \beta_{21}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f_n + \gamma_{21}f_{n+1}] \quad (2.9)$$

e a discretização (2.5) como sendo de passo um, definida por

$$Y_{n+1} = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})] + T_{n+1}(h). \quad (2.10)$$

Para obtermos a expressão do erro de truncamento local, $T_{n+1}(h)$, da fórmula estendida, olhamos para a diferença entre (2.5) e (2.10), e então

$$T_{n+1}(h) = t_{n+1}(h) + h\{\alpha_2[f(x_{n+2}, Y_{n+2}) - f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})]\}.$$

Mas, de (2.7) e (2.9), temos

$$Y_{n+2} = \hat{y}_{n+2} + \tau_{n+1}(h)$$

e, pelo desenvolvimento em série de potência de $f(x_{n+2}, Y_{n+2})$, na vizinhança do ponto $(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$, obtemos

$$f(x_{n+2}, Y_{n+2}) = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \tau_{n+1}(h)g_{n+2} + O(h^8),$$

onde $g \equiv \frac{\partial f}{\partial y}$.

Assim, podemos escrever $T_{n+1}(h)$ em função de $t_{n+1}(h)$ e $\tau_{n+1}(h)$ como

$$T_{n+1}(h) = t_{n+1}(h) + h[\alpha_2 \tau_{n+1}(h)g_{n+2}] + O(h^9)$$

e, usando a expansão em série de potência da função g nas vizinhanças do ponto x_n ,

$$g(x_{n+2}) = g(x_n) + 2hg'(x_n) + O(h^2),$$

obtemos

$$T_{n+1}(h) = t_{n+1}(h) + h[\alpha_2 \tau_{n+1}(h)g_n + 2\alpha_2 h \tau_{n+1}(h)g'_n] + O(h^6).$$

Usando (2.6) e (2.8), e sabendo que $\alpha_2 = -1/12$, conseguimos a seguinte expressão para o erro de truncamento

$$T_{n+1}(h) = \frac{h^4}{24}Y_n^{(4)} + \frac{h^5}{360}(-5g_n Y_n^{(4)} + 13Y_n^{(5)}) + O(h^6).$$

Assim, desprezando o erro de truncamento local, temos um método de passo um de terceira ordem dado por (2.9) e (2.10) que é descrito por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5f_n + 8f_{n+1} - \hat{f}_{n+2}], \quad (2.11)$$

com $\hat{f}_{n+2} = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$ e

$$\hat{y}_{n+2} = 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f_n + 4f_{n+1}], \quad (2.12)$$

que foi denominado, por Usmani e Agarwal [15], de Regra Trapezoidal Estendida.

2.2.1 Análise da Estabilidade para a Regra Trapezoidal Estendida

A fim de investigarmos a estabilidade para o presente método, consideremos a equação linear teste (1.12). Aplicando o método proposto, definido por (2.11)-(2.12), a esta equação, temos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{12}[5y_n + 8y_{n+1} - \hat{y}_{n+2}] \quad (2.13)$$

e

$$\hat{y}_{n+2} = 5y_n - 4y_{n+1} + h\lambda[2y_n + 4y_{n+1}]. \quad (2.14)$$

Substituindo (2.14) em (2.13), temos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{12}\{5y_n + 8y_{n+1} - [5y_n - 4y_{n+1} + h\lambda(2y_n + 4y_{n+1})]\}.$$

Resolvendo esta equação para y_{n+1} , obtemos:

$$y_{n+1} = R(\mu)y_n, \quad (2.15)$$

onde $\mu = h\lambda$ e a função de estabilidade, $R(\mu)$, é dada por

$$R(\mu) = \frac{1 - \frac{1}{6}\mu^2}{1 - \mu + \frac{1}{3}\mu^2}. \quad (2.16)$$

Mostraremos que a Regra Trapezoidal Estendida é A-estável verificando que a função racional $R(\mu)$ satisfaz $|R(\mu)| < 1$, para $\text{Re}(\mu) < 0$.

Considerando $\mu = \rho e^{i\theta}$, temos

$$\begin{aligned} |R(\mu)|^2 &= R(\mu)R(\bar{\mu}) \\ &= \frac{(1 - \frac{1}{6}\rho^2 e^{2i\theta})(1 - \frac{1}{6}\rho^2 e^{-2i\theta})}{(1 - \rho e^{i\theta} + \frac{1}{3}\rho^2 e^{2i\theta})(1 - \rho e^{-i\theta} + \frac{1}{3}\rho^2 e^{-2i\theta})} \\ &= \frac{1 - \frac{1}{3}\rho^2 \cos 2\theta + \frac{1}{36}\rho^4}{1 - 2\rho \cos \theta + \rho^2(1 + \frac{2}{3}\cos 2\theta) - \frac{2}{3}\rho^3 \cos \theta + \frac{1}{9}\rho^4} \\ &= \frac{N}{D}. \end{aligned}$$

Obviamente $N, D > 0$, pois são resultantes do produto de uma função racional pelo seu conjugado.

Fazendo a diferença entre o denominador e o numerador da função de estabilidade $R(\mu)$ temos

$$\begin{aligned} D - N &= -2\rho \cos \theta + \rho^2(1 + \cos 2\theta) - \frac{2}{3}\rho^3 \cos \theta + \frac{1}{12}\rho^4 \\ &= -2\operatorname{Re}(\mu) + 2[\operatorname{Re}(\mu)]^2 - \frac{2}{3}\rho^2 \operatorname{Re}(\mu) + \frac{1}{12}\rho^4, \end{aligned}$$

de onde podemos concluir que $D - N > 0$ quando consideramos $\operatorname{Re}(\mu) < 0$.

Assim, temos que

$$\frac{D - N}{D} > 0,$$

o que implica na seguinte desigualdade

$$\frac{N}{D} < 1.$$

Portanto,

$$|R(\mu)| = \sqrt{\frac{N}{D}} < 1,$$

com $\operatorname{Re}(\mu) = \rho \cos \theta < 0$.

Logo, o método é A-estável. Para ser L-estável deve satisfazer à propriedade adicional da L-estabilidade

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = 0.$$

Mas, como

$$\frac{(D - N)}{D} \rightarrow \frac{3}{4},$$

temos que

$$\frac{N}{D} = \left(1 - \frac{D - N}{D}\right) \rightarrow \frac{1}{4},$$

quando $\rho \rightarrow \infty$ e $\rho \cos \theta < 0$. Obtemos, então,

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = \frac{1}{2}.$$

Concluimos, assim, que o método possui a propriedade de ser A-estável mas não é L-estável.

Podemos resumir esses resultados no seguinte teorema.

Teorema 2.2.1 *O método definido por (2.11)-(2.12) para a integração numérica do p.v.i. (2.1) é A-estável, mas não L-estável.*

As seções seguintes serão dedicadas ao estudo de um método com melhores propriedades de estabilidade.

2.3 Uma Família de Métodos Estendidos de Terceira Ordem

A regra trapezoidal estendida e o método trapezoidal não são L-estáveis, tornando-os inadequados para certas equações diferenciais do tipo *stiff*, conforme visto anteriormente. Assim, Jacques [9] propôs investigar a precisão e estabilidade dos métodos na forma geral (2.3)-(2.4), mostrando como os coeficientes α_i , β_i podem ser escolhidos para construir um outro método que não é apenas convergente de terceira ordem e A-estável, mas também L-estável.

Inicialmente, analisaremos a ordem de convergência do método na forma geral (2.3)-(2.4).

Consideremos como um método linear de passo múltiplo a equação (2.3), com erro de truncamento local de ordem $k + 1$, denotado por $t_{n+1}(h)$ e que a solução exata do p.v.i. (2.1) no ponto x_n seja denotada por Y_n . Então,

$$Y_{n+1} = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, Y_{n+2})] + t_{n+1}(h), \quad (2.17)$$

onde $|t_{n+1}(h)| \leq M_1 h^{k+1}$, para alguma constante positiva M_1 .



Analogamente, se a equação (2.4) tem erro de truncamento local, $\tau_{n+1}(h)$, de ordem k , então,

$$Y_{n+2} = \beta_{20}Y_n + \beta_{21}Y_{n+1} + h[\gamma_{20}f(x_n, Y_n) + \gamma_{21}f(x_{n+1}, Y_{n+1})] + \tau_{n+1}(h), \quad (2.18)$$

onde $|\tau_{n+1}(h)| \leq M_2 h^k$, para alguma constante positiva M_2 .

Supondo que f é uma função contínua satisfazendo à condição de Lipschitz com constante de Lipschitz L , podemos, então, subtrair (2.17) e (2.18) de (2.3) e (2.4), respectivamente, para obtermos:

$$e_{n+1} \leq e_n + hL(|\alpha_0|e_n + |\alpha_1|e_{n+1} + |\alpha_2|\hat{e}_{n+2}) + M_1 h^{K+1}, \quad (2.19)$$

com

$$\hat{e}_{n+2} \leq |\beta_{20}|e_n + |\beta_{21}|e_{n+1} + hL(|\gamma_{20}|e_n + |\gamma_{21}|e_{n+1}) + M_2 h^k, \quad (2.20)$$

onde

$$e_i = |Y_i - y_i| \quad \text{e} \quad \hat{e}_i = |Y_i - \hat{y}_i|.$$

Substituindo (2.20) em (2.19), o termo $\hat{e}_{n+2}$ é eliminado e obtemos que

$$e_{n+1} \leq \left(\frac{1+B}{1-C} \right) e_n + \frac{T}{1-C}, \quad (2.21)$$

onde

$$B = hL(|\alpha_0| + |\alpha_2||\beta_{20}|) + h^2 L^2 |\gamma_{20}| |\alpha_2|,$$

$$C = hL(|\alpha_1| + |\alpha_2||\beta_{21}|) + h^2 L^2 |\gamma_{21}| |\alpha_2|,$$

$$T = (LM_2|\alpha_2| + M_1)h^{k+1},$$

onde supomos h suficientemente pequeno para assegurar que $C < 1$.

Sabemos que $e_0 = 0$, pois y_0 é a condição inicial dada. A desigualdade (2.21) pode, portanto, ser resolvida recursivamente para obtermos um limitante superior para e_n , para qualquer n , como segue.

$$e_{n+1} \leq \left(\frac{1+B}{1-C} \right) e_n + \frac{T}{1-C}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \left(\frac{1+B}{1-C}\right)^2 e_{n-1} + \frac{T}{1-C} \left[1 + \frac{1+B}{1-C}\right] \\
&\leq \left(\frac{1+B}{1-C}\right)^3 e_{n-2} + \frac{T}{1-C} \left[1 + \frac{1+B}{1-C} + \left(\frac{1+B}{1-C}\right)^2\right] \\
&\vdots \\
&\leq \left(\frac{1+B}{1-C}\right)^{n+1} e_0 + \frac{T}{1-C} \left[1 + \frac{1+B}{1-C} + \dots + \left(\frac{1+B}{1-C}\right)^n\right].
\end{aligned}$$

A expressão entre colchetes forma uma progressão geométrica com termo inicial 1 e razão $(1+B)/(1-C)$. Portanto,

$$\begin{aligned}
e_{n+1} &\leq \frac{T}{B+C} \left[\left(\frac{1+B}{1-C}\right)^{n+1} - 1 \right] \\
&\leq \frac{T}{B+C} \left[\left(1 + \frac{B+C}{1-C}\right)^{n+1} - 1 \right].
\end{aligned}$$

Utilizando-se a convexidade da função exponencial, pode-se provar a desigualdade $(1+t) \leq \exp(t)$, válida para todo $t \in \mathbb{R}$, o que nos fornece

$$1 + \frac{B+C}{1-C} \leq \exp\left(\frac{B+C}{1-C}\right).$$

Logo,

$$\left(1 + \frac{B+C}{1-C}\right)^n \leq \exp\left[n \frac{B+C}{1-C}\right].$$

Assim, conseguimos a seguinte estimativa para o erro global

$$e_n \leq \frac{T}{B+C} \left[\exp\left(n \frac{B+C}{1-C}\right) - 1 \right].$$

Observe que o termo entre colchetes é limitado para $h \rightarrow 0$, com n fixado. Finalmente, notemos que, como T contém um fator de h^{k+1} , podemos concluir que $e_n = O(h^k)$, ou seja, que o erro global tem ordem h^k . Com isso, mostramos que todo método é convergente de ordem k quando supomos que os erros de truncamento local de (2.3)-(2.4) têm ordem $k+1$ e k , respectivamente.

Tais considerações encontram-se resumidas no seguinte teorema.

Teorema 2.3.1 *O método definido por (2.3)-(2.4) para a integração numérica do p.v.i. (2.1) é convergente de terceira ordem.*

Para construirmos um método de terceira ordem devemos, como anteriormente, escolher os coeficientes em (2.3) de modo que o seu erro de truncamento local seja da ordem de h^4 , mas, diferente de Usmani e Agarwal, precisamos apenas escolher os coeficientes em (2.4) de modo que seu erro de truncamento local tenha ordem h^3 .

Através de um procedimento análogo ao considerado para a Regra Trapezoidal Estendida, consideramos a fórmula principal (2.3) como um método linear de passo múltiplo com erro de truncamento $t_{n+1}(h)$ da ordem de h^4 e, a partir do desenvolvimento em série de potências nas vizinhanças do ponto x_n , obtemos como anteriormente,

$$\alpha_0 = \frac{5}{12}, \quad \alpha_1 = \frac{2}{3}, \quad \alpha_2 = -\frac{1}{12}$$

e

$$t_{n+1}(h) = \frac{h^4}{24} Y_n^{(4)} + \frac{13}{360} h^5 Y_n^{(5)} + O(h^6). \quad (2.22)$$

Consideremos, agora, a fórmula intermediária (2.4) como um método linear de passo múltiplo com erro de truncamento $\tau_{n+1}(h)$ da ordem de h^3 , o que nos fornecerá os seguintes termos

$$\begin{aligned} O(1) &: (1 - \beta_{20} - \beta_{21}) Y_n \\ O(h) &: (2 - \beta_{21} - \gamma_{20} - \gamma_{21}) Y_n' \\ O(h^2) &: \left(2 - \frac{1}{2} \beta_{21} - \gamma_{21}\right) Y_n'' \\ O(h^3) &: \left(\frac{4}{3} - \frac{1}{6} \beta_{21} - \frac{1}{2} \gamma_{21}\right) Y_n^{(3)} \\ O(h^4) &: \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{24} \beta_{21} - \frac{1}{6} \gamma_{21}\right) Y_n^{(4)}. \end{aligned}$$

O correspondente sistema linear, igualando a zero as expressões que multiplicam as potências de h^0 até h^2 , representa um sistema de três



equações a quatro incógnitas que tem uma família de soluções dependentes de um parâmetro, que pode ser escrita como

$$\beta_{21} = 1 - \beta_{20}, \quad \gamma_{20} = \frac{1}{2}\beta_{20} - \frac{1}{2}, \quad \gamma_{21} = \frac{1}{2}\beta_{20} + \frac{3}{2}.$$

Substituindo esses valores nos termos das potências de h^3 e h^4 , obtemos a expressão do erro de truncamento, $\tau_{n+1}(h)$, da fórmula linear de passo múltiplo (2.4):

$$\tau_{n+1}(h) = \frac{(5 - \beta_{20})}{12}h^3Y_n^{(3)} + \frac{(9 - \beta_{20})}{24}h^4Y_n^{(4)} + O(h^5). \quad (2.23)$$

A fim de deduzirmos a expressão do erro de truncamento para (2.10), como na seção anterior, olhamos para a diferença entre (2.10) e (2.5). Logo,

$$T_{n+1}(h) = t_{n+1}(h) + h[\alpha_2\tau_{n+1}(h)g_n + 2\alpha_2h\tau_{n+1}(h)g'_n] + O(h^7).$$

Usando (2.22), (2.23) e $\alpha_2 = 1/12$, conseguimos a seguinte expressão para o erro de truncamento local

$$\begin{aligned} T_{n+1} = & \frac{h^4}{144}[(\beta_{20} - 5)g_nY_n^{(3)} + 6Y_n^{(4)}] + \frac{h^5}{1440}[20(\beta_{20} - 5)g'_nY_n^{(3)} \\ & + 5(\beta_{20} - 9)g_nY_n^{(4)} + 52Y_n^{(5)}] + O(h^6), \end{aligned}$$

onde $g \equiv \frac{\partial f}{\partial y}$.

