

Patricia Correia de Souza

**Construção de uma Classe de Métodos
Estendidos de Passo Um para
Problemas de Valor Inicial**





**Construção de Uma Classe de Métodos
Estendidos de Passo Um para
Problemas de Valor Inicial**

Patricia Correia de Souza

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática
Aplicada, MAP-054



Patricia Correia de Souza

Construção de Uma Classe de Métodos
Estendidos de Passo Um para
Problemas de Valor
Inicial

**Construção de Uma Classe de Métodos
Estendidos de Passo Um para
Problemas de Valor Inicial**

Patricia Correia de Souza

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática
Aplicada, MAP-054

1910000967



Patricia Correia de Souza

Construção de Uma Classe de Métodos Estendidos de Passo Um para Problemas de Valor Inicial

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, São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.



T 967/01

Orientador: Profa. Dra. Heloisa H. Marino Silva

São José do Rio Preto

2000



Resumo

Nesta dissertação, apresentaremos uma classe de métodos estendidos de passo um, voltados para a resolução de problemas de valor inicial do tipo *stiff*. Através do correspondente método de Runge - Kutta, investigaremos a existência de métodos A- e L - estáveis na forma geral dos métodos estendidos de passo um de ordem mais alta possível. Particulares métodos L - estáveis serão utilizados em um algoritmo com passo e ordem variáveis.

Abstract

In the thesis herein, we will present a class of extended one-step methods, applied to the resolution of stiff type initial-value problems. Through the corresponding Runge-Kutta method, we will examine the existence of A- and L - stable methods in the general form of the extended one-step methods of the highest possible order. Particular L - stable methods will be used in a variable step and order algorithm.

Eu quero poder dizer com palavras o que sinto agora. Eu
quero poder dizer para todos que o Senhor, o meu amigo
meus suspiros, minha história de amor.

É quando ouço a sua voz, me chamando pelo nome. Eu sinto
uma verdade, uma vontade de viver.

É eu te chamo Jesus, venha viver junto a mim. Venha me
dar esta vontade, esta alegria de viver.

Eu queria poder dizer com palavras o que sinto agora. Eu queria poder dizer para todos que o Senhor, é meu amigo mais querido, minha história de amor.

E quando ouço a sua voz, me chamando pelo nome. Eu sinto uma saudade, uma vontade de viver.

E eu te chamo Jesus, venha viver junto a mim. Venha me dar esta vontade, essa alegria de viver.

Agradecimentos

Primeiramente a Deus, que representa papel fundamental em minha vida.

A minha família, base sólida que me apoio sempre que é preciso. Em especial ao meu pai, à tia Lei e ao tio Chico.

Ao meu amigo Marcelo e à minha futura sogra D. Cleide, por estarem sempre ao meu lado me ajudando e incentivando.

A professora Tereza, pela orientação e realização deste trabalho.

Aos professores Sebastião, Raulo e Borges que me auxiliaram durante o passado.

A todos os colegas de pós graduação que estiveram comigo ao decorrer deste curso, pela amizade e ajuda prestada.

A todos os professores e funcionários que de alguma forma colaboraram para a realização deste trabalho.

A CAPES, pelo auxílio financeiro.

A meus pais e irmãos,
ao meu noivo,
com todo carinho,
dedico.

Agradecimentos

Primeiramente a Deus, que representa papel fundamental em minha vida.

À minha família, base sólida que me apóio sempre que é preciso. Em especial ao meu pai, à tia Lei e ao tio Cido.

Ao meu noivo Marcel e à minha futura sogra D. Cleufe, por estarem sempre ao meu lado me ajudando e incentivando.

À professora Heloisa, pela orientação e realização deste trabalho.

Aos professores Sebastião, Ranga e Borges que me auxiliaram durante o mestrado.

A todos os colegas da pós graduação que estiveram comigo no decorrer deste curso, pela amizade e ajuda prestada.

A todos os professores e funcionários que de alguma forma colaboraram para a realização deste trabalho.

À CAPES, pelo auxílio financeiro.



Índice

Introdução	1
1 Preliminares	4
1.1 Notação	4
1.2 Sistemas de Equações Diferenciais	5
1.2.1 Existência e Unicidade da Solução	6
1.3 Métodos Numéricos	6
1.3.1 Métodos de Runge - Kutta	9
1.4 Estabilidade	14
1.5 Aproximações Racionais para a Exponencial	17
1.6 <i>Order Star</i>	20
1.6.1 Definições	20
1.6.2 Implementação da Técnica <i>Scanning</i>	22
2 Construção dos Métodos Estendidos de Passo Um	24
2.1 Forma Geral dos Métodos Estendidos de Passo Um	24
2.1.1 Construção dos Métodos Estendidos	26

2.2	Método Estendido de Passo Um de Ordem Dois	27
2.2.1	Análise da Estabilidade	28
2.2.2	Cálculo da Ordem de Estágio	28
2.3	Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Três.....	29
2.3.1	Análise da Estabilidade	31
2.3.2	Cálculo da Ordem de Estágio	32
3	Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Quatro	33
3.1	Uma Família de Métodos.....	33
3.2	Análise da Estabilidade	36
3.3	Cálculo da Ordem de Estágio	38
4	Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Cinco	41
4.1	Primeira Classe	41
4.1.1	Análise da Estabilidade	45
4.1.2	Cálculo da Ordem de Estágio	48
4.2	Segunda Classe.....	50
4.2.1	Análise da Estabilidade	52
5	Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Seis.....	55
5.1	Uma Família de Métodos.....	55
5.2	Análise da Estabilidade	61
5.3	Cálculo da Ordem de Estágio	65
6	Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Sete	67
6.1	Obtenção do Método	67
6.2	Análise da Estabilidade	74

6.3	Cálculo da Ordem de Estágio	77
7	Sistemas <i>Stiff</i>: Um Algoritmo com Passo e Ordem Variáveis ..	80
7.1	Preliminares.....	80
7.2	Método de Newton para Sistemas	82
7.3	Algoritmo e Implementação	83
7.4	Problemas Testes.....	87
7.4.1	Problema Químico Akzo Nobel.....	87
7.4.2	Problema HIRES	89
7.4.3	Problema da Poluição	91
7.5	Resultados Numéricos	94
	Conclusão.....	96
	Apêndice A Equações Extensas.....	98
	Referências Bibliográficas	104

Introdução

Duas classes principais de métodos numéricos voltados para a resolução do problema de valor inicial

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m, \quad (1.1)$$

são a classe dos métodos lineares de passo múltiplo e a classe dos métodos de Runge - Kutta. Muitos códigos eficientes que utilizam métodos destas duas classes existem para a resolução do problema (1.1). Entretanto, certos problemas exibem um fenômeno que é conhecido como *stiff*. A dificuldade na solução numérica destes problemas está na obtenção de 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, os métodos implícitos são reconhecidamente mais apropriados pois possuem propriedades de estabilidade superiores aos explícitos. A classe mais indicada para a resolução de problemas *stiff* é a classe dos métodos que possuem a propriedade da **A-estabilidade**.

É fácil encontrar métodos de Runge - Kutta **A-estáveis** com ordem alta, mas em contrapartida possuem um custo computacional elevado. Este fato tem levado à procura de classes especiais de fórmulas de Runge - Kutta implícitas que mantenham ordem alta, boa estabilidade e tenham um esforço computacional relativamente baixo.

Na classe dos métodos lineares de passo múltiplo, os métodos de diferenciação regressiva (*backward differentiation formulae*), também conhecidos como métodos BDF, foram os primeiros a serem propostos para a obtenção da solução de problemas *stiff* e são os mais utilizados nos principais códigos destinados à resolução destes problemas. Mas, é conhecido, pela segunda barreira de Dahlquist [6], que a ordem máxima de um método

linear de passo múltiplo **A-estável** não pode exceder dois. Desta forma, esta classe de métodos não fornece, particularmente, bons representantes para a resolução de certas classes importantes de problemas.

Para contornar a barreira da ordem, imposta pela **A-estabilidade** sobre métodos lineares de passo múltiplo, muitos autores têm proposto novas classes de métodos denominados métodos estendidos de passo um.

Através do acoplamento de dois métodos lineares de passo múltiplo, Usmani e Agarwal [18] construíram uma nova classe de métodos estendidos de passo um obtendo um novo método de passo um de terceira ordem **A-estável** que foi denominado Regra Trapezoidal Estendida. Esta classe foi estudada posteriormente por Jacques [10] que obteve um método de terceira ordem, **L - estável**. Uma generalização destes métodos foi dada por Chawla *et al* [4], [5] que conseguiram construir famílias de métodos com ordem quatro e cinco **A- e/ou L - estáveis**. A partir da generalização dada em [5], Veríssimo e Silva [24] construíram uma família de métodos de ordem seis, **A- e L - estáveis**. Entretanto, a obtenção de métodos com ordem mais alta é bastante difícil devido a complexidade dos cálculos envolvidos.

Uma técnica de derivação alternativa para a construção destes métodos foi dada em Van Daele *et al* [20], que propuseram reescrever os métodos estendidos de passo um usando a formulação geral de uma fórmula implícita de Runge - Kutta de s estágios e conseguiram obter métodos de ordem p , $2 \leq p \leq 7$ **A- e/ou L - estáveis**. Um algoritmo numérico para a integração a passo e ordem variáveis, utilizando esses métodos, é proposto em Van Hecke *et al* [23] e testes numéricos preliminares mostram que o código desenvolvido é adequado para a resolução de sistemas *stiff*, e competitivo com o conhecido código VODE [1], em termos do custo computacional, quando precisão não muito elevada é desejada.

O objetivo principal deste trabalho é investigar a existência de métodos **A- e L-estáveis** na forma geral dos métodos estendidos de passo um de ordem mais alta possível, (métodos com ordem mais alta possível são chamados métodos ótimos), por meio do correspondente método de Runge - Kutta. Restabeleceremos e estenderemos os resultados alcançados até então por Jacques [10] ($p = 3$), Chawla *et al.* [4] ($p = 4$) e Chawla *et al.* [5] ($p = 5$) e além disso apresentaremos novos resultados para $p = 6$ e $p = 7$.



Este trabalho está organizado em capítulos, sendo que no capítulo 1, apresentamos conceitos e resultados importantes para o desenvolvimento dos capítulos seguintes.