Desprezando os erros de truncamento local, obtivemos uma família de métodos convergentes de terceira ordem que dependem de um parâmetro, dada por (2.9)-(2.10), descrita por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5f_n + 8f_{n+1} - \hat{f}_{n+2}], \quad (2.24)$$

com $\hat{f}_{n+2} = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$ e

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20}y_n + (1 - \beta_{20})y_{n+1} + \frac{h}{2}[(\beta_{20} - 1)f_n + (\beta_{20} + 3)f_{n+1}]. \quad (2.25)$$

É interessante notar que o método de Usmani e Agarwal [15], a Regra Trapezoidal Estendida, é um caso particular do método acima, com $\beta_{20} = 5$. Esta escolha do parâmetro produz um método no qual o erro de truncamento local da fórmula secundária (2.25) tem ordem h^4 . Contudo, mostramos que isto não é necessário e, na seção seguinte, verificaremos que uma escolha alternativa do valor deste parâmetro fornecerá um método com melhores propriedades de estabilidade.

2.3.1 Análise da Estabilidade

Mostraremos, agora, a existência de um método desta família de métodos estendidos que é L-estável. Para isso, aplicamos a forma geral da família de métodos, dada por (2.24)-(2.25), à equação linear teste definida em (1.12), e obtemos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{12}[5y_n + 8y_{n+1} - \hat{y}_{n+2}] \quad (2.26)$$

e

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20}y_n + (1 - \beta_{20})y_{n+1} + \frac{h\lambda}{2}[(\beta_{20} - 1)y_n + (\beta_{20} + 3)y_{n+1}]. \quad (2.27)$$

Substituindo (2.27) em (2.26), encontramos

$$y_{n+1} = R(\mu)y_n, \quad (2.28)$$

com $\mu = h\lambda$ e a função de estabilidade, $R(\mu)$, é dada por

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{(5-\beta_{20})}{12}\mu + \frac{(1-\beta_{20})}{24}\mu^2}{1 + \frac{(-7-\beta_{20})}{12}\mu + \frac{(\beta_{20}+3)}{24}\mu^2}. \quad (2.29)$$

Uma condição necessária para assegurar a L-estabilidade para a presente família de métodos é que o coeficiente de μ^2 no numerador de $R(\mu)$ seja zero, ou seja,

$$\frac{(1 - \beta_{20})}{24} = 0.$$

Daí,

$$\beta_{20} = 1.$$

Nesse caso, substituindo este valor de β_{20} em (2.29), obtemos a seguinte função de estabilidade

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{1}{3}\mu}{1 - \frac{2}{3}\mu + \frac{1}{6}\mu^2}. \quad (2.30)$$

Fazendo $\rho \rightarrow \infty$, com $\rho \cos \theta < 0$, temos que $R(\mu) \rightarrow 0$, o que fornece

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = 0.$$

Verifiquemos que o correspondente método é A-estável.

Escrevendo $\mu = \rho e^{i\theta}$, temos

$$\begin{aligned} |R(\mu)|^2 &= R(\mu)R(\bar{\mu}) \\ &= \frac{(1 + \frac{1}{3}\rho e^{i\theta})(1 + \frac{1}{3}\rho e^{-i\theta})}{(1 - \frac{2}{3}\rho e^{i\theta} + \frac{1}{6}\rho^2 e^{2i\theta})(1 - \frac{2}{3}\rho e^{-i\theta} + \frac{1}{6}\rho^2 e^{-2i\theta})} \\ &= \frac{1 + \frac{2}{3}\rho \cos \theta + \frac{1}{9}\rho^2}{1 - \frac{4}{3}\rho \cos \theta + \rho^2(\frac{4}{9} + \frac{1}{3}\cos 2\theta) - \frac{2}{9}\rho^3 \cos \theta + \frac{1}{36}\rho^4} \\ &= \frac{N}{D}, \end{aligned}$$

onde, novamente, $N, D > 0$.

Fazendo a diferença entre o numerador e o denominador de $R(\mu)$, obtemos

$$D - N = -2\rho \cos \theta + \frac{1}{3}\rho^2(1 + \cos 2\theta) - \frac{2}{9}\rho^3 \cos \theta + \frac{1}{36},$$

onde $D - N > 0$, sendo $\operatorname{Re}(\mu) = \rho \cos \theta < 0$.

Logo,

$$\frac{D - N}{D} > 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{N}{D} < 1.$$

Assim,

$$|R(\mu)| = \sqrt{\frac{N}{D}} < 1,$$

confirmando a A-estabilidade.

Outro modo para analisar a propriedade da L -estabilidade seria verificar que a função de estabilidade (2.30) é uma aproximação de Padé $R_3^2(\mu)$, L -aceitável.

Portanto, mostramos que o método de terceira ordem com as melhores propriedades de estabilidade é dado por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5f_n + 8f_{n+1} - \hat{f}_{n+2}] \quad (2.31)$$

com

$$\hat{y}_{n+2} = y_n + 2hf_{n+1}. \quad (2.32)$$

Este resultado é, até certo ponto, surpreendente, uma vez que a fórmula do método linear de passo múltiplo (2.32) é a Regra do Ponto Médio, que tem notoriamente propriedades de estabilidade inferiores (ver Lambert [12]). Contudo, mostramos que, quando acoplada a (2.31) produz um método que é L -estável.

Tais considerações são colocadas no seguinte resultado.

Teorema 2.3.2 *O método definido por (2.31)-(2.32) para a integração numérica do p.v.i. (2.1) é L -estável.*



Capítulo 3

Métodos Estendidos de Passo Um de Quarta Ordem

3.1 Introdução

Neste capítulo, apresentaremos métodos estendidos propostos por Chawla *et al.* [4]. Assim como os métodos apresentados no capítulo 2, também são de passo um, mas de quarta ordem, e necessitam de informações nos dois pontos imediatamente posteriores ao ponto de integração. Em artigo publicado anteriormente a Chawla *et al.* [4], Kondrat e Jacques [10] apresentaram um método estendido de passo dois de quarta ordem A -estável, alegando não ser possível a obtenção de um método de passo um deste tipo. Na próxima seção, mostraremos que a obtenção destes métodos é possível, analisando a expressão do erro de truncamento local e as propriedades de estabilidade e, através desta análise, vamos obter subfamílias de métodos que são A -estáveis, e uma subfamília desses métodos L -estáveis.



3.2 Uma Família de Métodos Estendidos de Quarta Ordem

Chawla *et al.* [4] definiram, através do acoplamento de três métodos lineares de passo múltiplo, uma forma geral de métodos de passo um para a solução numérica de (2.1) dada por

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f(x_n, y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \alpha_3 f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3})], \quad (3.1)$$

onde

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20}y_n + \beta_{21}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f(x_n, y_n) + \gamma_{21}f(x_{n+1}, y_{n+1})] \quad (3.2)$$

e

$$\hat{y}_{n+3} = \beta_{30}y_n + \beta_{31}y_{n+1} + h[\gamma_{30}f(x_n, y_n) + \gamma_{31}f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \gamma_{32}f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})], \quad (3.3)$$

para $n = 0, 1, 2, \dots$

Para construirmos a família de métodos de quarta ordem vamos escolher os coeficientes da fórmula principal (3.1) de modo que o erro de truncamento local $t_{n+1}(h)$ tenha ordem h^5 . Assim, consideremos a seguinte discretização para a equação diferencial (2.1)

$$Y_{n+1} = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, Y_{n+2}) + \alpha_3 f(x_{n+3}, Y_{n+3})] + t_{n+1}(h). \quad (3.4)$$

Através do desenvolvimento em série de Taylor das funções Y_{n+1} e Y'_{n+i} , $i = 1, 2, 3$, numa vizinhança do ponto x_n , obtemos os seguintes termos

$$O(1) : 0$$

$$O(h) : (1 - \alpha_0 - \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3)Y'_n$$

$$\begin{aligned}
O(h^2) &: \left(\frac{1}{2} - \alpha_1 - 2\alpha_2 - 3\alpha_3 \right) Y_n'' \\
O(h^3) &: \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2}\alpha_1 - 2\alpha_2 - \frac{9}{2}\alpha_3 \right) Y_n^{(3)} \\
O(h^4) &: \left(\frac{1}{24} - \frac{1}{6}\alpha_1 - \frac{4}{3}\alpha_2 - \frac{9}{2}\alpha_3 \right) Y_n^{(4)} \\
O(h^5) &: \left(\frac{1}{120} - \frac{1}{24}\alpha_1 - \frac{2}{3}\alpha_2 - \frac{27}{8}\alpha_3 \right) Y_n^{(5)}.
\end{aligned}$$

O correspondente sistema de equações lineares obtido, considerando nulos os termos das potências de h até h^4 , tem solução única dada por

$$\alpha_0 = \frac{3}{8}, \quad \alpha_1 = \frac{19}{24}, \quad \alpha_2 = -\frac{5}{24}, \quad \alpha_3 = \frac{1}{24}.$$

Substituindo esses valores no termo da potência h^5 , obtemos a expressão do erro de truncamento, $t_{n+1}(h)$, da fórmula linear de passo múltiplo (3.1), dada por

$$t_{n+1}(h) = \frac{-19h^5}{720} Y_n^{(5)} + O(h^6). \quad (3.5)$$

Para tornar a discretização em (3.4) de passo um, consideremos as fórmulas intermediárias (3.2) e (3.3) com erros de truncamento local $\tau_{n+1,2}(h)$ e $\tau_{n+1,3}(h)$, respectivamente, da ordem de h^3 . Então,

$$Y_{n+2} = \beta_{20}Y_n + \beta_{21}Y_{n+1} + h[\gamma_{20}f(x_n, Y_n) + \gamma_{21}f(x_{n+1}, Y_{n+1})] + \tau_{n+1,2}(h) \quad (3.6)$$

e

$$\begin{aligned}
Y_{n+3} = & \beta_{30}Y_n + \beta_{31}Y_{n+1} + h[\gamma_{30}f(x_n, Y_n) + \gamma_{31}f(x_{n+1}, Y_{n+1}) \\
& + \gamma_{32}f(x_{n+2}, Y_{n+2})] + \tau_{n+1,3}(h).
\end{aligned} \quad (3.7)$$

Usando o desenvolvimento em série de Taylor, nas vizinhanças do ponto x_n , das funções Y_{n+i} e Y'_{n+j} , $i = 1, 2, 3$ e $j = 1, 2$, obtemos, para a fórmula (3.6), os seguintes termos

$$O(1) : (1 - \beta_{20} - \beta_{21})Y_n$$

$$\begin{aligned}
O(h) &: (2 - \beta_{21} - \gamma_{20} - \gamma_{21})Y'_n \\
O(h^2) &: \left(2 - \frac{1}{2}\beta_{21} - \gamma_{21}\right)Y''_n \\
O(h^3) &: \left(\frac{4}{3} - \frac{1}{6}\beta_{21} - \frac{1}{2}\gamma_{21}\right)Y_n^{(3)} \\
O(h^4) &: \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{24}\beta_{21} - \frac{1}{6}\gamma_{21}\right)Y_n^{(4)}.
\end{aligned}$$

O correspondente sistema linear, igualando a zero as expressões que multiplicam as potências de h^0 até h^2 , representa um sistema de três equações a quatro incógnitas que tem uma família de soluções dependentes de um parâmetro, que pode ser escrita como

$$\beta_{20} = 1 + 2\gamma_{20}, \quad \beta_{21} = -2\gamma_{20}, \quad \gamma_{21} = 2 + \gamma_{20},$$

com γ_{20} livre.

Substituindo estes valores nos termos das potências h^3 e h^4 obtemos a expressão do erro de truncamento, $\tau_{n+1,2}(h)$, da fórmula linear de passo múltiplo (3.2)

$$\tau_{n+1,2}(h) = \frac{1}{6}(2 - \gamma_{20})h^3Y_n^{(3)} + \frac{1}{12}(4 - \gamma_{20})h^4Y_n^{(4)} + O(h^5). \quad (3.8)$$

Agora, para a fórmula (3.7), obtemos os termos

$$\begin{aligned}
O(1) &: (1 - \beta_{30} - \beta_{31})Y_n \\
O(h) &: (3 - \beta_{31} - \gamma_{30} - \gamma_{31} - \gamma_{32})Y'_n \\
O(h^2) &: \left(\frac{9}{2} - \frac{1}{2}\beta_{31} - \gamma_{31} - 2\gamma_{32}\right)Y''_n \\
O(h^3) &: \left(\frac{9}{2} - \frac{1}{6}\beta_{31} - \frac{1}{2}\gamma_{31} - 2\gamma_{32}\right)Y_n^{(3)} \\
O(h^4) &: \left(\frac{27}{8} - \frac{1}{24}\beta_{31} - \frac{1}{6}\gamma_{31} - \frac{4}{3}\gamma_{32}\right)Y_n^{(4)}.
\end{aligned}$$

Neste caso, o correspondente sistema linear, ao igualarmos a zero as expressões que multiplicam as potências de h^0 até h^2 , representa um sistema de

três equações a cinco incógnitas que tem uma família de soluções dependentes de dois parâmetros, que pode ser escrita como

$$\beta_{30} = -8 + 2\gamma_{31} + 4\gamma_{32}, \quad \beta_{31} = 9 - 2\gamma_{31} - 4\gamma_{32}, \quad \gamma_{30} = -6 + \gamma_{31} + 3\gamma_{32},$$

com γ_{31} e γ_{32} livres.

Substituindo estes valores nos termos das potências h^3 e h^4 , obtemos a expressão do erro de truncamento $\tau_{n+1,3}(h)$ da fórmula linear de passo múltiplo (3.3)

$$\begin{aligned} \tau_{n+1,3}(h) = & \left(3 - \frac{1}{6}\gamma_{31} - \frac{4}{3}\gamma_{32}\right) h^3 Y_n^{(3)} \\ & + \left(3 - \frac{1}{12}\gamma_{31} - \frac{7}{6}\gamma_{32}\right) h^4 Y_n^{(4)} + O(h^5). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Agora, consideremos

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20}y_n + \beta_{21}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f_n + \gamma_{21}f_{n+1}], \quad (3.10)$$

$$\hat{y}_{n+3} = \beta_{30}y_n + \beta_{31}y_{n+1} + h[\gamma_{30}f_n + \gamma_{31}f_{n+1} + \gamma_{32}\hat{f}_{n+2}],$$

onde

$$\hat{f}_{n+2} = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}), \quad \hat{f}_{n+3} = f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3})$$

e a discretização (3.4) como sendo de passo um, definida por

$$\begin{aligned} Y_{n+1} = & Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) \\ & + \alpha_2 f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \alpha_3 f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3})] + T_{n+1}(h). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Para obtermos a expressão do erro de truncamento local, $T_{n+1}(h)$, para (3.11), olhamos para a diferença entre (3.4) e (3.11). Portanto,

$$\begin{aligned} T_{n+1}(h) = & t_{n+1} + h[\alpha_2(f(x_{n+2}, Y_{n+2}) - f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})) \\ & + \alpha_3(f(x_{n+3}, Y_{n+3}) - f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3}))]. \end{aligned}$$

Mas, de (3.6), (3.7) e (3.10) temos

$$Y_{n+2} = \hat{y}_{n+2} + \tau_{n+1,2}(h), \quad (3.12)$$

$$Y_{n+3} = \hat{y}_{n+3} + \gamma_{32}h(f(x_{n+2}, Y_{n+2}) - f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})) + \tau_{n+1,3}(h)$$

e, pelo desenvolvimento em série de potências de $f(x_{n+2}, Y_{n+2})$, nas vizinhanças do ponto $(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$, obtemos

$$f(x_{n+2}, Y_{n+2}) = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \tau_{n+1,2}(h)g_{n+2} + O(h^6), \quad (3.13)$$

onde $g \equiv \frac{\partial f}{\partial y}$.