No capítulo 2, iniciamos a construção dos métodos estendidos de passo um a partir da aproximação de Runge - Kutta. Primeiro, fornecemos a forma geral destes métodos e em seguida, obtemos famílias de métodos de ordem dois e três e fazemos as respectivas análises de estabilidade e cálculos da ordem de estágio.

Desenvolvemos, no capítulo 3, os métodos estendidos de passo um de ordem quatro da mesma forma que fizemos para os de ordem dois e três.

Já no capítulo 4, resolvendo o sistema constituído pelas condições de ordem encontramos duas soluções diferentes para os métodos de ordem cinco, das quais uma possui ordem de estágio igual a 2, enquanto a outra possui ordem de estágio 3.

Nos capítulos 5 e 6, apresentamos os métodos estendidos de passo um de ordem seis e sete, respectivamente. Nesses casos, passamos a considerar somente a ordem de estágio igual a 3. Para os de ordem sete apresentamos apenas uma única solução, isto é, não uma família de métodos como nos casos anteriores.

No capítulo 7, descrevemos um algoritmo com passo e ordem variáveis para a resolução de sistemas de equações diferenciais ordinárias do tipo *stiff*, fornecemos alguns detalhes sobre a implementação do mesmo, apresentamos os problemas testes aos quais submetemos o algoritmo e os resultados numéricos.

Por fim, exibimos nossa conclusão final sobre este trabalho.



1.2 Sistemas de Equações Diferenciais

Equações diferenciais são aquelas que contêm derivadas de funções. Por exemplo, as equações

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + y^2 = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{dy}{dx} = y + y^2, \quad y(0) = 1 \quad (1.2)$$

qual são denominadas equações diferenciais ordinárias. A ordem de uma equação diferencial é a ordem da derivada da função incógnita $y(x)$, que aparece na equação. Logo, as equações (1.1) e (1.2) são de quarta e primeira ordem, respectivamente.

Este capítulo é composto por conceitos fundamentais, necessários durante o desenvolvimento deste trabalho.

1.1 Notação

Como estamos empenhados na determinação da aproximação para a solução de um sistema de equações diferenciais, estaremos regularmente usando vetores. Para ficar claro que estamos trabalhando com vetor ou escalar, representamos o vetor em negrito $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$.

Estamos acostumados com os elementos do vetor $\mathbf{y}$ denotados por $y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$, mas mudando a notação usaremos $\mathbf{y} = ({}^1y, {}^2y, \dots, {}^my)$ com o objetivo de deixar y_i indicando a aproximação da solução no ponto x_i .

Consideraremos como medida entre dois pontos no espaço de dimensão m à norma do máximo, definida por

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\| = \max_{1 \leq i \leq m} |{}^i u - {}^i v|.$$

1.2 Sistemas de Equações Diferenciais

Equações diferenciais são aquelas que contêm derivadas de funções. Por exemplo, as equações

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + y(x) = 0 \quad (1.1)$$

e

$$\left(\frac{d^4 y(x)}{dx^4}\right)^2 + y(x) \frac{dy(x)}{dx} = 3 \quad (1.2)$$

que são denominadas equações diferenciais ordinárias. A ordem de uma equação diferencial é a ordem da mais alta derivada da função incógnita, $y(x)$, que aparece na equação. Logo, (1.1) é de segunda ordem e (1.2) de quarta ordem.

É de nosso interesse, resolvermos numericamente, sistemas de equações diferenciais de primeira ordem da forma

$$\begin{aligned} {}^1y' &= {}^1f(x, {}^1y, {}^2y, \dots, {}^my) \\ {}^2y' &= {}^2f(x, {}^1y, {}^2y, \dots, {}^my) \\ &\vdots \\ {}^my' &= {}^mf(x, {}^1y, {}^2y, \dots, {}^my), \end{aligned} \quad (1.3)$$

onde ${}^iy' = \frac{d({}^iy(x))}{dx}$.

Por praticidade, abreviaremos a frase *sistema de primeira ordem* por *sistema*.

O sistema (1.3) pode ser escrito na forma vetorial

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \quad (1.4)$$

sendo

$$\mathbf{y} = [{}^1y(x), {}^2y(x), \dots, {}^my(x)]^T$$

e

$$\mathbf{f} = [{}^1f(x, \mathbf{y}), {}^2f(x, \mathbf{y}), \dots, {}^mf(x, \mathbf{y})]^T,$$

com $\mathbf{f} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$.

A solução de (1.3) é um conjunto de m funções

$${}^1y(x), {}^2y(x), \dots, {}^my(x),$$

tais que $\frac{d({}^jy(x))}{dx} = {}^jf(x, {}^1y, {}^2y, \dots, {}^my)$, para $j = 1, 2, \dots, m$.

O sistema (1.3), juntamente com m condições num ponto, constitui o que denominamos de um **problema de valor inicial** e escrevemos

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(a) = \mathbf{c}, \quad \mathbf{f} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m, \quad (1.5)$$

sendo que $\mathbf{c} = [{}^1c, {}^2c, \dots, {}^mc]^T$ são as condições iniciais.

Também abreviaremos a nomenclatura e daqui em diante faremos referência a (1.5) como p.v.i..

1.2.1 Existência e Unicidade da Solução

O seguinte teorema fornece condições sobre $\mathbf{f}(x, \mathbf{y})$, suficientes para garantir a existência e a unicidade da solução de um p.v.i..

Teorema 1.2.1 *Seja $\mathbf{f}(x, \mathbf{y})$, $\mathbf{f} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m$, definida e contínua para todo ponto $(x, \mathbf{y})$ pertencente a $D = \{(x, \mathbf{y}) | a \leq x \leq b \text{ e } -\infty <^i y < +\infty\}$, sendo que a e b são finitos, e seja L uma constante tal que*

$$\|\mathbf{f}(x, \mathbf{y}) - \mathbf{f}(x, \mathbf{y}^*)\| \leq L \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^*\| \quad (1.6)$$

para todo $x, \mathbf{y}, \mathbf{y}^$ com $(x, \mathbf{y})$ e $(x, \mathbf{y}^*)$ em D . Então, para qualquer $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$, existe uma única solução $\mathbf{y}(x)$ do problema (1.5), que é contínua e diferenciável para todo ponto $(x, \mathbf{y}) \in D$.*

A desigualdade (1.6) é conhecida como *condição de Lipschitz* e a constante L , como *constante de Lipschitz*.

1.3 Métodos Numéricos

Em todos os métodos contidos neste trabalho, consideramos uma discretização do intervalo contínuo $[a, b]$. Isto é, a integração é realizada sobre pontos $x_n = x_0 + n h$, $n = 0, 1, \dots, N$ do intervalo contínuo, onde h é identificado como o comprimento do passo de integração, com $x_0 = a$ e $x_N = b$. Em cada ponto x_n , geramos uma aproximação

$\mathbf{y}_n = ({}^1y_n, {}^2y_n, \dots, {}^my_n)$ para a solução exata $\mathbf{y}(x)$.

Definição 1.3.1 Neste trabalho vamos definir por um **método numérico** a uma equação de diferenças da seguinte forma

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \mathbf{y}_{n+j} = h \phi_f(\mathbf{y}_{n+k}, \mathbf{y}_{n+k-1}, \dots, \mathbf{y}_n, x_n; h), \quad (1.7)$$

onde se $k = 1$, o método é denominado **método de passo um** e se $k > 1$, temos um **método de passo k** (ou **passo múltiplo**).

De acordo com estudos encontrados em Lambert [12], podemos concluir que o método (1.7) será **consistente** quando as condições

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0 \quad \text{e} \quad (1.8)$$

$$\frac{\phi_f(\mathbf{y}(x_n), \mathbf{y}(x_n), \dots, \mathbf{y}(x_n), x_n; 0)}{\sum_{j=0}^k j \alpha_j} = \mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}(x_n)), \quad (1.9)$$

forem satisfeitas.

Considerando uma forma mais específica para ϕ_f definimos os métodos lineares de passo múltiplo:

Definição 1.3.2 Um **método linear de passo múltiplo**, ou **linear de passo k** é dado por

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \mathbf{y}_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j \mathbf{f}_{n+j}, \quad (1.10)$$

onde $\mathbf{f}_{n+j} = \mathbf{f}(x_{n+j}, \mathbf{y}_{n+j})$ e α_j e β_j são constantes arbitrárias independentes de n , satisfazendo às condições:

$$\alpha_k = 1 \quad \text{e} \quad |\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0.$$

Os métodos lineares de passo múltiplo são ditos:

- **explícitos** $\rightarrow$ se $\beta_k = 0$ em (1.10);
- **implícitos** $\rightarrow$ se $\beta_k \neq 0$ em (1.10).

Definição 1.3.3 Podemos definir um **operador de diferença linear** $\mathcal{L}$ associado ao método linear de passo múltiplo (1.10) dado por

$$\mathcal{L}[z(x); h] := \sum_{j=0}^k [\alpha_j z(x + jh) - h\beta_j z'(x + jh)], \quad (1.11)$$

onde $z(x)$ é uma função arbitrária, continuamente diferenciável em $[a, b]$.

Expandindo $z(x + jh)$ e $z'(x + jh)$ em série de Taylor em torno do ponto x , reescrevemos o operador $\mathcal{L}$ como

$$\mathcal{L}[z(x); h] = C_0 z(x) + C_1 h z'(x) + \cdots + C_q h^q z^{(q)}(x) + \cdots, \quad (1.12)$$

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

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

Definição 1.3.4 O método linear de passo múltiplo (1.10) e o operador de diferença associado $\mathcal{L}$ definido por (1.11), têm **ordem** p se, em (1.12), $C_0 = C_1 = \cdots = C_p = 0$ e $C_{p+1} \neq 0$. E, ainda, a constante C_{p+1} é denominada **constante de erro** do método.

Ao construirmos um método linear de passo múltiplo, temos $2k + 1$ incógnitas (α_j e β_j), para determinarmos. Agora, se desejamos que esse método tenha ordem p , temos que: $C_0 = C_1 = \cdots = C_p = 0$, ou seja, $p + 1$ equações nas incógnitas α_j e β_j , $j = 0, 1, \dots, k$. Sendo assim, temos que a ordem máxima alcançável por um método linear de passo múltiplo é:

$$p = 2k, \quad \text{se o método for implícito;}$$

$$p = 2k - 1, \quad \text{se o método for explícito.}$$

Uma medida que nos fornece a precisão de um método numérico é o erro de truncamento local obtido ao substituírmos, em (1.7), as aproximações y_n por $y(x_n)$.