Logo,

$$Y_{n+3} = \hat{y}_{n+3} + \gamma_{32}h\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2} + \tau_{n+1,3}(h)$$

e, desenvolvendo em série de potências $f(x_{n+3}, Y_{n+3})$, nas vizinhanças de $(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3})$, obtemos

$$f(x_{n+3}, Y_{n+3}) = f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3}) + [\gamma_{32}h\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2} + \tau_{n+1,3}(h)]g_{n+3} + O(h^6), \quad (3.14)$$

onde $g \equiv \frac{\partial f}{\partial y}$.

Assim, podemos escrever $T_{n+1}(h)$ em função de $t_{n+1}(h)$, $\tau_{n+1,2}(h)$ e $\tau_{n+1,3}(h)$ como

$$\begin{aligned} T_{n+1}(h) = & t_{n+1}(h) + \frac{h^4}{144}Y_n^{(3)}[(-10 + 5\gamma_{20})g_{n+2} + (18 - \gamma_{31} - 8\gamma_{32})g_{n+3}] \\ & + \frac{h^5}{288}\{Y_n^{(4)}[(-20 + 5\gamma_{20})g_{n+2} + (36 - \gamma_{31} - 14\gamma_{32})g_{n+3}] \\ & + 2\gamma_{32}(2 - \gamma_{20})Y_n^{(3)}g_{n+2}g_{n+3}\} + O(h^6). \end{aligned}$$

Expandindo a função g em série de Taylor nas vizinhanças de x_n , obtemos

$$g(x_{n+2}) = g(x_n) + 2hg'(x_n) + O(h^2) \quad (3.15)$$

$$g(x_{n+3}) = g(x_n) + 3hg'(x_n) + O(h^2).$$

Daí,

$$\begin{aligned}
 T_{n+1}(h) = & t_{n+1}(h) + \frac{h^4}{144}(8 + 5\gamma_{20} - \gamma_{31} - 8\gamma_{32})Y_n^{(3)}g_n \\
 & + \frac{h^5}{288}\{(16 + 5\gamma_{20} - \gamma_{31} - 14\gamma_{32})Y_n^{(4)}g_n \\
 & + 2Y_n^{(3)}[(34 + 10\gamma_{20} - 3\gamma_{31} - 24\gamma_{32})g'_n \\
 & + \gamma_{32}(2 - \gamma_{20})g_n^2]\} + O(h^6).
 \end{aligned}$$

Agora, para obtermos $T_{n+1}(h) = O(h^5)$, devemos ter, na expressão do erro, o termo que multiplica $h^4 Y_n^{(3)}$ igual a zero, ou seja,

$$\gamma_{31} = 8 + 5\gamma_{20} - 8\gamma_{32}.$$

Deste modo, a expressão para o erro de truncamento é dada por

$$\begin{aligned}
 T_{n+1}(h) = & \frac{h^5}{720}\{-19Y_n^{(5)} + 5\{(4 - 3\gamma_{32})Y_n^{(4)}g_n \\
 & + (2 - \gamma_{20})Y_n^{(3)}[5g'_n + \gamma_{32}g_n^2]\}\} + O(h^6). \quad (3.16)
 \end{aligned}$$

Assim, temos uma família de dois parâmetros de métodos de passo um de quarta ordem dada por (3.10)-(3.11), desprezando-se os erros de truncamento local e com γ_{20} e γ_{32} livres, que é descrita por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[9f_n + 19f_{n+1} - 5\hat{f}_{n+2} + \hat{f}_{n+3}], \quad (3.17)$$

com $\hat{f}_{n+2} = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$ e $\hat{f}_{n+3} = f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3})$, onde

$$\hat{y}_{n+2} = (1 + 2\gamma_{20})y_n - 2\gamma_{20}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f_n + (2 + \gamma_{20})f_{n+1}] \quad (3.18)$$

e

$$\begin{aligned}
 \hat{y}_{n+3} = & 2(4 + 5\gamma_{20} - 6\gamma_{32})y_n + (-7 - 10\gamma_{20} + 12\gamma_{32})y_{n+1} \\
 & + h[(2 + 5\gamma_{20} - 5\gamma_{32})f_n + (8 + 5\gamma_{20} - 8\gamma_{32})f_{n+1} + \gamma_{32}\hat{f}_{n+2}]. \quad (3.19)
 \end{aligned}$$



3.3 Análise da Estabilidade

Nesta seção, mostraremos a existência de subfamílias dos métodos estendidos de quarta ordem que são A - e/ou L -estáveis. Com esse propósito, consideremos a equação linear teste (1.12). Aplicando essa família de métodos a essa equação, obtemos

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

com $\mu = \lambda h$, onde a função de estabilidade é dada por

$$R(\mu) = \frac{N}{D}, \quad (3.20)$$

com

$$N = 1 + \frac{\mu}{2}(1 - \gamma_{32}) + \frac{\mu^2}{12}[1 + \gamma_{32}(-2 + \gamma_{20})] + \frac{\mu^3}{24}\gamma_{32}\gamma_{20} \quad (3.21)$$

e

$$D = 1 - \frac{\mu}{2}(1 + \gamma_{32}) + \frac{\mu^2}{12}[1 + \gamma_{32}(4 + \gamma_{20})] - \frac{\mu^3}{24}\gamma_{32}(2 + \gamma_{20}). \quad (3.22)$$

Como estamos trabalhando com uma família de métodos com dois parâmetros, torna-se difícil determinar as propriedades de estabilidade e, então, nos restringiremos a algumas análises e à obtenção de métodos A - ou L -estáveis.

Notemos que a função de estabilidade é uma função racional e, então, podemos trabalhar o conceito de aceitabilidade para uma aproximação racional para a exponencial, desenvolvido no capítulo 1.

Para $\gamma_{32} = 0$ obtemos a seguinte expressão para $R(\mu)$

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{1}{2}\mu + \frac{1}{12}\mu^2}{1 - \frac{1}{2}\mu + \frac{1}{12}\mu^2} \quad (3.23)$$

e o parâmetro γ_{20} fica livre. Sendo a função de estabilidade (3.23) uma aproximação de Padé, $\hat{R}_2^2(\mu)$ e A -aceitável, para a exponencial, podemos

então concluir que os métodos da subfamília obtida com esses valores para os parâmetros γ_{20} e γ_{32} são A -estáveis.

Escolhendo $\gamma_{20} = 2$, temos que ambos, $\tau_{n+1,2}(h)$ e $\tau_{n+1,3}(h)$, dados por (3.8) e (3.9) teriam $O(h^4)$ e, conseqüentemente, essa escolha também simplificaria a expressão de $T_{n+1}(h)$ em (3.16).

Logo, de (3.17)-(3.19), um método estendido de quarta ordem A -estável é dado por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[9f_n + 19f_{n+1} - 5\hat{f}_{n+2} + \hat{f}_{n+3}] \quad (3.24)$$

$$\hat{y}_{n+2} = 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f_n + 4f_{n+1}] \quad (3.25)$$

$$\hat{y}_{n+3} = 28y_n - 27y_{n+1} + h[12f_n + 18f_{n+1}], \quad (3.26)$$

o qual denotaremos por $MA_4(2, 0)$.

Agora, para $\gamma_{32} \neq 0$ e, fazendo uso da expressão de $R(\mu)$ dada por (3.20) e da condição

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| \leq 1,$$

devemos ter satisfeita a seguinte relação

$$\left| \frac{\gamma_{20}}{2 + \gamma_{20}} \right| \leq 1,$$

de onde se verifica que $\gamma_{20} \geq -1$. Logo, para esses valores de γ_{20} e γ_{32} temos

$$|R(\mu)| < 1, \quad \text{com } \operatorname{Re}(\mu) < 0$$

e obtemos uma outra subfamília de métodos que são A -estáveis.

Na tentativa de obtermos métodos que possuam a propriedade adicional de L -estabilidade, olhamos para a função de estabilidade dada por (3.20) e verificamos que métodos L -estáveis apenas serão possíveis quando $\gamma_{20} = 0$, uma vez que a função de estabilidade toma a forma

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{1}{2}(1 - \gamma_{32})\mu + \frac{1}{12}(1 - 2\gamma_{32})\mu^2}{1 - \frac{1}{2}(1 + \gamma_{32})\mu + \frac{1}{12}(1 + 4\gamma_{32})\mu^2 - \frac{1}{12}\gamma_{32}\mu^3}, \quad (3.27)$$



com $\gamma_{32} \neq 0$.

Conseguimos, então, uma subfamília de métodos que são L -estáveis. Alguns valores para γ_{32} podem ser tomados para obtermos particulares métodos dessa subfamília. Ao escolhermos $\gamma_{32} = \frac{1}{5}$, verificamos que a função de estabilidade é dada por

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{2}{5}\mu + \frac{1}{20}\mu^2}{1 - \frac{3}{5}\mu + \frac{3}{20}\mu^2 - \frac{1}{60}\mu^3}$$

que é uma aproximação de Padé $\hat{R}_3^2(\mu)$, L -aceitável. Outro valor que pode ser escolhido quando observamos a expressão de $R(\mu)$ em (3.27) é $\gamma_{32} = \frac{1}{2}$, já que para esse valor reduzimos ainda mais o grau do numerador de $R(\mu)$, produzindo a seguinte função de estabilidade

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{1}{4}\mu}{1 - \frac{3}{4}\mu + \frac{1}{4}\mu^2 - \frac{1}{24}\mu^3},$$

onde $\lim_{\text{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = 0$.

Assim, um método estendido de quarta ordem L -estável é dado por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[9f_n + 19f_{n+1} - 5\hat{f}_{n+2} + \hat{f}_{n+3}] \quad (3.28)$$

$$\hat{y}_{n+2} = y_n + 2hf_{n+1} \quad (3.29)$$

$$\hat{y}_{n+3} = 2y_n - y_{n+1} + \frac{h}{2}[-f_n + 2f_{n+1} + \hat{f}_{n+2}], \quad (3.30)$$

o qual denotaremos por $\text{ML}_4(0, 1/2)$.

Poderíamos escolher outros valores para γ_{20} e γ_{32} , satisfazendo as condições analisadas acima, podendo assim obter vários outros métodos satisfazendo as propriedades da A - e/ou L -estabilidade. Mas, restringiremos a avaliação numérica apenas aos métodos apresentados.



Capítulo 4

Forma Geral dos Métodos Estendidos de Passo Um

4.1 Introdução

Neste capítulo, introduziremos a classe de métodos estendidos de passo um como uma generalização do método de Usmani e Agarwal [15]. Métodos dessa classe de ordens três e quatro que são A - e/ou L -estáveis, foram vistos anteriormente nos capítulos 2 e 3. É natural, então, perguntar a ordem máxima atingida pelos métodos dessa classe. Com o propósito de responder a essa pergunta, mostraremos que, quando algumas restrições são impostas à ordem dos erros de truncamento local, a ordem máxima alcançada pelos métodos dessa classe é cinco.

Obteremos os métodos estendidos de passo um de quinta ordem, e mostraremos, através de uma análise das propriedades de estabilidade desses métodos, a existência de subfamílias de métodos que são A -estáveis e/ou L -estáveis.



4.2 Generalização dos Métodos Estendidos de Passo Um

Nesta seção, vamos definir a forma geral dos métodos estendidos de passo um. Como nos capítulos anteriores, consideremos a seguinte discretização para a equação diferencial (2.1)

$$Y_{n+1} = Y_n + h \left[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \sum_{j=2}^{p-1} \alpha_j f(x_{n+j}, Y_{n+j}) \right] + t_{n+1}(h). \quad (4.1)$$

Para fazer a discretização em (4.1) ser de passo um, introduzimos, para $j = 2, \dots, p-1$,

$$Y_{n+j} = \beta_{j0} Y_n + \beta_{j1} Y_{n+1} + h [\gamma_{j0} f(x_n, Y_n) + \gamma_{j1} f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk} f(x_{n+k}, Y_{n+k})] + \tau_{n+1,j}(h), \quad (4.2)$$

para $n = 0, 1, 2, \dots$

Vale a pena observar que $\sum_{k=2}^r = 0$, se $r < 2$.

Agora, definimos um *método estendido de passo um e ordem p* como segue. Para $j = 2, \dots, p-1$,

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\alpha_0 f_n + \alpha_1 f_{n+1} + \sum_{j=2}^{p-1} \alpha_j \hat{f}_{n+j} \right], \quad (4.3)$$

onde $\hat{f}_{n+j} = f(x_{n+j}, \hat{y}_{n+j})$ e

$$\hat{y}_{n+j} = \beta_{j0} y_n + \beta_{j1} y_{n+1} + h \left[\gamma_{j0} f_n + \gamma_{j1} f_{n+1} + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk} \hat{f}_{n+k} \right]. \quad (4.4)$$

Notemos que os métodos de Usmani e Agarwal [15] e de Jacques [9] correspondem à ordem $p = 3$, e o método de Chawla *et al.* [4] corresponde à ordem $p = 4$.

Para promovermos a discussão desses métodos de uma maneira facilitada, é conveniente nos referirmos ao método definido por (4.3)-(4.4) como mostra a Tabela 4.1 a seguir.

Tabela 4.1: Coeficientes do método de ordem p .

α_0	α_1	α_2	$\dots$	$\dots$	$\dots$	α_{p-1}
β_{20}	β_{21}	γ_{20}	γ_{21}			
β_{30}	β_{31}	γ_{30}	γ_{31}	γ_{32}		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
$\beta_{p-1,0}$	$\beta_{p-1,1}$	$\gamma_{p-1,0}$	$\gamma_{p-1,1}$	$\gamma_{p-1,2}$	$\dots$	$\gamma_{p-1,p-2}$

Como vimos, Usmani e Agarwal [15] obtêm um método estendido de passo um de terceira ordem exigindo que $\tau_{n+1,2}(h) = O(h^4)$, o que resultou em um método unicamente definido, a Regra Trapezoidal Estendida, que é A-estável. Jacques [9] consegue uma família de métodos de terceira ordem requerendo que $\tau_{n+1,2}(h) = O(h^3)$; isto resultou em uma família de métodos de terceira ordem com um parâmetro livre, e um valor para este parâmetro livre é escolhido para derivar um método L-estável. Chawla *et al.* [4] obtêm uma família de métodos de quarta ordem impondo que $\tau_{n+1,2}, \tau_{n+1,3} = O(h^3)$ e têm subfamílias de métodos A-estáveis e L-estáveis.