Concentraremos nossa atenção nos métodos de passo um, particularmente os métodos de Runge - Kutta, uma vez que são os de maior interesse neste trabalho.

Definição 1.3.5 *O erro de truncamento local de um método linear de passo um*

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \phi_f(\mathbf{y}_{n+1}, \mathbf{y}_n, x_n; h), \quad (1.13)$$

num ponto x_{n+1} , denotado por T_{n+1} , é determinado pela equação

$$T_{n+1} = \mathbf{y}(x_{n+1}) - \mathbf{y}(x_n) - h \phi_f(\mathbf{y}(x_{n+1}), \mathbf{y}(x_n), x_n; h), \quad (1.14)$$

onde $\mathbf{y}(x)$ é a solução exata do p.v.i. (1.5). Se p é o maior inteiro tal que $T_{n+1} = O(h^{p+1})$, dizemos que o método tem **ordem** p .

Denotamos por $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}$ à aproximação em x_{n+1} gerada pelo método (1.13) quando admitimos a hipótese local $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}(x_n)$. Logo,

$$\tilde{\mathbf{y}}_{n+1} = \mathbf{y}(x_n) + h \phi_f(\mathbf{y}(x_{n+1}), \mathbf{y}(x_n), x_n; h). \quad (1.15)$$

Usando (1.15) em (1.14), podemos concluir que

$$T_{n+1} = \mathbf{y}(x_{n+1}) - \tilde{\mathbf{y}}_{n+1}. \quad (1.16)$$

Portanto, quando supomos a hipótese local, o erro de truncamento local resume-se à diferença entre a solução exata e a solução numérica no ponto x_{n+1} .

1.3.1 Métodos de Runge - Kutta

Definição 1.3.6 *Denominamos método de Runge - Kutta com s -estágios para o problema (1.5) ao método de passo um definido por*

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (1.17)$$

onde

$$k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (1.18)$$

com os valores c_i assumindo à seguinte condição:

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, s. \quad (1.19)$$

Para representar os coeficientes de um método de Runge - Kutta podemos utilizar a seguinte representação proposta por Butcher:

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

ou seja,

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

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

Os métodos de Runge - Kutta são classificados como:

- **explícitos** $\rightarrow a_{ij} = 0$ para todo $i \leq j$, isto é, A é estritamente triangular inferior;
- **implícitos** $\rightarrow a_{ij} \neq 0$ para algum $i < j$, isto é, A não é triangular inferior;
- **semi-implícitos** $\rightarrow a_{ij} = 0$ para todo $i < j$ e se existir $a_{ii} \neq 0$, isto é, A é triangular inferior. Se todos a_{ii} são idênticos, definimos como **diagonalmente-implícitos**.

O erro de truncamento local de um método de Runge - Kutta com s -estágios é dado, de acordo com (1.14) por:

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

onde as avaliações k_i são efetuadas considerando-se a solução exata $\mathbf{y}(x_n)$ em lugar de y_n .

Como em (1.16), considerando-se a hipótese local temos que:

$$T_{n+1} = \mathbf{y}(x_{n+1}) - \tilde{\mathbf{y}}_{n+1}. \quad (1.20)$$

Agora, expandindo $\mathbf{y}(x_{n+1})$ e $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}$ em série de Taylor na vizinhança do ponto x_n , podemos expressar T_{n+1} em potências de h , ou seja,

$$T_{n+1} = U_1 h + U_2 h^2 + U_3 h^3 + \dots + U_{p+1} h^{p+1} + \dots,$$

onde os U_i são expressões que envolvem os coeficientes do método multiplicadas por derivadas

parciais da função $f(x, y)$.

Assim, pela Definição 1.3.5, para que o método tenha ordem de consistência p , devemos ter

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

No entanto, para que tenhamos $U_i = 0$ para $i = 1, 2, \dots, p$, é preciso que nelas as expressões que envolvem os coeficientes do método sejam nulas. Isto irá gerar as denominadas **condições de ordem**, as quais os coeficientes do método deverão satisfazer para que este tenha ordem de consistência p .

Com o intuito de ilustrarmos esse conceito, vamos construir as condições de ordem para um método de Runge - Kutta explícito com $s = 2$ estágios e ordem $p = 2$.

Temos que:

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2)$$

onde

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

$$k_2 = f(x_n + c_2 h, y_n + a_{21} h k_1) = f(x_n + c_2 h, y_n + c_2 h k_1).$$

Considerando a hipótese local $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}(x_n)$, temos que (1.20) será dado por:

$$T_{n+1} = \mathbf{y}(x_{n+1}) - [\mathbf{y}(x_n) + h(b_1 k_1 + b_2 k_2)]$$

onde k_1 e k_2 também são obtidos utilizando-se a solução exata $\mathbf{y}(x_n)$ em lugar de y_n .

Expandindo $\mathbf{y}(x_{n+1})$ e $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}$ em série de Taylor na vizinhança do ponto x_n , podemos expressar T_{n+1} em potências de h . Então

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(x_{n+1}) &= \mathbf{y}(x_n) + h\mathbf{y}^{(1)}(x_n) + \frac{h^2}{2!}\mathbf{y}^{(2)}(x_n) + O(h^3) \\ &= \mathbf{y}(x_n) + hf + \frac{h^2}{2}[f_x + ff_y] + O(h^3), \end{aligned}$$

e como

$$k_1 = f,$$

$$k_2 = f + hc_2[f_x + k_1 f_y] + \frac{1}{2}h^2 c_2^2[f_{xx} + 2k_1 f_{xy} + k_1^2 f_{yy}] + O(h^3),$$

temos

$$\tilde{\mathbf{y}}_{n+1} = \mathbf{y}(x_n) + h(b_1 + b_2)f + h^2 b_2 c_2(f_x + ff_y) + O(h^3).$$

Portanto

$$T_{n+1} = [1 - (b_1 + b_2)]fh + [\frac{1}{2} - b_2c_2](f_x + ff_y)h^2 + O(h^3).$$

Assim, um método de Runge - Kutta com $s = 2$ estágios terá ordem $p = 2$ se:

$$b_1 + b_2 = 1 \quad \text{e} \quad b_2c_2 = \frac{1}{2}.$$

Seguindo esse mesmo raciocínio, podemos construir as condições de ordem para métodos de Runge - Kutta com $s \geq 3$ estágios e ordem $p \geq 3$. Sendo assim, para $s = 3$ estágios e ordem $p = 3$, encontramos que as condições de ordem são as seguintes equações:

$$\begin{aligned} b_1 + b_2 + b_3 &= 1, \quad b_2c_2 + b_3c_3 = \frac{1}{2}, \\ b_2c_2^2 + b_3c_3^2 &= \frac{1}{3}, \quad b_3c_2a_{32} = \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

Para $s = 4$ estágios e ordem $p = 4$, obtemos que as condições de ordem são:

$$\sum_{i=1}^4 b_i = 1, \tag{1.21}$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i c_i^j = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1, 2, 3, \tag{1.22}$$

$$\sum_{i,j=1}^4 b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}, \tag{1.23}$$

$$\sum_{i,j=1}^4 b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8}, \tag{1.24}$$

$$\sum_{i,j=1}^4 b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \tag{1.25}$$

$$\sum_{i,j=1}^4 b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}. \tag{1.26}$$

Agora, para ordem $p = 5$ precisamos ter $s = 6$ estágios pois, conforme pode ser visto em Lambert [12] e Butcher [2], para $p \leq 4$ é possível construirmos métodos de Runge - Kutta explícitos com $s = p$ estágios e para $p \geq 5$ essa relação não é mais possível. Um resultado que relaciona o número mínimo de estágios para que se atinja uma certa ordem

é dado pela tabela:

Ordem(p)	5	6	7	8	9	10
Nº de estágios(s)	6	7	9	11	$12 \leq s \leq 17$	$13 \leq s \leq 17$

Então, as condições de ordem para $s = 6$ estágios e ordem $p = 5$, são:

$$\sum_{i=1}^5 b_i = 1, \quad (1.27)$$

$$\sum_{i=1}^5 b_i c_i^j = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1, 2, 3, 4, \quad (1.28)$$

$$\sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}, \quad (1.29)$$

$$\sum_{i,j=1}^5 b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8}, \quad (1.30)$$

$$\sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \quad (1.31)$$

$$\sum_{i,j,k=1}^5 b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}, \quad (1.32)$$

$$\sum_{i,j=1}^5 b_i c_i^2 a_{ij} c_j = \frac{1}{10}, \quad (1.33)$$

$$\sum_{i,j=1}^5 b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15}, \quad (1.34)$$

$$\sum_{i,j,k=1}^5 b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{30}, \quad (1.35)$$

$$\sum_{i=1}^5 b_i \left(\sum_{j=1}^5 a_{ij} c_j \right)^2 = \frac{1}{20}, \quad (1.36)$$

$$\sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20}, \quad (1.37)$$

$$\sum_{i,j,k=1}^5 b_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k = \frac{1}{40}, \quad (1.38)$$

$$\sum_{i,j,k=1}^5 b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60}, \quad (1.39)$$

$$\sum_{i,j,k,m=1}^5 b_i a_{ij} a_{jk} a_{km} c_m = \frac{1}{120}. \quad (1.40)$$

Métodos Embutidos de Runge - Kutta

A partir da idéia de Merson em derivar métodos de Runge - Kutta de ordens p e $p+1$ que compartilham um mesmo conjunto de vetores k_i , surgiram os métodos considerados em pares, denominados por *embutidos*, ou simplesmente *métodos embutidos*.

Para apresentar os *métodos embutidos*, modificamos a representação de Butcher para a seguinte forma:

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

Essa notação indica que o método definido por c , A e b^T tem ordem p e o definido por c , A e $\hat{b}^T$ tem ordem $p+1$. O vetor E^T é $\hat{b}^T - b^T$.

1.4 Estabilidade

Vamos examinar, no momento, algumas propriedades de estabilidade dos métodos de Runge - Kutta e dos métodos lineares de passo múltiplo, importantes para a obtenção de aproximações com bom grau de precisão para a solução de equações diferenciais ordinárias com uma condição inicial.

Consideremos a análise da estabilidade linear, que está relacionada com a equação teste

$$y' = \lambda y, \quad (1.41)$$

onde o escalar λ (real ou complexo) tem parte real negativa.

Temos que a solução da equação teste é

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

onde k é uma constante arbitrária. Logo,

$$y(x_{n+1}) = k \exp(\lambda x_{n+1}) = k \exp(\lambda(x_n + h)) = k \exp(\lambda x_n) \exp(\lambda h) = \exp(\hat{h}) y(x_n), \quad (1.42)$$

onde $\hat{h} = h\lambda$.

Aplicando (1.41) a um método de passo um implícito (1.13), obtemos uma equação de diferenças da forma

$$y_{n+1} = R(\hat{h})y_n, \quad (1.43)$$

onde $\hat{h} = h\lambda$ e $R(\cdot)$ é uma função racional que é conhecida como **função de estabilidade**. Para os métodos de Runge - Kutta (1.17)-(1.18) podemos verificar em [12] que $R(\hat{h})$ é dada por:

$$R(\hat{h}) = \frac{\det(I - \hat{h}A + \hat{h}eb^T)}{\det(I - \hat{h}A)},$$

a qual podemos denotar da seguinte maneira:

$$R(\hat{h}) = \frac{P(\hat{h})}{Q(\hat{h})}. \quad (1.44)$$

A solução geral de (1.43) é da forma,

$$y_n = \{R(\hat{h})\}^n y_0.$$

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

$$|R(\hat{h})| < 1. \quad (1.45)$$

Assim, definimos:

Definição 1.4.1 Um método linear de passo um é **absolutamente estável** para os valores de $\hat{h}$ que satisfazem (1.45).

Definição 1.4.2 Denominamos a região $\mathcal{R}_A$ do plano complexo, na qual se verifica (1.45), de **região de estabilidade absoluta do método**, definida por

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

e a intersecção de $\mathcal{R}_A$ com o eixo real de **intervalo de estabilidade absoluta**.

Alguns problemas de valor inicial envolvendo sistemas de equações diferenciais ordinárias exibem um fenômeno de comportamento conhecido como *stiff*. Quando tentamos resolver esses problemas usando os métodos numéricos vistos anteriormente, encontramos dificuldades. Como uma definição de *stiff*, selecionamos a mais conveniente entre os vários aspectos qualitativos que podem ser tomados, com o intuito de resumir a noção desse

fenômeno.

Definição 1.4.3 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 aos requisitos da estabilidade absoluta. Para alguns métodos esses requisitos impõem restrições tão severas ao tamanho do passo que os tornam inadequados sob o ponto de vista do esforço computacional. Em virtude disso, procura-se obter métodos cuja região de estabilidade ($\mathcal{R}_A$) é a maior possível. A classe mais indicada para este tipo de problema é a dos métodos **A-estáveis**.

Definição 1.4.4 Um método é **A-estável** se $\mathcal{R}_A \supseteq \{ \hat{h} \mid \operatorname{Re}(\hat{h}) < 0 \}$.

Em particular, um método de Runge - Kutta com (1.44) como função de estabilidade é **A-estável** se, e somente se,

$$|R(iy)| \leq 1 \quad \text{para todo } y \text{ real} \quad (1.46)$$

e

$$R(\hat{h}) \text{ é analítica para } \operatorname{Re}(\hat{h}) < 0. \quad (1.47)$$

Definição 1.4.5 Um método é **A₀-estável** se $\mathcal{R}_A \supseteq \{ \hat{h} \mid \operatorname{Re}(\hat{h}) < 0, \operatorname{Im} \hat{h} = 0 \}$.

A **A-estabilidade** garante que, para qualquer $h > 0$ escolhido, a solução numérica de (1.41), não crescerá indefinidamente com o aumento de n .

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

Definição 1.4.6 Um método é **L - estável** se for **A-estável** e, além disso,

$$\lim_{\operatorname{Re} \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| = 0. \quad (1.48)$$



A condição (1.46) sozinha, significa estabilidade no eixo imaginário e pode ser chamada **I-estabilidade**. Ela é equivalente a exigir que o polinômio

$$E(y) = |Q(iy)|^2 - |P(iy)|^2 = Q(iy)Q(-iy) - P(iy)P(-iy) \quad (1.49)$$

satisfaça

$$E(y) \geq 0 \text{ para todo } y \in \mathbb{R}. \quad (1.50)$$

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 1.4.1 (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 a dois.

(iii) O método linear de passo múltiplo A-estável de segunda ordem com a menor constante de erro é a Regra Trapezoidal.

Sem dúvida, a restrição sobre a ordem do método dada por (ii) é bastante rígida, pois quando a **A-estabilidade** é exigida, concluímos que a *Regra Trapezoidal* é o método linear de passo múltiplo mais preciso. Logo, ao olharmos para métodos com quaisquer uma das propriedades de estabilidade dadas acima, a classe dos métodos de passo múltiplo não fornece bons representantes.

Nas seções e capítulos seguintes tentaremos contornar essa barreira, trabalhando com uma nova classe de métodos, que podem ser tanto **A-estáveis** como **L - estáveis**.

1.5 Aproximações Racionais para a Exponencial

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

Seja o método de ordem p . Usando a hipótese local, $y_n = y(x_n)$, obtemos, de (1.42) e (1.43) e da definição de erro de truncamento local, que

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

e, portanto

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

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

Sejam $q \in \mathbb{C}$ e $R_T^S(q)$, com $S \geq 0, T \geq 0$, definida por

$$R_T^S = \frac{\sum_{i=0}^S a_i q^i}{\sum_{j=0}^T b_j q^j}, \quad a_0 = b_0 = 1, \quad a_S \neq 0 \text{ e } b_T \neq 0, \quad (1.51)$$

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

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 (1.51) que podemos encontrar a ordem de uma dada aproximação racional considerando que, se

$$1 + a_1 q + \dots + a_S q^S - (1 + b_1 q + \dots + b_T q^T)(1 + q + \frac{q^2}{2!} + \dots) = O(q^{p+1}), \quad (1.52)$$

então a aproximação é de ordem p .

De acordo com o número de parâmetros a_i e b_j em (1.52), podemos notar que a ordem máxima alcançável pela aproximação $R_T^S(q)$ é $p = S + T$. Tal aproximação de ordem máxima é conhecida como **aproximação de Padé** e a denotaremos por $\hat{R}_T^S(q)$.

Como vimos, as propriedades de estabilidade de um método de passo um que gera a equação de diferenças (1.43) são determinadas pela função $R(\hat{h})$. Seguindo a nomenclatura de aceitabilidade usada por Lambert [12], consideremos a seguinte definição:

Definição 1.5.1 Uma aproximação racional $R(q)$ para $\exp(q)$ é:

- **A-aceitável** se $|R(q)| < 1$ sempre que $\text{Re}(q) < 0$,
- **A₀-aceitável** se $|R(q)| < 1$ sempre que q for real e negativo, e
- **L-aceitável** se ela é **A-aceitável** e $|R(q)| \rightarrow 0$ quando $\text{Re}(q) \rightarrow -\infty$.

Fica claro que o método será **A-**, **A₀-** ou **L-estável** se $R(\hat{h})$ for **A-**, **A₀-** ou **L-aceitável**. Assim, pela definição anterior e por (1.51), 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**.

Vejamos alguns resultados sobre aceitabilidade, também dados por Lambert [12], definindo aproximações racionais que contêm parâmetros livres e não são em geral aproximações de Padé.

Definição 1.5.2 *Sejam*

$$\left. \begin{aligned} R_1(q; \alpha) &:= \frac{1 + \frac{1}{2}(1 - \alpha)q}{1 - \frac{1}{2}(1 + \alpha)q} \\ R_2(q; \alpha, \beta) &:= \frac{1 + \frac{1}{2}(1 - \alpha)q + \frac{1}{4}(\beta - \alpha)q^2}{1 - \frac{1}{2}(1 + \alpha)q + \frac{1}{4}(\beta + \alpha)q^2} \end{aligned} \right\} \quad (1.53)$$

Para um α genérico, $R_1(q; \alpha)$ tem ordem 1, mas terá ordem dois (aproximação de Padé) se $\alpha = 0$; $R_2(q; \alpha, \beta)$ tem ordem 2 para α e β genéricos, ordem 3 se $\alpha \neq 0, \beta = \frac{1}{3}$ e ordem 4 (aproximação de Padé) se $\alpha = 0, \beta = \frac{1}{3}$.

Teorema 1.5.1 (Liniger e Willoughby, 1970) *Sejam $R_1(q; \alpha)$ e $R_2(q; \alpha, \beta)$ definidos por (1.53). Então*

- (a) $R_1(q; \alpha)$ é **A-aceitável** se, e somente se, $\alpha \geq 0$ e **L-aceitável** se, e somente se, $\alpha = 1$, e
- (b) $R_2(q; \alpha, \beta)$ é **A-aceitável** se, e somente se, $\alpha \geq 0, \beta \geq 0$ e **L-aceitável** se, e somente se, $\alpha = \beta > 0$.

Agora vejamos alguns resultados referentes a aproximação de Padé $\hat{R}_T^S(q)$:

Teorema 1.5.2 (Birkhoff e Varga, 1965) *Se $T = S$ então a aproximação de Padé $\hat{R}_T^S(q)$ é A-aceitável.*

Teorema 1.5.3 (Varga, 1961) *Se $T \geq S$, então $\hat{R}_T^S(q)$ é A₀-aceitável.*

Teorema 1.5.4 (Ehle, 1969) *Se $T = S + 1$ ou $T = S + 2$, então a aproximação de Padé $\hat{R}_T^S(q)$ é L - aceitável.*

Temos que a **A-estabilidade** pode ser facilmente verificada com a teoria *order star*, descrita em [9]. De fato, considerando resultados que estão em [9], [8], [12] e através da seção seguinte, poderemos verificar que uma função de estabilidade, $R(\hat{h})$, sem pólos em $\mathbb{C}^-$ e que satisfaz $|R(iy)| \leq 1$, é **A-aceitável**, e então o método é **A-estável**.