Estendendo essas idéias para a obtenção de um método estendido de ordem p , definido por (4.3)-(4.4), exigimos que $t_{n+1}(h) = O(h^{p+1})$, enquanto $\tau_{n+1,j}(h) = O(h^{p-1})$ e $T_{n+1}(h) = O(h^{p+1})$. Se olharmos para a fórmula linear de passo múltiplo formada pelos coeficientes dados pelos elementos listados na primeira linha, de *betas* e *gammas* da Tabela 4.1, podemos notar, através dos conceitos desenvolvidos no Capítulo 1, que a ordem máxima alcançada por essa fórmula é $p = 2k - 1$, onde k é o tamanho do passo, nesse caso 2. Logo, esta fórmula terá no máximo ordem 3, ou seja, $\tau_{n+1,2}(h) = O(h^4)$. Portanto, $T_{n+1}(h) = O(h^6)$, isto é, a ordem máxima atingida por um método dessa classe

não pode exceder cinco.

Vimos, nos capítulos anteriores, métodos de ordem três e quatro e é de nosso interesse fazermos uma análise dos métodos de ordem cinco, o que segue na próxima seção.

4.3 Obtenção de Métodos Estendidos de Passo Um de Quinta Ordem

O objetivo, nesta seção, é obter métodos estendidos de quinta ordem da forma

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f_n + \alpha_1 f_{n+1} + \alpha_2 \hat{f}_{n+2} + \alpha_3 \hat{f}_{n+3} + \alpha_4 \hat{f}_{n+4}] \quad (4.5)$$

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20} y_n + \beta_{21} y_{n+1} + h[\gamma_{20} f_n + \gamma_{21} f_{n+1}] \quad (4.6)$$

$$\hat{y}_{n+3} = \beta_{30} y_n + \beta_{31} y_{n+1} + h[\gamma_{30} f_n + \gamma_{31} f_{n+1} + \gamma_{32} \hat{f}_{n+2}] \quad (4.7)$$

$$\hat{y}_{n+4} = \beta_{40} y_n + \beta_{41} y_{n+1} + h[\gamma_{40} f_n + \gamma_{41} f_{n+1} + \gamma_{42} \hat{f}_{n+2} + \gamma_{43} \hat{f}_{n+3}], \quad (4.8)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$

Consideremos a seguinte discretização

$$Y_{n+1} = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, Y_{n+2}) + \alpha_3 f(x_{n+3}, Y_{n+3}) + \alpha_4 f(x_{n+4}, Y_{n+4})] + t_{n+1}(h). \quad (4.9)$$

Fazendo uso do mesmo raciocínio dos capítulos anteriores, mas agora com a condição de que $t_{n+1}(h) = O(h^6)$, obtemos os seguintes coeficientes para essa discretização

$$\alpha_0 = \frac{251}{720}, \quad \alpha_1 = \frac{323}{360}, \quad \alpha_2 = -\frac{11}{30}, \quad \alpha_3 = \frac{53}{360}, \quad \alpha_4 = -\frac{19}{720},$$

cujo erro de truncamento local é dado por

$$t_{n+1}(h) = \frac{3}{160} h^6 Y_n^{(6)} + O(h^7). \quad (4.10)$$

Para tornar a discretização em (4.9) de passo um, consideremos

$$Y_{n+2} = \beta_{20}Y_n + \beta_{21}Y_{n+1} + h[\gamma_{20}f(x_n, Y_n) + \gamma_{21}f(x_{n+1}, Y_{n+1})] + \tau_{n+1,2}(h), \quad (4.11)$$

$$Y_{n+3} = \beta_{30}Y_n + \beta_{31}Y_{n+1} + h[\gamma_{30}f(x_n, Y_n) + \gamma_{31}f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \gamma_{32}f(x_{n+2}, Y_{n+2})] + \tau_{n+1,3}(h), \quad (4.12)$$

$$Y_{n+4} = \beta_{40}Y_n + \beta_{41}Y_{n+1} + h[\gamma_{40}f(x_n, Y_n) + \gamma_{41}f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \gamma_{42}f(x_{n+2}, Y_{n+2}) + \gamma_{43}f(x_{n+3}, Y_{n+3})] + \tau_{n+1,4}(h). \quad (4.13)$$

Desejamos que $\tau_{n+1,j}(h) = O(h^4)$, $j = 2, 3, 4$ e, com isso, obtemos os seguintes valores para os coeficientes

$$\beta_{20} = 5, \quad \beta_{21} = -4, \quad \gamma_{20} = 2, \quad \gamma_{21} = 4,$$

onde

$$\tau_{n+1,2}(h) = \frac{1}{6}h^4Y_n^{(4)} + \frac{2}{15}h^5Y_n^{(5)} + O(h^6), \quad (4.14)$$

e

$$\begin{aligned} \beta_{30} &= 28 - 12\gamma_{32}, & \beta_{31} &= -27 + 12\gamma_{32}, \\ \gamma_{30} &= 12 - 5\gamma_{32}, & \gamma_{31} &= 18 - 8\gamma_{32}, \end{aligned}$$

com γ_{32} livre, onde

$$\tau_{n+1,3}(h) = \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\gamma_{32}\right)h^4Y_n^{(4)} + \left(\frac{3}{2} - \frac{13}{30}\gamma_{32}\right)h^5Y_n^{(5)} + O(h^6), \quad (4.15)$$

e

$$\begin{aligned} \beta_{40} &= 81 - 12\gamma_{42} - 36\gamma_{43}, & \beta_{41} &= -80 + 12\gamma_{42} + 36\gamma_{43}, \\ \gamma_{40} &= 36 - 5\gamma_{42} - 16\gamma_{43}, & \gamma_{41} &= 48 - 8\gamma_{42} - 21\gamma_{43}, \end{aligned}$$

com γ_{42} e γ_{43} livres, onde

$$\tau_{n+1,4}(h) = \left(6 - \frac{1}{2}\gamma_{42} - \frac{5}{2}\gamma_{43}\right)h^4Y_n^{(4)} + \left(\frac{36}{5} - \frac{13}{30}\gamma_{42} - \frac{14}{5}\gamma_{43}\right)h^5Y_n^{(5)} + O(h^6). \quad (4.16)$$

Agora, sejam

$$\hat{f}_{n+2} = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}), \quad \hat{f}_{n+3} = f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3}), \quad \hat{f}_{n+4} = f(x_{n+4}, \hat{y}_{n+4}),$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+2} &= \beta_{20}y_n + \beta_{21}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f_n + \gamma_{21}f_{n+1}] \\ \hat{y}_{n+3} &= \beta_{30}y_n + \beta_{31}y_{n+1} + h[\gamma_{30}f_n + \gamma_{31}f_{n+1} + \gamma_{32}\hat{f}_{n+2}] \\ \hat{y}_{n+4} &= \beta_{40}y_n + \beta_{41}y_{n+1} + h[\gamma_{40}f_n + \gamma_{41}f_{n+1} + \gamma_{42}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{43}\hat{f}_{n+3}], \end{aligned} \quad (4.17)$$

e consideremos a discretização (4.9) como sendo de passo um, definida por

$$\begin{aligned} Y_{n+1} &= Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) \\ &\quad + \alpha_3 f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3}) + \alpha_4 f(x_{n+4}, \hat{y}_{n+4})] + T_{n+1}(h). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Para calcularmos o erro de truncamento local de (4.18), da diferença entre (4.9) e (4.18), obtemos

$$\begin{aligned} T_{n+1}(h) &= t_{n+1}(h) + h[\alpha_2(f(x_{n+2}, Y_{n+2}) - f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})) \\ &\quad + \alpha_3(f(x_{n+3}, Y_{n+3}) - f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3})) \\ &\quad + \alpha_4(f(x_{n+4}, Y_{n+4}) - f(x_{n+4}, \hat{y}_{n+4}))]. \end{aligned}$$

De (4.11), (4.12), (4.13) e (4.17), temos

$$\begin{aligned} Y_{n+2} &= \hat{y}_{n+2} + \tau_{n+1,2}(h) \\ Y_{n+3} &= \hat{y}_{n+3} + \gamma_{32}h(f_{n+2} - \hat{f}_{n+2}) + \tau_{n+1,3}(h) \\ Y_{n+4} &= \hat{y}_{n+4} + \gamma_{42}h(f_{n+2} - \hat{f}_{n+2}) + \gamma_{43}h(f_{n+3} - \hat{f}_{n+3}) + \tau_{n+1,4}(h) \end{aligned} \quad (4.19)$$

e, através da expansão em série de Taylor da função $f(x_{n+2}, Y_{n+2})$ nas vizinhanças do ponto $(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$, obtemos

$$f(x_{n+2}, Y_{n+2}) = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \tau_{n+1,2}(h)g_{n+2} + O(h^8) \quad (4.20)$$

e

$$Y_{n+3} = \hat{y}_{n+3} + \gamma_{32}h\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2} + \tau_{n+1,3}(h) + O(h^8).$$

Analogamente,

$$f(x_{n+3}, Y_{n+3}) = f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3}) + [\gamma_{32}h\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2} + \tau_{n+1,3}(h)]g_{n+3} + O(h^6) \quad (4.21)$$

e

$$Y_{n+4} = \hat{y}_{n+4} + \gamma_{42}h\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2} + \gamma_{43}\gamma_{32}h^2\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2}g_{n+3} \\ + \gamma_{43}h\tau_{n+1,3}(h)g_{n+3} + \tau_{n+1,4}(h) + O(h^8).$$

Novamente, usando expansão em série, temos

$$f(x_{n+4}, Y_{n+4}) = f(x_{n+4}, \hat{y}_{n+4}) + [\gamma_{42}h + \tau_{n+1,2}(h)g_{n+2}\gamma_{43}h\tau_{n+1,3}(h)g_{n+3} \\ + \tau_{n+1,4}(h)]g_{n+4} + O(h^6), \quad (4.22)$$

onde $g \equiv \frac{\partial f}{\partial y}$.

Usando as expressões obtidas para $t_{n+1}(h)$ e $\tau_{n+1,j}(h)$, com $j = 2, 3, 4$, e (4.20), (4.21), (4.22), de (4.19) obtemos

$$T_{n+1}(h) = t_{n+1}(h) + h[\alpha_2\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2} + \alpha_3\tau_{n+1,3}(h) + \alpha_4\tau_{n+1,4}(h)g_{n+4}] \\ + h^2[\alpha_3\gamma_{32}\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2}g_{n+3} + \alpha_4\gamma_{42}\tau_{n+1,2}(h)g_{n+2}g_{n+4} \\ + \alpha_4\gamma_{43}\tau_{n+1,3}(h)g_{n+3}g_{n+4}] + O(h^7).$$

Substituindo os valores já obtidos, temos

$$T_{n+1}(h) = \frac{h^5}{1440}[2 - 106\gamma_{32} + 19\gamma_{42} + 95\gamma_{43}]Y_n^{(4)}g_n \\ + \frac{h^6}{21600}[405Y_n^{(6)} + (-390 - 1378\gamma_{32} + 247\gamma_{42} + 1596\gamma_{43})Y_n^{(5)}g_n \\ + (-2010 - 4770\gamma_{32} + 1140\gamma_{42} + 5700\gamma_{43})Y_n^{(4)}g'_n \\ + (530\gamma_{32} - 95\gamma_{42} - 855\gamma_{43} + 285\gamma_{32}\gamma_{43})Y_n^{(4)}g_n^2] + O(h^7). \quad (4.23)$$

Como desejamos que $T_{n+1}(h)$, em (3.16), tenha $O(h^6)$, devemos ter

$$\gamma_{42} = -\frac{1}{19}(2 - 106\gamma_{32} + 95\gamma_{43}),$$

e, então,

$$T_{n+1}(h) = \frac{h^6}{21600} [405Y_n^{(6)} + (-416 + 361\gamma_{43})Y_n^{(5)}g_n + 30(-71 + 53\gamma_{32})Y_n^{(4)}g'_n + 5(2 - 76\gamma_{43} + 57\gamma_{32}\gamma_{43})Y_n^{(4)}g_n^2] + O(h^7), \quad (4.24)$$

onde, agora, γ_{32} e γ_{43} são os parâmetros livres.

Conseguimos, assim, uma família, dependente de dois parâmetros, de métodos estendidos de passo um de quinta ordem cujos coeficientes são apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Coeficientes da família de métodos de quinta ordem.

$\frac{251}{720}$	$\frac{323}{360}$	$-\frac{11}{30}$	$\frac{53}{360}$	$-\frac{19}{720}$	
5	-4	2	4		
$28 - 12\gamma_{32}$	$-27 + 12\gamma_{32}$	$12 - 5\gamma_{32}$	$18 - 8\gamma_{32}$	γ_{32}	
β_{40}	β_{41}	γ_{40}	γ_{41}	γ_{42}	γ_{43}

$$\beta_{40} = \frac{1}{19}(1563 - 1272\gamma_{32} + 456\gamma_{43}),$$

$$\beta_{41} = \frac{1}{19}(-1544 + 1272\gamma_{32} - 456\gamma_{43}),$$

$$\gamma_{40} = \frac{1}{19}(694 - 530\gamma_{32} + 171\gamma_{43}),$$

$$\gamma_{41} = \frac{1}{19}(928 - 848\gamma_{32} + 361\gamma_{43}).$$

4.4 Análise da Estabilidade

A próxima consideração será obter subfamílias de métodos $A-$ ou $L-$ estáveis. Aplicando essa família de métodos à equação teste, temos

$$y_{n+1} = R(\mu)y_n, \quad (4.25)$$



onde $\mu = h\lambda$,

$$R(\mu) = \frac{N}{D}$$

e

$$\begin{aligned} N = & 360 + \mu(168 - 228\gamma_{43}) + \mu^2(30 - 114\gamma_{43} + 114\gamma_{32}\gamma_{43}) \\ & + \mu^3(2 - 19\gamma_{43}) + \mu^4(-19\gamma_{32}\gamma_{43}), \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} D = & 360 - \mu(192 + 228\gamma_{43}) + \mu^2(42 + 114\gamma_{43} + 114\gamma_{32}\gamma_{43}) \\ & - \mu^3(4 + 19\gamma_{43} + 114\gamma_{32}\gamma_{43}) + \mu^4(38\gamma_{32}\gamma_{43}). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Como no caso do método de ordem quatro, determinar as propriedades de estabilidade para essa família de métodos é um tanto quanto complicado, uma vez que, novamente, estamos trabalhando com uma família de métodos que dependem de dois parâmetros. Sendo assim, vamos nos restringir a algumas observações.

Para $\gamma_{32} \neq 0$ e $\gamma_{43} \neq 0$ podem existir métodos A -estáveis mas não há nenhum método L -estável, uma vez que

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = \frac{1}{2}. \quad (4.28)$$

Na tentativa de obtermos métodos L -estáveis, observemos que, para $\gamma_{32} = 0$, a função de estabilidade toma a forma

$$R(\mu) = \frac{360 + \mu(168 - 228\gamma_{43}) + \mu^2(30 - 114\gamma_{43}) + \mu^3(2 - 19\gamma_{43})}{360 - \mu(192 + 228\gamma_{43}) + \mu^2(42 + 114\gamma_{43}) - \mu^3(4 + 19\gamma_{43})} \quad (4.29)$$

e, então, necessitamos que o coeficiente de μ^3 , no numerador de $R(\mu)$ em (4.29), seja igual a zero, produzindo $\gamma_{43} = \frac{2}{19}$. Nesse caso, a função de estabilidade torna-se

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{2}{5}\mu + \frac{1}{20}\mu^2}{1 - \frac{3}{5}\mu + \frac{3}{20}\mu^2 - \frac{1}{60}\mu^3}, \quad (4.30)$$

que é a aproximação de Padé $\hat{R}_2^3(\mu)$, que por sua vez é L -aceitável. Logo, o método obtido com esses valores para γ_{32} e γ_{43} é L -estável.