1.6 Order Star

1.6.1 Definições

Como foi visto anteriormente, podemos definir a região de estabilidade absoluta $\mathcal{R}_A$ de um método de Runge-Kutta ou linear de passo um por $\mathcal{R}_A = \{q \in \mathbb{C} : |R(q)| < 1\}$, onde $R(\cdot)$ é definido por $y_{n+1} = R(\hat{h})y_n$. Consideremos, ao invés de $\mathcal{R}_A$, a região $\mathcal{B} = \{q \in \mathbb{C} : |R(q)| > |\exp(q)|\}$. (Note que $C(\mathcal{B})$, o complementar de $\mathcal{B}$, é $|R(q)| < |\exp(q)|$.) A região $\mathcal{B}$ é chamada uma **order star**, porque as figuras que a representam lembram estrelas. Essas figuras são produzidas pela **técnica scanning**, a qual consiste em substituímos em $R(q)$, q por $x + iy$, desenharmos a linha $x = \text{constante}$ e marcamos os pontos (x, y) se, e somente se, $|R(q)| > |\exp(q)|$, então incrementarmos x e repetirmos o processo. Ao implementarmos essa técnica, obtemos figuras como 1.6.1, que exibe a *order star* de $\hat{R}_4^1(q) = \frac{1+q/5}{1-4q/5+3q^2/10-q^3/15+q^4/120}$. (Usamos o software *Mathematica* [17] para fazermos a implementação, que pode ser vista na subseção seguinte 1.6.2).

Por aplicações elementares da teoria clássica de variáveis complexas, quatro lemas podem ser estabelecidos:

Lema 1.6.1 *$R(q)$ é uma aproximação racional para $\exp(q)$ de ordem p se, e somente se, para $q \rightarrow 0$, $\mathcal{B}$ consiste de $p + 1$ setores, cada um de ângulo $\frac{\pi}{(p+1)}$ separado por $p + 1$ setores do $C(\mathcal{B})$, cada um de mesmo ângulo.*



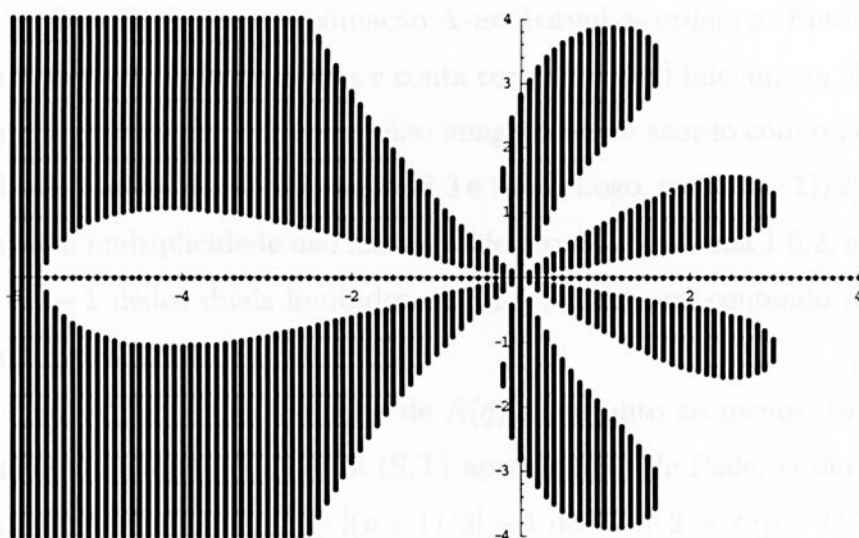


Figura 1.6.1: Order star de $\hat{R}_4^1(q)$.

Lema 1.6.2 *A fronteira $\partial\beta$ de β possui precisamente duas ramificações que vão para o infinito.*

Regiões de β resultando em um só setor são chamadas **dedos**, e podem ser limitadas ou não limitadas. Da mesma forma, dedos limitados ou não limitados de $C(\beta)$ são chamados **dedos duais**. Se uma região origina de n setores de β ela é chamada um **dedo de multiplicidade n** e também será limitada ou não; regiões similares de $C(\beta)$ são chamadas **dedos duais de multiplicidade n** .

Lema 1.6.3 *Cada dedo limitado de multiplicidade n contém ao menos n pólos de $R(q)$ (um pólo de multiplicidade v conta como v pólos), e cada dedo dual limitado de multiplicidade n contém ao menos n zeros de $R(q)$ (um zero de multiplicidade v conta como v zeros).*

Lema 1.6.4 *$R(q)$ é A-aceitável se, e somente se, β não tem intersecção com o eixo imaginário e $R(q)$ não tem pólos no semi-plano $\operatorname{Re} q < 0$.*

A seguir, usaremos as seguintes notações: $[x]$ significando o maior inteiro menor ou igual a x , e $\mathbb{C}^-$ indicando o semi-plano $\operatorname{Re} q < 0$.

Seja $R(q)$ uma aproximação **A-aceitável** de ordem p . Então ao menos $[(p+1)/2]$ dedos (um dedo de multiplicidade v conta como v dedos) iniciam em $\mathbb{C}^-$, pelo Lema 1.6.1, nenhum dos quais podem cruzar o eixo imaginário, de acordo com o Lema 1.6.4, e nenhum dos quais são limitados, pelos Lemas 1.6.3 e 1.6.4. Logo, esses $[(p+1)/2]$ dedos devem formar um dedo com multiplicidade não limitado, de acordo com Lema 1.6.2, e irão portanto conter $[(p+1)/2] - 1$ dedos duais limitados em $\mathbb{C}^-$, cada qual contendo ao menos um zero de $R(q)$, pelo Lema 1.6.3.

O número *total* de zeros de $R(q)$ é portanto ao menos $[(p+1)/2] - 1$. Agora, suponhamos que $R(q) = \hat{R}_T^S(q)$, a (S, T) aproximação de Padé; então $p = S + T$, e $\hat{R}_T^S(q)$ têm S zeros. Assim, temos $S \geq [(p+1)/2] - 1$ ou $2S + 2 \geq 2[(p+1)/2] \geq p$, uma vez que

$$2[(p+1)/2] = \begin{cases} p+1 & \text{se } p \text{ é ímpar} \\ p & \text{se } p \text{ é par.} \end{cases}$$

Assim, temos que $2S + 2 \geq S + T$, ou $S \geq T - 2$. Como não podemos ter **A-aceitabilidade** se $S > T$, temos a *conjetura de Ehle* provada:

Teorema 1.6.1 *A (S, T) aproximação de Padé, $\hat{R}_T^S(q)$, é A-aceitável se, e somente se, $T - 2 \leq S \leq T$.*

1.6.2 Implementação da Técnica *Scanning*

Apresentamos agora, o programa que fizemos para gerar as figuras que representam a região denominada *order star*.

```

R[q_] := P[q_]/Q[q_]
F[x_, y_] := First [R/@{x + I * y}]
data = Table [{x2, If [Abs[N[F[x2, y2]]] > Abs [Exp[x2 + I y2]], y2, 0]},
{x2, a, b, j}, {y2, c, d, s}];
tam = Length [data];
Do [grp[i] = ListPlot [data [[i]], DisplayFunction -> Identity], {i, 1, tam}];
Show [Array [grp, tam], PlotRange -> {{a, b}, {c, d}}, DisplayFunction ->
$DisplayFunction]
```

As variáveis a, b, c, d, j e s , representam respectivamente:

$a \rightarrow$ menor valor inteiro de x , nos zeros e pólos de $R(q)$;

$b \rightarrow$ maior valor inteiro de x , nos zeros e pólos de $R(q)$;

$c \rightarrow$ menor valor inteiro de y , nos zeros e pólos de $R(q)$;

$d \rightarrow$ maior valor inteiro de y , nos zeros e pólos de $R(q)$;

$j \rightarrow$ variação do x ;

$s \rightarrow$ variação do y .

Se, quando geramos a figura, notamos que ela não foi completada, aumentamos um pouco o valor da variável correspondente ao ponto que deve ser completado.

2.1 Forma Geral dos Métodos Estendidos de Passo Um

Os métodos estendidos de passo um são definidos da seguinte forma:

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_1 f(x_n, y_n) + \alpha_2 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \sum_{j=2}^{p-1} \alpha_j f(x_{n+j}, y_{n+j})], \quad (2.1)$$

onde para $j = 2, 3, \dots, p-1$,

$$y_{n+j} = \beta_0 y_n + \beta_1 y_{n+1} + h[\gamma_0 f(x_n, y_n) + \gamma_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \sum_{j=2}^{p-1} \gamma_{jk} f(x_{n+k}, y_{n+k})], \quad (2.2)$$

Capítulo 2

Construção dos Métodos Estendidos de Passo Um

Neste capítulo, introduziremos a forma geral dos métodos estendidos de passo um, a qual poderemos reescrever na forma dos métodos de Runge - Kutta. Mostraremos, então, os passos para construirmos tais métodos estendidos com ordem mais alta possível utilizando a teoria dos métodos de Runge - Kutta. Iniciaremos a construção partindo do método de ordem dois e, em seguida, faremos os de ordem três. Além disso, estaremos também verificando as propriedades de estabilidade e as ordens de estágio.

2.1 Forma Geral dos Métodos Estendidos de Passo Um

Os métodos estendidos de passo um são definidos da seguinte forma

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f(x_n, y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \sum_{j=2}^{p-1} \alpha_j f(x_{n+j}, \hat{y}_{n+j})], \quad (2.1)$$

onde para $j = 2, 3, \dots, p-1$,

$$\hat{y}_{n+j} = \beta_{j0} y_n + \beta_{j1} y_{n+1} + h[\gamma_{j0} f(x_n, y_n) + \gamma_{j1} f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk} f(x_{n+k}, \hat{y}_{n+k})]. \quad (2.2)$$

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

Tabela 2.1.1: Coeficientes do método de ordem p

Podemos também, de maneira mais simples, nos referir a tais métodos pela tabela dada acima.

Aplicando a condição de consistência (1.8) dos métodos numéricos em geral, na equação (2.2), obtemos $1 - \beta_{j0} - \beta_{j1} = 0$. Logo, concluímos que

$$\beta_{j0} + \beta_{j1} = 1, \quad j = 2, 3, \dots, p - 1. \tag{2.3}$$

Fazendo um simples desenvolvimento, verificamos que os métodos (2.1)-(2.2) podem ser reescritos na forma dos *métodos de Runge - Kutta implícitos com s -estágios* do seguinte modo:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(x_n + c_i h, Y_i), \tag{2.4}$$

com

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(x_n + c_j h, Y_j), \quad i = 1, 2, \dots, s, \tag{2.5}$$

onde para $j = 1, 2, \dots, s$:

$$\begin{aligned} c_j &= j - 1, \\ b_j &= \alpha_{j-1}, \\ a_{ij} &= \begin{cases} 0, & i = 1, \\ \alpha_{j-1}, & i = 2, \\ \beta_{i-1,1} \alpha_{j-1} + \gamma_{i-1,j-1}, & i = 3, 4, \dots, s, \end{cases} \end{aligned}$$

com $\gamma_{kl} : = 0$ quando $k \leq l$.

Sendo assim, utilizaremos a teoria dos métodos de Runge - Kutta com o intuito de facilitar a construção dos métodos estendidos de passo um.

2.1.1 Construção dos Métodos Estendidos

Para a classe de métodos definidos por (2.1)-(2.2), vamos construir métodos com ordem mais alta possível (*métodos ótimos*). De pronto concluímos que a ordem máxima alcançável é $p = s$, pois partindo das condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta, temos

$$\sum_{i=1}^p b_i c_i^k = \sum_{i=0}^{p-1} \alpha_i i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, \dots, p-1,$$

que determinam unicamente os coeficientes α_i , $i = 0, 1, \dots, p-1$, ou seja, teremos p equações e p incógnitas e então encontraremos uma única solução para o sistema. Não conseguimos ordem maior, pois se tivermos mais de p equações, não teremos o mesmo número de incógnitas, logo não conseguimos resolver o sistema, ou seja, encontrar soluções.

Para obtermos os coeficientes β_{i1} usaremos a *condição da soma das linhas*, dada por (1.19), que expressa a consistência dos estágios internos. Essas equações também podem ser escritas na forma matricial

$$c = Ae,$$

onde $e = (1, 1, \dots, 1)^T$, determinando unicamente os coeficientes β_{i0} , que podem ser obtidos também por (2.3) desde que os β_{i1} sejam conhecidos.

Falta, agora, determinarmos os $\frac{(p+1)(p-2)}{2}$ valores dos γ_{ij} . Verificamos que existe exatamente esse número de γ_{ij} quando tomamos um valor particular de p e notamos que a quantidade dos γ_{ij} formavam a seguinte soma:

$$1 + 2 + 3 + \dots + (p-2) + (p-2),$$

que é a soma dos n primeiros termos de uma P.A. mais o termo $(m-2)$. Logo,

$$\frac{(1 + (p-2))(p-2)}{2} + (p-2) = \frac{(p+1)(p-2)}{2}.$$

Os parâmetros γ_{ij} tem que satisfazer certas equações lineares e não lineares para um método ser de ordem p . Essas equações são algumas das equações das condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta, as que restam para serem trabalhadas.

Existe uma maneira de simplificarmos significativamente o número dessas equações, que é impor as condições

$$\frac{c^{k+1}}{k+1} = Ac^k, \quad k = 1, 2, \dots, q-1, \quad (2.6)$$



que são necessárias para um método de Runge - Kutta ter **ordem de estágio** q . Ao impormos (2.6), retemos apenas algumas equações.

Podemos assim, contar o número de equações, lineares ou não lineares, preenchidas pelas incógnitas γ_{ij} para cada p e q , como veremos nas próximas seções e capítulos, e isto está resumido abaixo:

	p = 2	p = 3	p = 4	p = 5	p = 6	p = 7
nº de γ_{ij}	0	2	5	9	14	20
nº de equações para q = 2		2	3	7	15	25
nº de equações para q = 3			4	7	12	21

De acordo com a Tabela 2.1.1, verificamos que a ordem de estágio q não excede 3. Essa conclusão foi tirada ao tomarmos a primeira linha de *betas* e *gammas* da tabela, que são componentes de uma fórmula linear de passo múltiplo cuja ordem máxima alcançável, de acordo com o que vimos anteriormente, é $p = 2k - 1$, onde k é o tamanho do passo, nesse caso 2. Logo, a fórmula tem no máximo ordem 3.

Em Chawla *et al.* [4]-[5] foram obtidos métodos de ordem p com ordem de estágio $p - 2$ para $p \leq 5$. Nas seções e capítulos seguintes, trataremos as possíveis soluções e suas respectivas propriedades de estabilidade, para $p \leq 7$ e $q = 2$ e 3.

A teoria dos métodos de Runge - Kutta permite uma fácil verificação das propriedades de estabilidade.

Ao aplicarmos diretamente os métodos lineares de passo múltiplo (2.1)-(2.2) à equação linear teste (1.41), temos

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + \dots + \alpha_{p-1}\gamma_{p-1,p-2}\gamma_{p-2,p-3}\dots\gamma_{3,2}\gamma_{2,0}\hat{h}^{p-1}}{1 + \dots - \alpha_{p-1}\gamma_{p-1,p-2}\gamma_{p-2,p-3}\dots\gamma_{3,2}\gamma_{2,1}\hat{h}^{p-1}}, \tag{2.7}$$

a qual vamos desenvolver nas próximas seções e capítulos para cada valor de $p \leq 7$.

2.2 Método Estendido de Passo Um de Ordem Dois

2.2.2 Cálculo da Ordem de Estágio

Para $p = 2$ escrevemos um método estendido de passo um, da seguinte maneira

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f(x_n, y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, y_{n+1})],$$

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

Construímos esse método encontrando os coeficientes α_0 e α_1 , a partir das condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 2

$$\sum_{i=1}^2 b_i c_i^k = \sum_{i=0}^1 \alpha_i i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1$$

que corresponde a

$$\begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 = 1 \\ \alpha_1 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

ou seja,

$$\alpha_0 = \alpha_1 = \frac{1}{2}.$$

Portanto, temos

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

que é a *Regra do Trapézio*.

2.2.1 Análise da Estabilidade

Iniciamos aplicando o presente método à equação linear teste (1.41), resultando na equação

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

Resolvendo para y_{n+1} temos

$$y_{n+1} = R(\hat{h}) y_n \quad \text{com} \quad \hat{h} = h\lambda,$$

cujas função de estabilidade, $R(\hat{h})$, por (2.7), é dada por

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + \alpha_0 \hat{h}}{1 - \alpha_0 \hat{h}} = \frac{1 + \hat{h}/2}{1 - \hat{h}/2}.$$

É bem conhecido (ver, por exemplo, Lambert [12], p.225-226), que a *Regra do Trapézio* é **A-estável**, mas não é **L - estável**.

A seguir, vamos verificar qual é a ordem de estágio deste método.

2.2.2 Cálculo da Ordem de Estágio

Calculamos a ordem de estágio tomando a condição da soma das linhas

$$c_i = \sum_{j=1}^2 a_{ij}, \quad i = 1, 2,$$

ou seja,

$$\begin{cases} c_1 = a_{11} + a_{12} \\ c_2 = a_{21} + a_{22} \end{cases}$$

que são válidas, quando substituimos os valores dos c_i e a_{ij} .

Logo, temos que a ordem de estágio para a *Regra do Trapézio* é $q = 1$, já que $k = q - 1 = 0$ na expressão

$$\frac{c^{k+1}}{k+1} = Ac^k.$$

2.3 Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Três

Para $p = 3$ temos, por Jacques [10], que existe uma família a um parâmetro de métodos estendidos de passo um ótimos da forma

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f(x_n, y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})], \quad (2.8)$$

onde

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

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

Para construirmos estes métodos, determinamos os coeficientes da fórmula principal (2.8) através das seguintes condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 3

$$\sum_{i=1}^3 b_i c_i^k = \sum_{i=0}^2 \alpha_i i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, 2,$$

que corresponde ao sistema de equações lineares

$$\begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 = 1 \\ \alpha_1 + 2\alpha_2 = 1/2 \\ \alpha_1 + 4\alpha_2 = 1/3 \end{cases}$$

com solução única dada por

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

Agora, considerando a condição da soma das linhas

$$c_i = \sum_{j=1}^3 a_{ij}, \quad i = 1, 2, 3,$$

temos o sistema linear

$$\begin{cases} c_1 = a_{11} + a_{12} + a_{13} \\ c_2 = a_{21} + a_{22} + a_{23} \\ c_3 = a_{31} + a_{32} + a_{33} \end{cases}$$

o qual, substituindo os valores dos coeficientes c_i e a_{ij} , ficamos apenas com a última equação, que resulta em

$$(\beta_{21}\alpha_0 + \gamma_{20}) + (\beta_{21}\alpha_1 + \gamma_{21}) + (\beta_{21}\alpha_2 + \gamma_{22}) = 2,$$

onde substituindo os valores dos α_i temos

$$\beta_{21} = 2 - \gamma_{20} - \gamma_{21}, \quad (2.10)$$

que é um dos coeficientes da fórmula secundária (2.9).

Por fim, resta trabalharmos com a última condição de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 3

$$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}, \quad i, j = 1, 2, 3,$$

de onde obtemos a equação

$$\alpha_1(\alpha_1 + 2\alpha_2) + \alpha_2[(\beta_{21}\alpha_1 + \gamma_{21}) + 2(\beta_{21}\alpha_2 + \gamma_{22})] = \frac{1}{6} \quad (2.13)$$

a qual, substituindo os coeficientes obtidos, corresponde a

$$\gamma_{21} = \gamma_{20} + 2.$$

Substituindo esse resultado em (2.10) obtemos

$$\beta_{21} = -2\gamma_{20}.$$

Assim, os coeficientes do método ficam dependendo de um parâmetro, ou seja, se denotarmos $\gamma_{20} = t$, temos

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

e, por (2.3),

$$\beta_{21} + \beta_{20} = 1 \implies \beta_{20} = 1 - \beta_{21} \implies \beta_{20} = 1 + 2t.$$

Portanto, fazendo as substituições dos coeficientes em (2.8) e (2.9), temos

$$y_{n+1} = y_n + h\left[\frac{5}{12}f(x_n, y_n) + \frac{2}{3}f(x_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{1}{12}f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})\right], \quad (2.11)$$

e

$$\hat{y}_{n+2} = (1 + 2t)y_n - 2ty_{n+1} + h[tf(x_n, y_n) + (2 + t)f(x_{n+1}, y_{n+1})]. \quad (2.12)$$

2.3.1 Análise da Estabilidade

De acordo com Jacques [10] podemos explorar o parâmetro livre t com a finalidade de construirmos métodos com boas propriedades de estabilidade. Entretanto, ele só trabalhou o problema da **L - estabilidade**.