Para essa escolha, $\gamma_{32} = 0$ e $\gamma_{43} = \frac{2}{19}$, temos um método estendido de quinta ordem L -estável, que denotaremos $ML_5(0, 2/19)$, cujos coeficientes são dados na seguinte tabela:

Tabela 4.3: Coeficientes do método L -estável $ML_5(0, 2/19)$.

$\frac{251}{720}$	$\frac{323}{360}$	$-\frac{11}{30}$	$\frac{53}{360}$	$-\frac{19}{720}$	
5	-4	2	4		
28	-27	12	18	0	
$\frac{1611}{19}$	$-\frac{1592}{19}$	$\frac{712}{19}$	$\frac{966}{19}$	$-\frac{12}{19}$	$\frac{2}{19}$

Ainda para $\gamma_{32} = 0$, conseguimos uma subfamília de métodos que é A -estável para $\gamma_{43} \geq -\frac{1}{19}$. Isso segue da expressão da função de estabilidade dada por (4.29) e da condição

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| \leq 1,$$

uma vez que

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = \left| \frac{-2 + 19\gamma_{43}}{4 + 19\gamma_{43}} \right|,$$

o que produz $|R(\mu)| < 1$.

Agora, no caso $\gamma_{43} = 0$, temos que a expressão da função de estabilidade é

$$R(\mu) = \frac{360 + 168\mu + 30\mu^2 + 2\mu^3}{360 - 192\mu + 42\mu^2 - 4\mu^3} \quad (4.31)$$

e independe do valor de γ_{32} .

Nesse caso, conseguimos

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = \frac{1}{2} \quad (\leq 1),$$

o que nos fornece $|R(\mu)| < 1$, produzindo, assim, uma subfamília de métodos A -estáveis. Para a particular escolha $\gamma_{32} = 0$, temos um método estendido de

quinta ordem A -estável, que denotaremos por $MA_5(0,0)$, cujos coeficientes são apresentados na tabela que segue:

Tabela 4.4: Coeficientes do método A -estável $MA_5(0,0)$.

$\frac{251}{720}$	$\frac{323}{360}$	$-\frac{11}{30}$	$\frac{53}{360}$	$-\frac{19}{720}$	
5	-4	2	4		
28	-27	12	18	0	
$\frac{1563}{19}$	$-\frac{1544}{19}$	$\frac{694}{19}$	$\frac{928}{19}$	$-\frac{2}{19}$	0

Novamente, outros valores para γ_{32} e γ_{43} poderiam ter sido tomados, mas, no intuito de testar essas subfamílias, restringimo-nos a esses particulares métodos para serem aplicados aos problemas testes.

Capítulo 5

Métodos Estendidos de Passo Um de Sexta Ordem

5.1 Introdução

Na análise para a construção de métodos estendidos de passo um e ordem p , Chawla *et al.* [5] propõem que as ordens dos erros de truncamento local sejam $t_{n+1}(h) = O(h^{p+1})$, enquanto $\tau_{n+1,j}(h) = O(h^{p-1})$ e $T_{n+1}(h) = O(h^{p+1})$ e, com isso, concluem que a ordem máxima alcançada por métodos dessa classe não pode exceder cinco.

Nas próximas seções, veremos que se tais exigências sobre os erros de truncamento não forem impostas, famílias desses métodos estendidos de passo um e ordem $p = 6$ podem ser obtidas, das quais podemos derivar particulares métodos A - e/ou L -estáveis.



5.2 Construção de Métodos Estendidos de Passo

Um e Ordem $p = 6$

O objetivo é obter métodos estendidos de sexta ordem da forma

$$\begin{aligned}
 \hat{y}_{n+2} &= \beta_{20}y_n + \beta_{21}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f_n + \gamma_{21}f_{n+1}], \\
 \hat{y}_{n+3} &= \beta_{30}y_n + \beta_{31}y_{n+1} + h[\gamma_{30}f_n + \gamma_{31}f_{n+1} + \gamma_{32}\hat{f}_{n+2}], \\
 \hat{y}_{n+4} &= \beta_{40}y_n + \beta_{41}y_{n+1} + h[\gamma_{40}f_n + \gamma_{41}f_{n+1} + \gamma_{42}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{43}\hat{f}_{n+3}], \\
 \hat{y}_{n+5} &= \beta_{50}y_n + \beta_{51}y_{n+1} + h[\gamma_{50}f_n + \gamma_{51}f_{n+1} + \gamma_{52}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{53}\hat{f}_{n+3} + \gamma_{54}\hat{f}_{n+4}], \\
 y_{n+1} &= y_n + h[\alpha_0f_n + \alpha_1f_{n+1} + \alpha_2\hat{f}_{n+2} + \alpha_3\hat{f}_{n+3} + \alpha_4\hat{f}_{n+4} + \alpha_5\hat{f}_{n+5}], \quad (5.1)
 \end{aligned}$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$

Devemos impor, então, que o erro de truncamento local, $t_{n+1}(h)$, da fórmula principal seja $O(h^7)$, o que fornece

$$\alpha_0 = \frac{95}{288}, \quad \alpha_1 = \frac{1427}{1440}, \quad \alpha_2 = -\frac{133}{240}, \quad \alpha_3 = \frac{241}{720}, \quad \alpha_4 = -\frac{173}{1440}, \quad \alpha_5 = \frac{3}{160}$$

e

$$t_{n+1}(h) = -\frac{863}{60480}h^7Y_n^{(7)} + O(h^8). \quad (5.2)$$

Agora, exigindo que os erros de truncamento local das fórmulas intermediárias sejam

$$\tau_{n+1,j}(h) = O(h^4), \quad j = 2, 3, 4, 5,$$

obtemos:

Para $j = 2$,

$$\beta_{20} = 5, \quad \beta_{21} = -4, \quad \gamma_{20} = 2, \quad \gamma_{21} = 4,$$

e

$$\tau_{n+1,2}(h) = \frac{1}{6}h^4Y_n^{(4)} + \frac{2}{15}h^5Y_n^{(5)} + \frac{11}{180}h^6Y_n^{(6)} + O(h^7). \quad (5.3)$$

Para $j = 3$,

$$\begin{aligned}\beta_{30} &= 28 - 12\gamma_{32}, & \beta_{31} &= -27 + 12\gamma_{32}, \\ \gamma_{30} &= 12 - 5\gamma_{32}, & \gamma_{31} &= 18 - 8\gamma_{32},\end{aligned}$$

com γ_{32} livre, e

$$\begin{aligned}\tau_{n+1,3}(h) &= \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\gamma_{32}\right) h^4 Y_n^{(4)} + \left(\frac{3}{2} - \frac{13}{30}\gamma_{32}\right) h^5 Y_n^{(5)} \\ &+ \left(\frac{9}{10} - \frac{13}{60}\gamma_{32}\right) h^6 Y_n^{(6)} + O(h^7).\end{aligned}\quad (5.4)$$

Para $j = 4$,

$$\begin{aligned}\beta_{40} &= 81 - 12\gamma_{42} - 36\gamma_{43}, & \beta_{41} &= -80 + 12\gamma_{42} + 36\gamma_{43}, \\ \gamma_{40} &= 36 - 5\gamma_{42} - 16\gamma_{43}, & \gamma_{41} &= 48 - 8\gamma_{42} - 21\gamma_{43},\end{aligned}$$

com γ_{42} e γ_{43} livres, e

$$\begin{aligned}\tau_{n+1,4}(h) &= \left(6 - \frac{1}{2}\gamma_{42} - \frac{5}{2}\gamma_{43}\right) h^4 Y_n^{(4)} + \left(\frac{36}{5} - \frac{13}{30}\gamma_{42} - \frac{14}{5}\gamma_{43}\right) h^5 Y_n^{(5)} \\ &+ \left(\frac{27}{5} - \frac{13}{60}\gamma_{42} - \frac{19}{10}\gamma_{43}\right) h^6 Y_n^{(6)} + O(h^7).\end{aligned}\quad (5.5)$$

Para $j = 5$,

$$\begin{aligned}\beta_{50} &= 176 - 12\gamma_{52} - 36\gamma_{53} - 72\gamma_{54}, & \beta_{51} &= -175 + 12\gamma_{52} + 36\gamma_{53} + 72\gamma_{54}, \\ \gamma_{50} &= 80 - 5\gamma_{52} - 16\gamma_{53} - 33\gamma_{54}, & \gamma_{51} &= 100 - 8\gamma_{52} - 21\gamma_{53} - 40\gamma_{54},\end{aligned}$$

com γ_{52} , γ_{53} e γ_{54} livres, e

$$\begin{aligned}\tau_{n+1,5}(h) &= \left(\frac{50}{3} - \frac{1}{2}\gamma_{52} - \frac{5}{2}\gamma_{53} - 7\gamma_{54}\right) h^4 Y_n^{(4)} \\ &+ \left(\frac{70}{3} - \frac{13}{30}\gamma_{52} - \frac{14}{5}\gamma_{53} - \frac{48}{5}\gamma_{54}\right) h^5 Y_n^{(5)} \\ &+ \left(\frac{190}{9} - \frac{13}{60}\gamma_{52} - \frac{19}{10}\gamma_{53} - \frac{83}{10}\gamma_{54}\right) h^6 Y_n^{(6)} + O(h^7).\end{aligned}\quad (5.6)$$

Assim, usando a mesma idéia dos capítulos anteriores, podemos escrever a expressão do erro de truncamento local da fórmula estendida por

$$T_{n+1}(h) = \frac{h^5}{2880} [4 - 482\gamma_{32} + 173\gamma_{42} + 865\gamma_{43} - 27\gamma_{52} - 135\gamma_{53} - 378\gamma_{54}] Y_n^{(4)} g_n$$

$$\begin{aligned}
& +h^6 \left[\frac{1}{43200} (30 - 6266\gamma_{32} + 2249\gamma_{42} + 14532\gamma_{43} - 351\gamma_{52} - 2268\gamma_{53} - 7776\gamma_{54}) Y_n^{(5)} g_n \right. \\
& + \frac{1}{2880} (2 - 1446\gamma_{32} + 692\gamma_{42} + 3460\gamma_{43} - 135\gamma_{52} - 675\gamma_{53} - 1890\gamma_{54}) Y_n^{(4)} g'_n \\
& + \frac{1}{8640} (482\gamma_{32} - 173\gamma_{42} - 1557\gamma_{43} + 519\gamma_{32}\gamma_{43} + 27\gamma_{52} + 243\gamma_{53} - 81\gamma_{32}\gamma_{53} \\
& + 972\gamma_{54} - 81\gamma_{42}\gamma_{54} - 405\gamma_{43}\gamma_{54}) Y_n^{(4)} g_n^2 \left. \right] \\
& + h^7 \left[-\frac{863}{60480} Y_n^{(7)} + \frac{1}{86400} (1250 - 6266\gamma_{32} + 2249\gamma_{42} + 19722\gamma_{43} - 351\gamma_{52} - 3078\gamma_{53} \right. \\
& - 13446\gamma_{54}) Y_n^{(6)} g_n + \frac{1}{43200} (3714 - 18798\gamma_{32} + 8996\gamma_{42} + 58128\gamma_{43} - 1755\gamma_{52} \\
& - 11340\gamma_{53} - 38880\gamma_{54}) Y_n^{(5)} g'_n + \frac{1}{43200} (1928\gamma_{32} - 692\gamma_{42} - 7785\gamma_{43} \\
& + 2249\gamma_{32}\gamma_{43} + 108\gamma_{52} + 1215\gamma_{53} - 351\gamma_{53} + 5832\gamma_{54} - 351\gamma_{42}\gamma_{54} \\
& - 2268\gamma_{43}\gamma_{54}) Y_n^{(5)} g_n^2 + \frac{1}{8640} (2410\gamma_{32} - 1038\gamma_{42} - 10899\gamma_{43} + 3633\gamma_{32}\gamma_{43} \\
& + 189\gamma_{52} + 1944\gamma_{53} - 648\gamma_{32}\gamma_{53} + 8748\gamma_{54} - 729\gamma_{42}\gamma_{54} - 3645\gamma_{43}\gamma_{54}) Y_n^{(4)} g_n g'_n \\
& + \frac{1}{2880} (-6133 - 2169\gamma_{32} + 1384\gamma_{42} + 6920\gamma_{43} - 135\gamma_{52} - 675\gamma_{53} \\
& - 1890\gamma_{54}) Y_n^{(4)} g_n'' + \frac{1}{8640} (-173\gamma_{32} + 27\gamma_{32}\gamma_{53} + 27\gamma_{42}\gamma_{54} + 243\gamma_{43}\gamma_{54} \\
& - 81\gamma_{32}\gamma_{43}\gamma_{54}) Y_n^{(4)} g_n^3 + O(h^8), \tag{5.7}
\end{aligned}$$

onde $g \equiv \frac{\partial f}{\partial y}$.

Como desejamos que o erro de truncamento local $T_{n+1}(h)$ da fórmula estendida seja $O(h^7)$, devemos ter o sistema formado pelos fatores que multiplicam os termos de h^5 e h^6 igual a zero, o que nos fornece

$$\begin{aligned}
\gamma_{42} &= \frac{1}{173} (-18 + 964\gamma_{32} - 865\gamma_{43}), \\
\gamma_{52} &= \frac{1}{27} (-2412 + 482\gamma_{32} - 865\gamma_{43}), \\
\gamma_{53} &= \frac{1}{27} (964 + 173\gamma_{43}), \\
\gamma_{54} &= -\frac{173}{27},
\end{aligned}$$

e, então,

$$\begin{aligned}
T_{n+1}(h) &= h^7 \left[-\frac{863}{60480} Y_n^{(7)} + \frac{863}{8640} Y_n^{(6)} g_n + \frac{(3798 - 3287\gamma_{43})}{43200} Y_n^{(5)} g'_n \right. \\
&+ \frac{(-3798 + 3287\gamma_{43})}{43200} Y_n^{(5)} g_n^2 \\
&+ \frac{1}{8640} (-3906 + 2892\gamma_{32} + 692\gamma_{43} - 519\gamma_{32}\gamma_{43}) Y_n^{(4)} g_n g'_n
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{(-6207 + 3133\gamma_{32})}{2880} Y_n^{(4)} g_n'' \\
& + \frac{1}{8640} (18 - 692\gamma_{43} + 692\gamma_{32}\gamma_{43} - 173\gamma_{32}\gamma_{43}) Y_n^{(4)} g_n^3 \\
& + O(h^8),
\end{aligned} \tag{5.8}$$

onde, agora, γ_{32} e γ_{43} são os parâmetros livres.

Temos, assim, uma família de dois parâmetros de métodos estendidos de passo um de sexta ordem cujos coeficientes são apresentados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Coeficientes da família de métodos de sexta ordem.