Quando aplicamos o método (2.11)-(2.12) à (1.41), obtemos

$$y_{n+1} = R(\hat{h})y_n$$

com $\hat{h} = h\lambda$, onde de acordo com (2.7)

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + (\alpha_0 + \alpha_2\beta_{20})\hat{h} + \alpha_2\gamma_{20}\hat{h}^2}{1 - (\alpha_1 + \alpha_2\beta_{21})\hat{h} - \alpha_2\gamma_{21}\hat{h}^2}.$$

Logo, substituindo os valores conhecidos, temos

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + (1/3 - t/6)\hat{h} - (t/12)\hat{h}^2}{1 - (2/3 + t/6)\hat{h} - (-1/6 - t/12)\hat{h}^2}. \quad (2.13)$$

Esta função de estabilidade também pode ser definida por

$$R_2(\hat{h}; \frac{(1+t)}{3}, \frac{1}{3}) = R_2(q; \alpha, \beta) = \frac{1 + \frac{1}{2}(1 - \alpha)q + \frac{1}{4}(\beta - \alpha)q^2}{1 - \frac{1}{2}(1 + \alpha)q + \frac{1}{4}(\beta + \alpha)q^2},$$

onde, pelo Teorema 1.5.1, podemos concluir que o método de Jacques é **A-estável** para

$$\alpha = \frac{(1+t)}{3} \geq 0 \implies t \geq -1$$

e **L-estável** para

$$\alpha = \beta \implies \frac{(1+t)}{3} = \frac{1}{3} \implies t = 0.$$

Tomando $t = -1$ e substituindo esse valor em (2.13), temos

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + (1/2)\hat{h} + (1/12)\hat{h}^2}{1 - (1/2)\hat{h} + (1/12)\hat{h}^2}$$

que corresponde a $\hat{R}_2^2(\hat{h})$, ou seja, uma aproximação de Padé para a exponencial $\exp(\hat{h})$, implicando, que o método é de ordem 4 quando aplicado a problemas lineares.

2.3.2 Cálculo da Ordem de Estágio

Podemos calcular a ordem de estágio dos métodos definidos por (2.11)-(2.12) através de (2.6). Temos, neste caso, que

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 5/12 & 2/3 & -1/12 \\ t/6 & 2 - t/3 & t/6 \end{pmatrix}$$

e portanto, para $k = 1$ (2.6) é dada por

$$\frac{c^2}{2} = Ac \implies c^2 = 2Ac.$$

Substituindo os valores do vetor c e da matriz A , obtemos que a igualdade é válida, isto é,

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 5/12 & 2/3 & -1/12 \\ t/6 & 2 - t/3 & t/6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Agora, para $k = 2$, (2.6) é dada por

$$\frac{c^3}{3} = Ac^2 \implies c^3 = 3Ac^2 \implies \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 8 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 5/12 & 2/3 & -1/12 \\ t/6 & 2 - t/3 & t/6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$$

que não é válida, pois

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 8 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 6 + t \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

desde que $t \neq 2$.

Assim, como (2.6) foi verificada somente para $k = 1$, a ordem de estágio é $q = 2$, já que $k = q - 1 = 1$.

Mas, se em (2.14) tomamos $t = 2$, conseguimos aumentar a ordem de estágio de 2 para 3, uma vez que, $k = q - 1 = 2$ e obtemos em (2.11)-(2.12)

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{5}{12} f(x_n, y_n) + \frac{2}{3} f(x_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{1}{12} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) \right],$$

e

$$\hat{y}_{n+2} = 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f(x_n, y_n) + 4f(x_{n+1}, y_{n+1})]$$

que é chamada a *Regra Trapezoidal Estendida*, resultado de Usmani e Agarwal [18], que é somente **A-estável**, de acordo com resultados obtidos na subseção 2.3.1.

A construção dessas famílias de métodos é iniciada com a obtenção dos coeficientes da fórmula principal (3.1), os quais, respectivamente, satisfazem condições de ordem dos métodos de Runge-Kutta de ordem 4, que são:

$$\sum_{i=0}^3 \alpha_i = \sum_{i=0}^3 \alpha_i^2 = \frac{1}{24}, \quad i = 0, 1, 2, 3,$$

Capítulo 3

Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Quatro

O próximo passo é tomar-se a condição da soma das linhas

Iremos construir, neste capítulo, os métodos de ordem quatro. Como nesse caso teremos dois parâmetros livres, faremos a análise da estabilidade de forma diferenciada. Quanto ao cálculo da ordem de estágio, como impomos durante a construção desses métodos ordem de estágio mínima, iremos apenas fazer a verificação desse fato.

$$\begin{aligned} \gamma_2 &= \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 \\ \gamma_3 &= \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 \\ \gamma_4 &= \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 \end{aligned}$$

3.1 Uma Família de Métodos

Para $p = 4$, de acordo com Chawla [4], existe uma família de dois parâmetros de métodos estendidos de passo um ótimos, 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

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

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

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

A construção dessa família de métodos é iniciada com a obtenção dos coeficientes da fórmula principal (3.1), ou seja, tomamos algumas condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 4, que são

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

formando o seguinte sistema

$$\begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1 \\ \alpha_1 + 2\alpha_2 + 3\alpha_3 = 1/2 \\ \alpha_1 + 4\alpha_2 + 9\alpha_3 = 1/3 \\ \alpha_1 + 8\alpha_2 + 27\alpha_3 = 1/4 \end{cases}$$

cujas soluções fornece

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

O próximo passo é tomarmos a condição da soma das linhas

$$c_i = \sum_{j=1}^4 a_{ij}, \quad i = 1, 2, 3, 4,$$

que resulta no sistema

$$\begin{cases} c_1 = a_{11} + a_{12} + a_{13} + a_{14} \\ c_2 = a_{21} + a_{22} + a_{23} + a_{24} \\ c_3 = a_{31} + a_{32} + a_{33} + a_{34} \\ c_4 = a_{41} + a_{42} + a_{43} + a_{44} \end{cases}$$

o qual, fazendo as devidas substituições, fornece as equações

$$(\beta_{21}\alpha_0 + \gamma_{20}) + (\beta_{21}\alpha_1 + \gamma_{21}) + (\beta_{21}\alpha_2 + \gamma_{22}) + (\beta_{21}\alpha_3 + \gamma_{23}) = 2$$

$$(\beta_{31}\alpha_0 + \gamma_{30}) + (\beta_{31}\alpha_1 + \gamma_{31}) + (\beta_{31}\alpha_2 + \gamma_{32}) + (\beta_{31}\alpha_3 + \gamma_{33}) = 3$$

que resultam nos seguintes coeficientes

$$\beta_{21} = 2 - \gamma_{20} - \gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 3 - \gamma_{30} - \gamma_{31} - \gamma_{32}, \quad (3.4)$$

componentes das fórmulas secundárias (3.2) e (3.3).

Mas, ainda restam quatro equações das condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 4 a serem utilizadas. Entretanto, para facilitar a determinação

dos coeficientes restantes usamos a seguinte condição de simplificação

$$\frac{c^{k+1}}{k+1} = Ac^k, \quad k = 1, \quad (3.5)$$

que é necessária para um método de Runge - Kutta ter ordem de estágio mínima igual a 2.

Desenvolvendo (3.5) temos

$$c_i^2 = 2 \sum_{j=1}^4 a_{ij}c_j, \quad i = 1, 2, 3, 4$$

e então

$$\begin{cases} c_1^2 = 2(a_{11}c_1 + a_{12}c_2 + a_{13}c_3 + a_{14}c_4) \\ c_2^2 = 2(a_{21}c_1 + a_{22}c_2 + a_{23}c_3 + a_{24}c_4) \\ c_3^2 = 2(a_{31}c_1 + a_{32}c_2 + a_{33}c_3 + a_{34}c_4) \\ c_4^2 = 2(a_{41}c_1 + a_{42}c_2 + a_{43}c_3 + a_{44}c_4) \end{cases}$$

ou seja, temos as equações

$$2[(\beta_{21}\alpha_1 + \gamma_{21}) + 2(\beta_{21}\alpha_2 + \gamma_{22}) + 3(\beta_{21}\alpha_3 + \gamma_{23})] = 4$$

$$2[(\beta_{31}\alpha_1 + \gamma_{31}) + 2(\beta_{31}\alpha_2 + \gamma_{32}) + 3(\beta_{31}\alpha_3 + \gamma_{33})] = 9.$$

Após substituírmos os coeficientes que já foram encontrados, obtemos

$$\gamma_{21} = \gamma_{20} + 2, \quad \gamma_{31} = \gamma_{30} - 3\gamma_{32} + 6. \quad (3.6)$$

Podemos utilizar esses novos resultados em (3.4) e assim encontrarmos

$$\beta_{21} = -2\gamma_{20}, \quad \beta_{31} = -3 - 2\gamma_{30} + 2\gamma_{32}. \quad (3.7)$$

Voltemos às quatro equações restantes que temos para simplificar. São elas: (1.23), (1.24), (1.25) e (1.26).