$\frac{95}{288}$	$\frac{1427}{1440}$	$-\frac{133}{240}$	$\frac{241}{720}$	$-\frac{173}{1440}$	$\frac{3}{160}$	
5	-4	2	4			
$28 - 12\gamma_{32}$	$-27 + 12\gamma_{32}$	$12 - 5\gamma_{32}$	$18 - 8\gamma_{32}$	γ_{32}		
β_{40}	β_{41}	γ_{40}	γ_{41}	γ_{42}	γ_{43}	
β_{50}	β_{51}	γ_{50}	γ_{51}	γ_{52}	γ_{53}	γ_{54}

$$\begin{aligned}
\beta_{40} &= \frac{3}{173} (4743 - 3856\gamma_{32} + 1384\gamma_{43}), \\
\beta_{41} &= \frac{8}{173} (-1757 + 1446\gamma_{32} - 519\gamma_{43}), \\
\gamma_{40} &= \frac{1}{173} (6318 - 4820\gamma_{32} + 1557\gamma_{43}), \\
\gamma_{41} &= \frac{1}{173} (8448 - 7712\gamma_{32} + 3287\gamma_{43}), \\
\beta_{50} &= -\frac{8}{9} (-477 + 241\gamma_{32} - 173\gamma_{43}), \\
\beta_{51} &= \frac{1}{9} (-3807 + 1928\gamma_{32} - 1384\gamma_{43}), \\
\gamma_{50} &= \frac{1}{27} (4505 - 2410\gamma_{32} + 1557\gamma_{43}), \\
\gamma_{51} &= \frac{1}{27} (8672 - 3856\gamma_{32} + 3287\gamma_{43}).
\end{aligned}$$

5.3 Análise da Estabilidade

Aplicando o método estendido, agora com dois parâmetros livres, à equação teste,

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

temos

$$y_{n+1} = R(\mu)y_n = \frac{N}{D}y_n, \quad (5.9)$$

onde $\mu = h\lambda$ e

$$\begin{aligned} N = & 720 + 3600\mu - 12(-132 + 173\gamma_{43})\mu^2 + 6(46 + 173(-1 + \gamma_{32})\gamma_{43})\mu^3 \\ & - (-18 + 173\gamma_{43})\mu^4 - 173\gamma_{32}\gamma_{43}\mu^5, \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} D = & 720 + 2880\mu - 12(138 + 173\gamma_{43})\mu^2 + 6(62 + 173(1 + \gamma_{32})\gamma_{43})\mu^3 \\ & - (36 + 173(1 + 6\gamma_{32})\gamma_{43})\mu^4 + 346\gamma_{32}\gamma_{43}\mu^5. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Determinar as propriedades de estabilidade para esses métodos é um tanto quanto complicado, uma vez que estamos tratando de métodos com dois parâmetros. Sendo assim, vamos nos restringir a algumas observações.

Para $\gamma_{32} \neq 0$ e $\gamma_{43} \neq 0$ podem existir métodos A -estáveis, mas não há nenhum método L -estável, uma vez que

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = \frac{1}{2}. \quad (5.12)$$

Na tentativa de obtermos métodos L -estáveis, observemos que para $\gamma_{32} = 0$, a função de estabilidade toma a forma

$$R(\mu) = \frac{720 + 3600\mu - 12(-132 + 173\gamma_{43})\mu^2 + 6(46 - 173\gamma_{43})\mu^3 - (-18 + 173\gamma_{43})\mu^4}{720 + 2880\mu - 12(138 + 173\gamma_{43})\mu^2 + 6(62 + 173\gamma_{43})\mu^3 - (36 + 173\gamma_{43})\mu^4}. \quad (5.13)$$

e então, para anular o coeficiente de μ^4 , no numerador de $R(\mu)$, em (5.13), obtemos $\gamma_{43} = \frac{18}{173}$. Nesse caso a função de estabilidade torna-se

$$R(\mu) = \frac{720 + 3600\mu + 1368\mu^2 + 168\mu^3}{720 + 2880\mu - 1872\mu^2 + 480\mu^3 - 54\mu^4}. \quad (5.14)$$

Logo, o método obtido com esses valores para γ_{32} e γ_{43} é L -estável.

Para essa escolha, $\gamma_{32} = 0$ e $\gamma_{43} = \frac{18}{173}$, temos um método estendido de sexta ordem L -estável, que denotaremos por $ML_6(0, 18/173)$, cujos coeficientes são dados na seguinte tabela:

Tabela 5.2: Coeficientes do método L -estável $ML_6(0, 18/173)$.

$\frac{95}{288}$	$\frac{1427}{1440}$	$-\frac{133}{240}$	$\frac{241}{720}$	$-\frac{173}{1440}$	$\frac{3}{160}$	
5	-4	2	4			
28	-27	12	18	0		
$\frac{14661}{173}$	$-\frac{14488}{173}$	$\frac{6480}{173}$	$\frac{8790}{173}$	$-\frac{108}{173}$	$\frac{18}{173}$	
440	-439	$\frac{4667}{27}$	$\frac{9014}{27}$	$-\frac{2502}{27}$	$\frac{982}{27}$	$-\frac{173}{27}$

Ainda, para $\gamma_{32} = 0$, conseguimos métodos que são A -estáveis para $\gamma_{43} \geq -\frac{9}{173}$. Isso segue da expressão da função de estabilidade, dada por (5.13), e da condição

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| \leq 1.$$

Agora, no caso $\gamma_{43} = 0$, temos que a função de estabilidade é dada por

$$R(\mu) = \frac{120 + 600\mu + 264\mu^2 + 46\mu^3 + 3\mu^4}{120 + 480\mu - 276\mu^2 + 62\mu^3 - 6\mu^4} \quad (5.15)$$

e independe do valor de γ_{32} . Nesse caso, conseguimos

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = \frac{1}{2} \quad (\leq 1),$$

o que fornece $|R(\mu)| < 1$ produzindo, assim, métodos A -estáveis. Para a particular escolha $\gamma_{32} = 0$, temos um método estendido de passo um e ordem seis A -estável, que denotaremos $MA_6(0, 0)$, cujos coeficientes são apresentados na tabela que segue:

Tabela 5.3: Coeficientes do método A –estável $MA_6(0,0)$.

$\frac{95}{288}$	$\frac{1427}{1440}$	$-\frac{133}{240}$	$\frac{241}{720}$	$-\frac{173}{1440}$	$\frac{3}{160}$	
5	−4	2	4			
28	−27	12	18	0		
$\frac{14229}{173}$	$-\frac{14056}{173}$	$\frac{6318}{173}$	$\frac{8448}{173}$	$-\frac{18}{173}$	0	
424	−423	$\frac{4505}{27}$	$\frac{8672}{27}$	$-\frac{2412}{27}$	$\frac{964}{27}$	$-\frac{173}{27}$

Novamente, outros valores para os parâmetros livres poderiam ter sido tomados, mas os métodos obtidos já satisfazem nosso objetivo.

Capítulo 6

Resultados Numéricos

6.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos alguns resultados numéricos, dentre os vários problemas estudados, considerando a integração através de métodos estendidos de passo um pertencentes às famílias apresentadas nos capítulos anteriores.

Para isso, algoritmos para os particulares métodos A - e/ou L -estáveis das diferentes ordens apresentadas foram implementados e testados, considerando problemas testes encontrados na literatura, cuja solução exata é conhecida, para que, além de compararmos os métodos entre si, pudéssemos também analisar o erro absoluto.

Implementamos, também, o algoritmo para a Regra Trapezoidal, sugerido por Burden [1], para podermos compará-la com os métodos dessas famílias.

6.2 Problemas Testes

O conjunto de testes que passamos a descrever contém problemas de valor de inicial, sendo a maioria problemas *stiff*, de primeira ordem e suas respectivas



soluções exatas.

Problema 1

$$y' = \frac{1}{10}y^2, \quad y(0) = 1, \quad 0 \leq x \leq 8,$$

cuja solução exata é

$$y(x) = \frac{10}{10 - x}.$$

Problema 2

$$y' = -100y, \quad y(0) = 1, \quad 0 \leq x \leq 1,$$

cuja solução exata é

$$y(x) = \exp(-100x).$$

Problema 3

$$y' = \frac{y}{x} \ln(y), \quad y(0.5) = \exp(-1), \quad 0.5 \leq x \leq 3,$$

cuja solução exata é

$$y(x) = \exp(-2x).$$

Problema 4

$$y' = -20y + 20 \sin(x) + \cos(x), \quad y(0) = 1, \quad 0 \leq x \leq 2,$$

cuja solução exata é

$$y(x) = \sin(x) + \exp(-20x).$$

Problema 5

$$y' = -\frac{1}{RC}y, \quad y(2) = 1000, \quad 2 \leq x \leq 6,$$

cuja solução exata é

$$y(x) = 1000 \exp\left(-\frac{x-2}{RC}\right).$$

Esse problema é um modelo da mecânica respiratória, no intervalo de tempo correspondente ao da expiração, onde os parâmetros fisiológicos utilizados



foram $R=0.002$ (ml/cmH_2O) e $C=50$ ($cmH_2O/ml \cdot s$), como proposto em Roma [14].

Durante todo o trabalho, concentramo-nos no caso de uma equação diferencial escalar, contudo, os métodos descritos nos capítulos anteriores têm, obviamente, uma extensão semelhante para sistemas de equações. Então, apresentaremos também problemas que envolvem sistemas de equações diferenciais de primeira ordem.

Problema 6

$$y' = \begin{bmatrix} -10 & 6 \\ 13.5 & -10 \end{bmatrix} y, \quad y(0) = \begin{bmatrix} \frac{4}{3} \exp(1) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad 0 \leq x \leq 1,$$

cujas solução exata é

$$y(x) = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \exp(1)(\exp(-x) + \exp(-19x)) \\ \exp(1)(\exp(-x) - \exp(-19x)) \end{bmatrix}.$$

Problema 7

$$y' = \begin{bmatrix} -15.5 & 14.5 \\ 14.5 & -15.5 \end{bmatrix} y + \begin{bmatrix} -13.5 \\ 16.5 \end{bmatrix}, \quad y(0) = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad 0 \leq x \leq 4,$$

cujas solução exata é

$$y(x) = \begin{bmatrix} \exp(-x) + \exp(-30x) + 1 \\ \exp(-x) - \exp(-30x) + 2 \end{bmatrix}.$$

6.3 Os Resultados

Nesta seção, apresentaremos os resultados obtidos a partir do conjunto de testes definido na seção anterior.

Os resultados numéricos fornecidos pelos programas são colocados em tabelas, onde podemos observar a evolução do erro absoluto, em alguns pontos do intervalo de integração, para diferentes tamanhos do passo h . É importante registrar que em nossa avaliação consideramos a integração a passo fixo de tamanho h durante todo o intervalo de integração.

Para os casos envolvendo os sistemas de primeira ordem, apresentamos, nas tabelas, os erros absolutos envolvendo a primeira e a segunda componentes, respectivamente.

Entre os vários resultados obtidos, selecionamos alguns que, ao nosso ver, traduzem o desempenho computacional dos métodos avaliados.

Os métodos são representados nas tabelas por:

MA₃: método de terceira ordem A -estável dado por (2.11)-(2.12).

ML₃: método de terceira ordem L -estável dado por (2.31)-(2.32).

MA₄(2,0): método de quarta ordem A -estável dado por (3.24)-(3.26).

ML₄(0,1/2): método de quarta ordem L -estável dado por (3.28)-(3.30).

MA₅(0,0): método de quinta ordem A -estável cujos coeficientes são dados na Tabela 4.4.

ML₅(0,2/19): método de quinta ordem L -estável cujos coeficientes são dados na Tabela 4.3.

MA₆(0,0): método de sexta ordem A -estável cujos coeficientes são dados na Tabela 5.3.

ML₆(0,18/173): método de sexta ordem L -estável cujos coeficientes são dados na Tabela 5.2.



Tabela 6.1: Erro absoluto para o Problema 1

$h = 0.2$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2,0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
1.00	2.7E-05	1.2E-06	7.9E-07	4.7E-08	3.5E-08
2.00	7.8E-05	3.7E-06	2.4E-06	1.5E-07	1.1E-07
3.00	1.8E-04	9.0E-06	5.9E-06	4.1E-07	3.0E-07
4.00	3.7E-04	2.1E-05	1.4E-05	1.1E-06	7.7E-07
5.00	8.0E-04	5.1E-05	3.3E-05	3.0E-06	2.2E-06
6.00	1.9E-03	1.4E-04	9.2E-05	9.9E-06	7.2E-06
7.00	5.2E-03	5.0E-04	3.2E-04	4.5E-05	3.3E-05
8.00	2.0E-02	2.8E-03	1.8E-03	3.7E-04	2.7E-04

$h = 0.1$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2,0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
1.00	6.9E-06	1.5E-07	9.8E-08	2.9E-09	2.1E-09
2.00	2.0E-05	4.5E-07	3.0E-07	9.4E-09	6.8E-09
3.00	4.4E-05	1.1E-06	7.2E-07	2.5E-08	1.8E-08
4.00	9.3E-05	2.5E-06	1.7E-06	6.4E-08	4.6E-08
5.00	2.0E-04	6.2E-06	4.1E-06	1.8E-07	1.3E-07
6.00	4.7E-04	1.7E-05	1.1E-05	5.9E-07	4.3E-07
7.00	1.3E-03	5.9E-05	3.9E-05	2.6E-06	1.9E-06
8.00	5.0E-03	3.2E-04	2.1E-04	2.1E-05	1.5E-05

Tabela 6.2: Erro absoluto para o Problema 1

$h = 0.2$				
x_n	$MA_5(0,0)$	$ML_5(0, \frac{2}{19})$	$MA_6(0,0)$	$ML_6(0, \frac{18}{173})$
1.0	2.3E-09	2.5E-09	3.4E-10	3.5E-10
2.0	8.2E-09	8.7E-09	1.3E-09	1.3E-09
3.0	2.4E-08	2.5E-08	4.0E-09	4.1E-09
4.0	6.9E-08	7.4E-08	1.3E-08	1.4E-08
5.0	2.3E-07	2.4E-07	4.9E-08	5.1E-08
6.0	9.2E-07	9.9E-07	2.4E-07	2.5E-07
7.0	5.5E-06	5.9E-06	1.9E-06	1.9E-06
8.0	6.8E-05	7.5E-05	3.2E-05	3.4E-05

$h = 0.1$				
x_n	$MA_5(0,0)$	$ML_5(0, \frac{2}{19})$	$MA_6(0,0)$	$ML_6(0, \frac{18}{173})$
1.00	6.7E-11	7.3E-11	3.6E-12	5.5E-12
2.00	2.4E-10	2.5E-10	1.5E-11	1.8E-11
3.00	7.0E-10	7.4E-10	5.5E-11	6.0E-11
4.00	2.1E-09	2.2E-09	1.9E-10	2.0E-10
5.00	6.7E-09	7.1E-09	7.5E-10	7.8E-10
6.00	2.7E-08	2.9E-08	3.7E-09	3.8E-09
7.00	1.6E-07	1.7E-07	2.8E-08	2.9E-08
8.00	1.9E-06	2.0E-06	4.9E-07	5.1E-07

Tabela 6.3: Erro absoluto para o Problema 2

$h = 0.2$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2,0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
0.20	8.2E-01	4.3E-01	7.0E-02	5.5E-01	8.9E-03
0.40	6.7E-01	1.8E-01	4.9E-03	3.0E-01	7.9E-05
0.60	5.5E-01	7.7E-02	3.4E-04	1.7E-01	7.1E-07
0.80	4.5E-01	3.3E-02	2.4E-05	9.1E-02	6.3E-09
1.00	3.7E-01	1.4E-02	1.7E-06	5.0E-02	5.6E-11

$h = 0.1$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2,0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
0.20	4.4E-01	1.2E-01	9.2E-03	9.1E-02	4.0E-04
0.40	2.0E-01	1.6E-02	8.5E-05	8.4E-03	1.6E-07
0.60	8.8E-02	1.9E-03	7.8E-07	7.6E-04	6.8E-11
0.80	3.9E-02	2.4E-04	7.2E-09	7.0E-05	6.2E-12
1.00	1.7E-02	3.0E-05	1.2E-10	6.4E-06	3.5E-12

Tabela 6.4: Erro absoluto para o Problema 2

$h = 0.2$				
x_n	$MA_5(0,0)$	$ML_5(0, \frac{2}{19})$	$MA_6(0,0)$	$ML_6(0, \frac{18}{173})$
0.20	1.3E-01	6.3E-02	1.3E-01	6.5E-02
0.40	1.7E-02	4.0E-03	1.7E-02	4.3E-03
0.60	2.3E-03	2.5E-04	2.2E-03	2.8E-04
0.80	3.0E-04	1.6E-05	2.9E-04	1.8E-05
1.00	4.0E-05	9.9E-07	3.8E-05	1.2E-06

$h = 0.1$				
x_n	$MA_5(0,0)$	$ML_5(0, \frac{2}{19})$	$MA_6(0,0)$	$ML_6(0, \frac{18}{173})$
0.20	9.3E-04	2.7E-03	8.6E-04	2.9E-03
0.40	8.7E-07	7.2E-06	7.4E-07	8.4E-06
0.60	8.1E-10	1.9E-08	6.3E-10	2.4E-08
0.80	7.6E-13	5.1E-11	5.4E-13	7.0E-11
1.00	7.0E-16	1.4E-13	4.7E-16	2.0E-13

Tabela 6.5: Erro absoluto para o Problema 3

$h = 0.1$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2, 0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
1.00	6.2E-04	5.7E-05	4.2E-05	2.8E-06	9.8E-06
1.50	5.5E-04	5.0E-05	3.4E-05	2.1E-06	7.1E-06
2.00	3.4E-04	3.1E-05	2.0E-05	1.2E-06	3.9E-06
2.50	1.8E-04	1.7E-05	1.0E-05	5.8E-07	1.9E-06
3.00	8.8E-05	8.1E-06	4.9E-06	2.7E-07	8.7E-07

$h = 0.05$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2, 0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
1.00	1.6E-04	7.5E-06	5.8E-06	2.4E-07	8.1E-07
1.50	1.4E-04	6.5E-06	4.6E-06	1.8E-07	5.8E-07
2.00	8.5E-05	4.0E-06	2.7E-06	1.0E-07	3.1E-07
2.50	4.5E-05	2.2E-06	1.4E-06	4.9E-08	1.5E-07
3.00	2.2E-05	1.1E-06	6.6E-07	2.2E-08	6.9E-08

Tabela 6.6: Erro absoluto para o Problema 3

$h = 0.1$				
x_n	$MA_5(0, 0)$	$ML_5(0, \frac{2}{19})$	$MA_6(0, 0)$	$ML_6(0, \frac{18}{173})$
1.00	1.6E-06	1.6E-06	1.2E-06	1.3E-06
1.50	1.2E-06	1.2E-06	1.2E-06	1.2E-06
2.00	6.3E-07	6.4E-07	7.6E-07	8.0E-07
2.50	3.1E-07	3.1E-07	4.1E-07	4.3E-07
3.00	1.4E-07	1.4E-07	2.0E-07	2.1E-07

$h = 0.05$				
x_n	$MA_5(0, 0)$	$ML_5(0, \frac{2}{19})$	$MA_6(0, 0)$	$ML_6(0, \frac{18}{173})$
1.00	7.4E-08	7.4E-08	5.0E-09	4.5E-09
1.50	5.1E-08	5.2E-08	7.2E-10	3.4E-10
2.00	2.7E-08	2.8E-08	3.9E-10	6.1E-10
2.50	1.3E-08	1.3E-08	4.1E-10	5.2E-10
3.00	6.0E-09	6.0E-09	2.5E-10	3.1E-10

Tabela 6.7: Erro absoluto para o Problema 4

$h = 0.1$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2,0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
0.20	1.8E-02	1.2E-02	6.0E-03	2.1E-03	1.3E-03
0.40	3.7E-04	3.0E-04	1.6E-04	8.2E-05	3.8E-05
0.60	4.2E-05	6.9E-06	1.2E-05	4.0E-06	6.4E-06
0.80	3.1E-05	1.3E-06	1.4E-05	2.2E-06	6.7E-06
1.00	2.4E-05	1.4E-06	1.0E-05	2.4E-06	5.5E-06
1.20	1.7E-05	1.6E-06	6.3E-06	2.6E-06	4.1E-06
1.40	9.1E-06	1.7E-06	2.3E-06	2.8E-06	2.6E-06
1.60	8.7E-07	1.7E-06	1.9E-06	2.8E-06	9.2E-07
1.80	7.4E-06	1.7E-06	6.0E-06	2.7E-06	7.8E-07
2.00	1.5E-05	1.6E-06	9.9E-06	2.5E-06	2.5E-06

$h = 0.05$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2,0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
0.20	6.0E-03	2.0E-03	8.3E-04	1.1E-04	1.1E-04
0.40	1.9E-04	7.1E-05	2.7E-05	4.0E-06	3.2E-06
0.60	1.3E-05	2.0E-06	1.6E-06	2.1E-07	5.1E-07
0.80	7.7E-06	2.0E-07	2.0E-06	1.3E-07	5.4E-07
1.00	6.1E-06	1.9E-07	1.5E-06	1.5E-07	4.5E-07
1.20	4.3E-06	2.1E-07	9.5E-07	1.6E-07	3.4E-07
1.40	2.3E-06	2.3E-07	3.7E-07	1.7E-07	2.2E-07
1.60	2.2E-07	2.3E-07	2.2E-07	1.7E-07	8.4E-08
1.80	1.9E-06	2.3E-07	8.1E-07	1.7E-07	5.3E-08
2.00	3.9E-06	2.1E-07	1.4E-06	1.6E-07	1.9E-07

Tabela 6.8: Erro absoluto para o Problema 4

$h = 0.1$				
x_n	$MA_5(0,0)$	$ML_5(0,\frac{2}{19})$	$MA_6(0,0)$	$ML_6(0,\frac{18}{173})$
0.20	7.0E-05	2.8E-04	8.4E-05	3.1E-04
0.40	2.4E-06	1.0E-05	2.9E-06	1.2E-05
0.60	1.0E-07	3.1E-07	1.1E-07	3.5E-07
0.80	1.6E-07	8.3E-08	1.8E-07	9.2E-08
1.00	1.4E-07	1.3E-07	1.6E-07	1.4E-07
1.20	1.2E-07	1.7E-07	1.3E-07	1.9E-07
1.40	9.1E-08	2.1E-07	1.0E-07	2.3E-07
1.60	5.9E-08	2.4E-07	6.4E-08	2.6E-07
1.80	2.4E-08	2.6E-07	2.5E-08	2.9E-07
2.00	1.1E-08	2.7E-07	1.5E-08	3.0E-07

$h = 0.05$				
x_n	$MA_5(0,0)$	$ML_5(0,\frac{2}{19})$	$MA_6(0,0)$	$ML_6(0,\frac{18}{173})$
0.20	2.7E-06	9.0E-06	3.6E-06	1.1E-05
0.40	9.3E-08	3.3E-07	1.3E-07	4.2E-07
0.60	3.3E-09	9.5E-09	4.0E-09	1.2E-08
0.80	5.6E-09	2.6E-09	7.1E-09	3.2E-09
1.00	5.1E-09	4.1E-09	6.5E-09	5.2E-09
1.20	4.3E-09	5.7E-09	5.5E-09	7.2E-09
1.40	3.4E-09	7.1E-09	4.2E-09	9.0E-09
1.60	2.3E-09	8.2E-09	2.8E-09	1.0E-08
1.80	1.1E-09	9.0E-09	1.3E-09	1.1E-08
2.00	1.2E-10	9.4E-09	2.6E-10	1.2E-08

Tabela 6.9: Erro absoluto para o Problema 5

$h = 0.5$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2,0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
2.50	4.4E+02	2.3E+02	8.5E+01	9.8E+01	2.2E+01
3.00	1.8E+02	4.9E+01	6.1E+00	1.1E+01	1.9E-01
3.50	7.9E+01	1.1E+01	4.8E-01	1.1E+00	4.0E-03
4.00	3.4E+01	2.4E+00	3.8E-02	1.2E-01	5.5E-05
4.50	1.4E+01	5.3E-01	3.0E-03	1.2E-02	8.9E-07
5.00	6.2E+00	1.2E-01	2.3E-04	1.3E-03	1.3E-08
5.50	2.7E+00	2.6E-02	1.8E-05	1.4E-04	2.1E-10
6.00	1.1E+00	5.7E-03	1.4E-06	1.4E-05	3.2E-12

$h = 0.25$					
x_n	Trapézio	MA ₃	ML ₃	MA ₄ (2,0)	ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)
2.50	5.6E+00	6.7E+00	4.7E+00	2.8E+00	1.3E+00
3.00	1.1E-01	4.5E-02	4.1E-02	4.6E-02	1.6E-02
3.50	1.6E-03	3.1E-04	3.0E-04	5.7E-04	1.5E-04
4.00	2.1E-05	2.1E-06	2.0E-06	6.3E-06	1.2E-06
4.50	2.7E-07	1.4E-08	1.4E-08	6.6E-08	9.2E-09
5.00	3.4E-09	9.4E-11	9.6E-11	6.7E-10	6.8E-11
5.50	4.3E-11	6.3E-13	3.0E-12	6.6E-12	4.9E-13
6.00	5.4E-13	4.2E-15	2.6E-12	6.5E-14	3.5E-15

Tabela 6.10: Erro absoluto para o Problema 5

$h = 0.5$				
x_n	$MA_5(0,0)$	$ML_5(0, \frac{2}{19})$	$MA_6(0,0)$	$ML_6(0, \frac{18}{173})$
2.50	2.3E-01	1.9E+01	7.6E-01	2.0E+01
3.00	3.2E-03	6.0E-01	1.1E-02	6.5E-01
3.50	3.3E-05	1.6E-02	1.2E-04	1.8E-02
4.00	3.0E-07	4.2E-04	1.1E-06	4.9E-04
4.50	2.5E-09	1.1E-05	9.8E-09	1.3E-05
5.00	2.1E-11	2.7E-07	8.4E-11	3.4E-07
5.50	1.7E-13	6.9E-09	7.0E-13	9.1E-09
6.00	1.3E-15	1.7E-10	5.7E-15	2.4E-10

$h = 0.25$				
x_n	$MA_5(0,0)$	$ML_5(0, \frac{2}{19})$	$MA_6(0,0)$	$ML_6(0, \frac{18}{173})$
2.50	8.8E-02	4.0E-01	1.1E-01	4.4E-01
3.00	1.2E-03	5.6E-03	1.4E-03	6.2E-03
3.50	1.2E-05	5.8E-05	1.5E-05	6.4E-05
4.00	1.1E-07	5.4E-07	1.3E-07	6.0E-07
4.50	9.3E-10	4.7E-09	1.1E-09	5.2E-09
5.00	7.6E-12	3.9E-11	9.1E-12	4.4E-11
5.50	6.0E-14	3.2E-13	7.2E-14	3.5E-13
6.00	4.6E-16	2.5E-15	5.6E-16	2.8E-15

Tabela 6.11: Erro absoluto para o Problema 6

$h = 0.25$						
x_n	Trapézio		MA ₃		ML ₃	
0.25	7.6E-01	1.1E+00	3.9E-01	5.9E-01	1.5E-01	2.2E-01
0.50	3.0E-01	4.6E-01	7.8E-02	1.2E-01	9.6E-03	1.5E-02
0.75	1.3E-01	1.8E-01	1.7E-02	2.4E-02	8.5E-04	8.9E-04
1.00	4.6E-02	8.0E-02	3.0E-03	5.7E-03	8.3E-05	2.8E-04

$h = 0.1$						
x_n	Trapézio		MA ₃		ML ₃	
0.50	5.9E-04	4.8E-04	1.4E-04	1.5E-04	8.1E-05	1.0E-04
1.00	5.6E-04	8.3E-04	2.6E-05	4.0E-05	9.0E-06	1.4E-05

$h = 0.05$						
x_n	Trapézio		MA ₃		ML ₃	
0.25	5.4E-03	7.9E-03	1.8E-03	2.7E-03	7.3E-04	1.1E-03
0.50	1.9E-04	5.7E-05	3.2E-05	4.0E-05	1.3E-05	1.7E-05
0.75	1.3E-04	2.0E-04	3.6E-06	4.3E-06	1.3E-06	1.4E-06
1.00	1.4E-04	2.1E-04	3.4E-06	5.1E-06	1.1E-06	1.7E-06

Tabela 6.12: Erro absoluto para o Problema 6

 $h = 0.25$

x_n	MA ₄ (2, 0)		ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)		MA ₅ (0, 0)		ML ₅ (0, $\frac{2}{19}$)	
0.25	1.6E-01	2.4E-01	3.9E-02	5.8E-02	1.1E-03	1.7E-03	3.0E-02	4.5E-02
0.50	1.7E-02	2.5E-02	1.6E-04	2.5E-04	2.0E-05	3.0E-05	1.0E-03	1.5E-03
0.75	1.6E-03	2.4E-03	9.7E-06	3.5E-07	2.9E-07	3.6E-07	2.8E-05	4.2E-05
1.00	1.6E-04	2.3E-04	4.9E-06	7.4E-06	3.2E-08	3.8E-08	8.2E-07	9.7E-07

 $h = 0.1$

x_n	MA ₄ (2, 0)		ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)		MA ₅ (0, 0)		ML ₅ (0, $\frac{2}{19}$)	
0.50	3.1E-05	4.6E-05	1.8E-05	2.7E-05	9.7E-07	1.5E-06	3.8E-06	5.7E-06
1.00	9.8E-08	1.3E-07	1.4E-07	2.0E-07	4.5E-10	2.3E-10	1.5E-09	4.9E-10

 $h = 0.05$

x_n	MA ₄ (2, 0)		ML ₄ (0, $\frac{1}{2}$)		MA ₅ (0, 0)		ML ₅ (0, $\frac{2}{19}$)	
0.25	8.9E-05	1.3E-04	8.9E-05	1.3E-04	2.1E-06	3.2E-06	7.1E-06	1.1E-05
0.50	1.5E-06	2.3E-06	1.5E-06	2.3E-06	3.7E-08	5.6E-08	1.2E-07	1.8E-07
0.75	2.6E-08	2.2E-08	2.8E-08	1.8E-08	4.9E-10	7.1E-10	1.6E-09	2.3E-09
1.00	6.0E-09	8.3E-09	8.7E-09	1.2E-08	1.5E-11	6.0E-12	4.7E-11	1.5E-11



Tabela 6.13: Erro absoluto para o Problema 6

$h = 0.25$				
x_n	$MA_6(0,0)$		$ML_6(0, \frac{18}{173})$	
0.25	2.0E-03	3.0E-03	4.0E-02	4.0E-02
0.50	3.7E-05	5.4E-05	1.6E-03	1.6E-03
0.75	7.4E-07	3.9E-07	6.7E-05	6.6E-05
1.00	2.6E-07	3.7E-07	3.0E-06	2.3E-06

$h = 0.1$				
x_n	$MA_6(0,0)$		$ML_6(0, \frac{18}{173})$	
0.50	1.2E-06	1.8E-06	4.3E-06	6.5E-06
1.00	8.2E-11	6.6E-10	1.2E-10	2.1E-09

$h = 0.05$				
x_n	$MA_6(0,0)$		$ML_6(0, \frac{18}{173})$	
0.25	2.9E-06	4.4E-06	9.2E-06	1.4E-05
0.50	5.1E-08	7.6E-08	1.6E-07	2.4E-07
0.75	6.6E-10	9.9E-10	2.1E-09	3.1E-09
1.00	4.0E-12	1.6E-11	2.6E-11	5.8E-11

Tabela 6.14: Erro absoluto para o Problema 7

$h = 0.25$						
x_n	Trapézio		MA ₃		ML ₃	
1.00	1.1E-01	1.1E-01	8.7E-03	9.1E-03	1.6E-05	1.7E-04
2.00	1.1E-02	1.4E-02	7.6E-05	2.4E-04	5.5E-05	5.5E-05
3.00	6.4E-04	2.2E-03	8.5E-05	8.7E-05	3.0E-05	3.0E-05
4.00	2.2E-04	5.4E-04	4.2E-05	4.2E-05	1.5E-05	1.5E-05

$h = 0.1$						
x_n	Trapézio		MA ₃		ML ₃	
1.00	3.1E-04	3.1E-04	1.5E-05	1.5E-05	5.0E-06	5.0E-06
2.00	2.3E-04	2.3E-04	1.1E-05	1.1E-05	3.7E-06	3.7E-06
3.00	1.2E-04	1.2E-04	5.9E-06	5.9E-06	2.0E-06	2.0E-06
4.00	6.1E-05	6.1E-05	2.9E-06	2.9E-06	9.9E-07	9.9E-07

$h = 0.05$						
x_n	Trapézio		MA ₃		ML ₃	
1.00	7.7E-05	7.7E-05	1.9E-06	1.9E-06	6.3E-07	6.3E-07
2.00	5.6E-05	5.6E-05	1.4E-06	1.4E-06	4.6E-07	4.6E-07
3.00	3.1E-05	3.1E-05	7.6E-07	7.6E-07	2.6E-07	2.6E-07
4.00	1.5E-05	1.5E-05	3.7E-07	3.7E-07	1.3E-07	1.3E-07

Tabela 6.15: Erro absoluto para o Problema 7

$h = 0.25$								
x_n	$MA_4(2,0)$		$ML_4(0,\frac{1}{2})$		$MA_5(0,0)$		$ML_5(0,\frac{2}{19})$	
1.00	1.8E-03	1.8E-03	2.4E-06	3.0E-06	2.4E-08	7.1E-09	2.3E-06	2.2E-06
2.00	4.6E-06	1.7E-06	2.0E-06	2.0E-06	1.2E-08	1.2E-08	3.5E-08	3.5E-08
3.00	8.2E-07	8.1E-07	1.1E-06	1.1E-06	6.4E-09	6.4E-09	1.9E-08	1.9E-08
4.00	4.0E-07	4.0E-07	5.4E-07	5.4E-07	3.1E-09	3.1E-09	9.6E-09	9.5E-09

$h = 0.1$								
x_n	$MA_4(2,0)$		$ML_4(0,\frac{1}{2})$		$MA_5(0,0)$		$ML_5(0,\frac{2}{19})$	
1.00	5.1E-08	5.1E-08	7.4E-08	7.4E-08	1.7E-10	1.7E-10	5.0E-10	5.0E-10
2.00	3.8E-08	3.8E-08	5.4E-08	5.4E-08	1.2E-10	1.2E-10	3.7E-10	3.7E-10
3.00	2.1E-08	2.1E-08	3.0E-08	3.0E-08	6.8E-11	6.7E-11	2.0E-10	2.1E-10
4.00	1.0E-08	1.0E-08	1.5E-08	1.5E-08	3.3E-11	3.3E-11	1.0E-10	1.0E-10

$h = 0.05$								
x_n	$MA_4(2,0)$		$ML_4(0,\frac{1}{2})$		$MA_5(0,0)$		$ML_5(0,\frac{2}{19})$	
1.00	3.2E-09	3.2E-09	4.7E-09	4.7E-09	5.3E-12	5.3E-12	1.6E-11	1.6E-11
2.00	2.3E-09	2.3E-09	3.5E-09	3.5E-09	3.8E-12	4.0E-12	1.2E-11	1.1E-11
3.00	1.3E-09	1.3E-09	1.9E-09	1.9E-09	2.1E-12	2.2E-12	6.4E-12	6.0E-12
4.00	6.4E-10	6.4E-10	9.4E-10	9.3E-10	1.1E-12	1.1E-12	3.1E-12	2.9E-12



Tabela 6.16: Erro absoluto para o Problema 7

$h = 0.25$				
x_n	$MA_6(0,0)$		$ML_6(0, \frac{18}{173})$	
1.00	1.4E-07	1.3E-07	3.0E-06	2.3E-06
2.00	1.0E-07	1.0E-07	2.7E-07	2.7E-07
3.00	5.6E-08	5.6E-08	1.5E-07	1.5E-07
4.00	2.8E-08	2.8E-08	7.3E-08	7.3E-08
$h = 0.1$				
x_n	$MA_6(0,0)$		$ML_6(0, \frac{18}{173})$	
1.00	1.5E-10	1.4E-10	4.2E-10	4.2E-10
2.00	1.1E-10	1.1E-10	3.2E-10	3.2E-10
3.00	5.9E-11	5.9E-11	1.8E-10	1.7E-10
4.00	2.8E-11	2.8E-11	8.0E-11	8.0E-11
$h = 0.05$				
x_n	$MA_6(0,0)$		$ML_6(0, \frac{18}{173})$	
1.00	1.4E-12	1.9E-12	9.3E-12	2.4E-12
2.00	2.0E-12	5.5E-13	3.3E-11	2.6E-11
3.00	1.2E-12	6.5E-13	1.7E-11	4.4E-12
4.00	6.1E-13	4.1E-13	8.2E-12	2.2E-13

6.4 Considerações Finais

Comparando os resultados apresentados nas tabelas da seção anterior, podemos constatar que, no Problema 1, uma equação diferencial não *stiff* é resolvida e o desempenho reflete as relativas ordens de convergência, tendo, de um modo geral, os métodos de ordem maior um desempenho melhor que os de menor ordem. No entanto, para o Problema 2, podemos observar a importância de usar um método *L*–estável para resolver problemas *stiff*, apresentando, estes, um desempenho superior aos métodos *A*–estáveis. Já para os Problemas 3, 4 e 5, que são todos equações diferenciais *stiff*, e para os Problemas 6 e 7, que são sistemas *stiff*, o desempenho relativo de todos os métodos estudados está entre os extremos obtidos para os Problemas 1 e 2.

Ressaltemos, em particular, os Problemas 2 e 5, onde podemos observar que a ordem de convergência dos métodos não é mantida, chegando a parecer absurdo o ganho de precisão observado nas Tabelas 6.3, 6.4, 6.9 e 6.10. Acreditamos que esse comportamento diferente se deve ao fato de que estamos trabalhando com problemas do tipo *stiff*. Não foi feita uma análise mais detalhada sobre esse fenômeno, pois tivemos como interesse maior nesse trabalho apenas observar o desempenho dos métodos.



Capítulo 7

Conclusão

Nos capítulos anteriores desta dissertação, procuramos introduzir uma classe de métodos estendidos, tendo como objetivo principal, contornar a barreira da ordem imposta pela A -estabilidade sobre métodos lineares de passo múltiplo, apresentando particulares métodos de ordens $p = 3, 4, 5$ e 6 que são A - e/ou L -estáveis.

Conforme pode ser constatado através dos resultados no capítulo 2, construimos um método estendido de passo um de terceira ordem A -estável pelo acoplamento de dois métodos lineares de passo múltiplo, o qual foi denominado por Usmani e Agarwal [15] de Regra Trapezoidal Estendida.

Através de uma análise da ordem de convergência da forma geral dos métodos de ordem 3, mostramos que o erro de truncamento local da fórmula secundária não necessitava ser $\tau_{n+1}(h) = O(h^4)$, bastava ser da ordem de h^3 . Assim, encontramos uma família de um parâmetro de métodos estendidos de terceira ordem, e um valor para esse parâmetro livre é escolhido para obtermos um particular método L -estável.

Em certos aspectos, a equação principal da forma geral desses métodos de terceira ordem possui uma certa semelhança com a fórmula de diferenciação retroativa estendida proposta por Cash [3], apresentando-se esta como uma outra linha de pesquisa nesse seguimento de métodos que necessitam buscar informações

nos pontos imediatamente posteriores ao ponto de integração, sendo os detalhes computacionais um tanto quanto diferentes.

Na tentativa de obter métodos de passo um e quarta ordem Kondrat e Jacques [10] apresentam métodos de passo dois, alegando que métodos de passo um não podem ser obtidos, uma vez que há um número insuficiente de parâmetros para possibilitar que os coeficientes apropriados, na expansão de Taylor, sejam eliminados. No entanto, no capítulo 3, conseguimos uma família de dois parâmetros de métodos de quarta ordem, onde trabalhamos com os erros de truncamento das fórmulas secundárias $\tau_{n+1,2}(h), \tau_{n+1,3}(h) = O(h^3)$, e apresentamos subfamílias de métodos *A*- e *L*-estáveis.

Estendendo as idéias dos capítulos 2 e 3, introduzimos, no capítulo 4, uma generalização dessa classe de métodos estendidos de passo um, onde, impondo que os erros de truncamento fossem $t_{n+1}(h) = O(h^{p+1})$, $\tau_{n+1,j}(h) = O(h^{p-1})$ e $T_{n+1}(h) = O(h^{p+1})$, concluímos que a ordem máxima atingida por métodos dessa classe é $p = 5$, e fornecemos subfamílias desses métodos de quinta ordem *A*- e *L*-estáveis.

No capítulo 5, construímos, a partir da generalização apresentada no capítulo 4, uma família de dois parâmetros de métodos estendidos de passo um de sexta ordem, desconsiderando a imposição sobre os erros de truncamento local e trabalhando com $t_{n+1}(h) = O(h^7)$, $\tau_{n+1,j}(h) = O(h^4)$ e $T_{n+1}(h) = O(h^7)$, das quais derivamos subfamílias de métodos *A*- e *L*-estáveis.

Possivelmente, seguindo esta linha de análise poderíamos obter métodos de ordem $p > 6$, mas, para o propósito de nosso trabalho, terminamos a análise nessa ordem.

Em Van Daele *et al.* [16], a classe de métodos estendidos de passo um é reescrita na forma geral de um método de Runge-Kutta implícito de p estágios e métodos *A*- e *L*-estáveis de ordens p , para $2 \leq p \leq 7$, são obtidos.

Finalmente, os resultados do capítulo 6 fornecem-nos uma avaliação qualitativa de todos os métodos da classe dos métodos estendidos de passo um analisa-



dos, comparando-os entre si e com a Regra Trapezoidal, com o objetivo de apenas ilustrar o desempenho dessa classe frente a problemas *stiff* e não *stiff*, e não com o intuito de tirarmos conclusões que possam ser consideradas como padrões de comportamento desses métodos em relação a outras classes.

Sobre os aspectos computacionais para os métodos propostos, observamos que, se usarmos o processo iterativo

$$y_{n+1}^{[m+1]} = y_n + h \left[\alpha_0 f_n + \alpha_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[m]}) + \sum_{j=2}^{p-1} \alpha_j f(x_{n+j}, \hat{y}_{n+j}^{[m]}) \right]$$

$$\hat{y}_{n+j}^{[m]} = \beta_{j0} y_n + \beta_{j1} y_{n+1}^{[m]} + h \left[\gamma_{j0} f_n + \gamma_{j1} f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[m]}) + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk} f(x_{n+k}, y_{n+k}^{[m]}) \right],$$

o limitante sobre h , na prática, restringe muito a aplicação dos métodos em equações *stiff* com constante de Lipschitz grande. Sob essas circunstâncias, usamos em nosso algoritmo o método de Newton, como sugerido em Liniger e Willoughby [13].

A experiência adquirida no desenvolvimento deste trabalho nos permite considerar essa classe de métodos estendidos como uma opção competitiva para integração de problemas de valor inicial do tipo *stiff*.

Na implementação por nós realizada, trabalhamos os métodos com o tamanho do passo h fixado. Uma outra linha de pesquisa seria trabalhar com um algoritmo numérico para a integração a passo variável. As primeiras investigações desses métodos estendidos na integração a passo variável são encontradas em Van Hecke *et al.* [17].

Referências Bibliográficas

- [1] BURDEN, R.L., FAIRES J.D. *Numerical Analysis*. PWS Publishing Company, Boston, 1993.
- [2] BUTCHER, J.C. *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*. John Wiley & Sons, Chichester, 1987.
- [3] CASH, J.R. On the Integration of Stiff Systems of O.D.E.s using Extended Backward Differentiation Formulae. *Numer. Math.*, v.34, p.235-246, 1980.
- [4] CHAWLA, M.M., AL-ZANAIDI, M.A., AL-SAHHAR, M.S. Stabilized Fourth Order Extended Methods for the Numerical Solution of ODEs. *Intern. J. Computer Math.*, v.52, p.99-107, 1994.
- [5] CHAWLA, M.M., AL-ZANAIDI, M.A., AL-SAHHAR, M.S. A Class of Stabilized Extended One-Step Methods for the Numerical Solution of ODEs. *Computers Math. Applic.*, v.29, n.10, p.79-84, 1995.
- [6] GEAR, C.W. *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1971.
- [7] HAIRER, E., WANNER, G. *Solving Ordinary Differential Equations II - Stiff and Differential-Algebraic Problems*. Springer-Verlag, 1991.
- [8] HENRICI, P. *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*. John Wiley and Sons, 1962.



- [9] JACQUES, I.B. Extended One-Step Methods for the Numerical Solution of Ordinary Differential Equations. *Intern. J. Computer Math.*, v.29, p.247-255, 1989.
- [10] KONDRAT, D.M., JACQUES, I.B. Extended A-stable Two-Step Methods for the Numerical Solution of Ordinary Differential Equations. *Intern. J. Computer Math.*, v.42, p.117-124, 1992.
- [11] LAMBERT, J.D. *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*, John Wiley & Sons, London, 1973.
- [12] LAMBERT, J.D. *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem*. John Wiley & Sons, Chichester, 1991.
- [13] LINIGER, W., WILLOUGHBY, R.A. Efficient Integration Methods for Stiff Systems of Ordinary Differential Equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, v.7, n.1, p.47-66, 1970.
- [14] ROMA, A.M., BEVILACQUA, J.S. Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias com Condições Iniciais: Uma Introdução Ilustrada com Modelos em Bio-Medicina. XX CNMAC, Gramado-RS, 1997.
- [15] USMANI, R.A., AGARWAL, R.P. An A-stable Extended Trapezoidal Rule for the Integration of Ordinary Differential Equations. *Computers Math. Applic.*, v.11, n.12, p.1183-1191, 1985.
- [16] VAN DAELE, M., VANDEN BERGHE, G., DE MEYER, H. A General Theory of Stabilized Extended One-Step Methods for ODEs. *Intern. J. Computer Math.*, v.60, p.253-263, 1996.
- [17] VAN HECKE, T., VANDEN BERGHE, G., VAN DAELE M., DE MEYER, H. A Variable-Step Variable-Order Algorithm for Systems of Stiff ODEs. *Intern. J. Computer Math.*, v.63, p.149-157, 1997.
- [18] VERISSIMO, F.A., SILVA, H.H.M. Uma Classe de Métodos Estendidos de Passo Um para Solução Numérica de Problemas de Valor Inicial do Tipo *Stiff*.



Resumos do III Colóquio de Pós-Graduação e Pesquisa em Matemática Aplicada e Computacional e I ERMAC, São José do Rio Preto-SP, 1998.