Aplicando (3.5) em (1.23) temos

$$\sum_{i=1}^4 b_i c_i^2 = \frac{1}{3},$$

que já utilizamos. Agora, em (1.24) obtemos

$$\sum_{i=1}^4 b_i c_i^3 = \frac{1}{4},$$

que também já foi utilizada, e em (1.26) temos

$$\sum_{i,j=1}^4 b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}.$$

Portanto, das quatro equações resta-nos apenas (1.25) que após substituirmos os devidos coeficientes torna-se

$$\frac{5}{36}\left(\frac{1}{2}\gamma_{20} - \gamma_{21}\right) - \frac{1}{72}(\gamma_{30} - 2\gamma_{31} - 11\gamma_{32}) = -\frac{1}{12}.$$

Agora, usando (3.6) temos

$$\gamma_{30} = 2 + 5\gamma_{20} - 5\gamma_{32}$$

e substituindo esse resultado em γ_{31} dado por (3.6) e em β_{31} dado por (3.7) obtemos

$$\gamma_{31} = 8 + 5\gamma_{20} - 8\gamma_{32} \quad e \quad \beta_{31} = -7 - 10\gamma_{20} + 12\gamma_{32}.$$

Como $\beta_{j0} + \beta_{j1} = 1$, $j = 2, 3$, também encontramos que

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

e

$$\beta_{30} = 1 - \beta_{31} \implies \beta_{30} = 8 + 10\gamma_{20} - 12\gamma_{32}.$$

Sendo assim, encontramos os coeficientes dessa família de métodos, em função dos dois parâmetros, γ_{20} e γ_{32} , que também podem ser identificados por s e t , respectivamente. Então, substituindo esses coeficientes em (3.1), (3.2) e (3.3), obtemos

$$y_{n+1} = y_n + h\left[\frac{3}{8}f(x_n, y_n) + \frac{19}{24}f(x_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{5}{24}f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \frac{1}{24}f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3})\right], \quad (3.8)$$

onde

$$\hat{y}_{n+2} = (1 + 2s)y_n - 2s y_{n+1} + h[sf(x_n, y_n) + (2 + s)f(x_{n+1}, y_{n+1})] \quad (3.9)$$

e

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+3} = & (8 + 10s - 12t)y_n + (-7 - 10s + 12t)y_{n+1} + h[(2 + 5s - 5t)f(x_n, y_n) + \\ & (8 + 5s - 8t)f(x_{n+1}, y_{n+1}) + tf(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

3.2 Análise da Estabilidade

Ao aplicarmos essa família de métodos à equação linear teste (1.41), obtemos

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

com $\hat{h} = h\lambda$, onde por (2.7)

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + (\alpha_0 + \alpha_2\beta_{20} + \alpha_3\beta_{30})\hat{h} + (\alpha_2\gamma_{20} + \alpha_3\gamma_{30} + \alpha_3\beta_{20}\gamma_{32})\hat{h}^2 + \alpha_3\gamma_{32}\gamma_{20}\hat{h}^3}{1 - (\alpha_1 + \alpha_2\beta_{21} + \alpha_3\beta_{31})\hat{h} - (\alpha_2\gamma_{21} + \alpha_3\gamma_{31} + \alpha_3\beta_{21}\gamma_{32})\hat{h}^2 - \alpha_3\gamma_{32}\gamma_{21}\hat{h}^3}$$

e então

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + (1/2 - t/2)\hat{h} + (1/12 - t/6 + st/12)\hat{h}^2 + (st/24)\hat{h}^3}{1 - (1/2 + t/2)\hat{h} + (1/12 + t/3 + st/12)\hat{h}^2 - t(1/12 + s/24)\hat{h}^3}. \quad (3.11)$$

Como estamos trabalhando com uma família de métodos com dois parâmetros, fica difícil determinarmos as propriedades de estabilidade de uma forma geral. Por isso, nos restringiremos a algumas análises particulares e à obtenção de métodos **A** - ou **L** - estáveis.

Pelo fato da função de estabilidade (3.11) ser uma função racional, podemos trabalhar o conceito de aceitabilidade para uma aproximação racional para a exponencial, desenvolvido no capítulo 1.

Para $t = 0$ obtemos em (3.11), a seguinte expressão

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + (1/2)\hat{h} + (1/12)\hat{h}^2}{1 - (1/2)\hat{h} + (1/12)\hat{h}^2} \quad (3.12)$$

e o parâmetro s fica livre. Sendo a função de estabilidade (3.12) uma aproximação de Padé, $\hat{R}_2^2(\hat{h})$ para a exponencial e **A-aceitável**, concluímos que essa família de métodos com um parâmetro é **A-estável**.

Agora, para $t \neq 0$, tomando (3.11) e a condição

$$\lim_{\text{Re } \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| \leq 1$$

encontramos que

$$\lim_{\text{Re } \hat{h} \rightarrow -\infty} R(\hat{h}) = \frac{s}{-2-s}.$$

Então, a desigualdade

$$\left| \frac{s}{-2-s} \right| \leq 1$$

se verifica somente para $s \geq -1$. Logo, para esses valores de s e t temos

$$|R(\hat{h})| < 1,$$

com $\text{Re } \hat{h} < 0$, ou seja, os métodos são **A-estáveis**.

Com o propósito de obtermos métodos com a propriedade adicional da **L - estabilidade**, olhamos para a função de estabilidade dada por (3.11) e verificamos que métodos **L - estáveis** apenas serão possíveis quando $s = 0$, pois a função de estabilidade toma a forma

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + (1/2 - t/2)\hat{h} + (1/12 - t/6)\hat{h}^2}{1 - (1/2 + t/2)\hat{h} + (1/12 + t/3)\hat{h}^2 - (t/12)\hat{h}^3}, \quad (3.13)$$

com $t \neq 0$, e a condição

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

é verificada.

Podemos tomar valores específicos para t e assim obtermos métodos particulares dessa família. Se escolhermos $t = \frac{1}{5}$, verificamos por (3.13) que a função de estabilidade é

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

que é uma aproximação de Padé $\hat{R}_3^2(\hat{h})$ de quinta ordem e **L - aceitável**.

Em geral, o método é de quinta ordem quando aplicado a problemas lineares sempre que $5t(1 + s) = 1$, pois de

$$R(\hat{h}) = \exp(\hat{h}) + O(\hat{h}^6)$$

temos, substituindo (3.11), cujo numerador vamos expressar por $P(\hat{h})$ e o denominador por $Q(\hat{h})$, a seguinte expressão

$$P(\hat{h}) - Q(\hat{h})(1 + \hat{h} + \frac{\hat{h}^2}{2} + \frac{\hat{h}^3}{6} + \frac{\hat{h}^4}{24} + \dots) = O(\hat{h}^6)$$

que ao desenvolvermos, sobra apenas termos multiplicados por $\hat{h}^5$ em diante. Zerando então o termo multiplicado por $\hat{h}^5$, temos

$$\frac{5t + 5st - 1}{720} = 0 \implies 5t(1 + s) = 1. \quad (3.14)$$

3.3 Cálculo da Ordem de Estágio

Como vimos no início desse capítulo, foi conveniente utilizarmos a condição de simplificação (3.5), durante a construção da família de métodos ótimos com dois parâmetros,

condição essa necessária para garantir ordem de estágio mínima igual a 2.

Mostremos então que os respectivos métodos tem realmente ordem de estágio 2. De (3.8), (3.9) e (3.10), temos que

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3/8 & 19/24 & -5/24 & 1/24 \\ s/4 & -7s/12 & 5s/12 & -s/12 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix},$$

onde

$$\begin{aligned} a_{41} &= (-5 + 10s - 4t)/8, & a_{42} &= (59 - 70s + 36t)/24, \\ a_{43} &= (35 + 50s - 36t)/24, & a_{44} &= (-7 - 10s + 12t)/24. \end{aligned}$$

Assim, desenvolvendo (3.5), ficamos com

$$\frac{c^2}{2} = Ac \implies c^2 = 2Ac \implies \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \\ 9 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3/8 & 19/24 & -5/24 & 1/24 \\ s/4 & -7s/12 & 5s/12 & -s/12 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

que é válida.

Agora, verifiquemos se (2.6) é válida para $k = 2$. Desenvolvendo temos que

$$\frac{c^3}{3} = Ac^2 \implies c^3 = 3Ac^2 \implies \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 8 \\ 27 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3/8 & 19/24 & -5/24 & 1/24 \\ s/4 & -7s/12 & 5s/12 & -s/12 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \\ 9 \end{pmatrix}$$

que não é verdade, pois

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 8 \\ 27 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 6 + s \\ (136 + 40s)/8 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

para $s \neq 2$.

Logo, como (2.6) é válida somente para $k = 1$, a ordem de estágio é $q = 2$, pois $k = q - 1 = 1$.

Porém, note que se em (3.14) tomarmos $s = 2$ temos que (2.6) é válida para $k = 2$ e assim a ordem de estágio torna-se $q = 3$, ou seja, temos então uma família de métodos com um parâmetro dada por

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{3}{8} f(x_n, y_n) + \frac{19}{24} f(x_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{5}{24} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \frac{1}{24} f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3}) \right],$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+2} &= 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f(x_n, y_n) + 4f(x_{n+1}, y_{n+1})], \\ \hat{y}_{n+3} &= (28 - 12t)y_n + (-27 + 12t)y_{n+1} + h[(12 - 5t)f(x_n, y_n) + \\ &\quad (18 - 8t)f(x_{n+1}, y_{n+1}) + tf(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})] \end{aligned}$$

com ordem de estágio 3.

Capítulo 4

Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Cinco

Neste capítulo, encontraremos duas classes diferentes de métodos estendidos com ordem cinco. Construiremos a primeira classe com um pouco mais de dificuldade que os métodos do capítulo anterior, mas seguiremos o mesmo raciocínio, até mesmo na análise da estabilidade e no cálculo da ordem de estágio. Estaremos introduzindo a definição de **I-estabilidade** e ilustraremos a figura correspondente a *order star*. Na construção da segunda classe, iremos utilizar uma condição de simplificação a mais devido ao fato dessa classe ter ordem de estágio 3.

4.1 Primeira Classe

A primeira classe é constituída pela seguinte família de métodos estendidos de passo um ótimos com dois parâmetros

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f_n + \alpha_1 f_{n+1} + \alpha_2 \hat{f}_{n+2} + \alpha_3 \hat{f}_{n+3} + \alpha_4 \hat{f}_{n+4}] \quad (4.1)$$

com

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

onde

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20}y_n + \beta_{21}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f_n + \gamma_{21}f_{n+1}], \quad (4.2)$$

$$\hat{y}_{n+3} = \beta_{30}y_n + \beta_{31}y_{n+1} + h[\gamma_{30}f_n + \gamma_{31}f_{n+1} + \gamma_{32}\hat{f}_{n+2}], \quad (4.3)$$

$$\hat{y}_{n+4} = \beta_{40}y_n + \beta_{41}y_{n+1} + h[\gamma_{40}f_n + \gamma_{41}f_{n+1} + \gamma_{42}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{43}\hat{f}_{n+3}], \quad (4.4)$$

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

Seguindo o que temos feito até agora, iniciamos a construção dessa família de métodos encontrando os coeficientes α_i da fórmula principal (4.1) a partir das seguintes condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 5

$$\sum_{i=1}^5 b_i c_i^k = \sum_{i=0}^4 \alpha_i i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4,$$

que é um sistema de equações lineares com solução

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

Partindo agora para a obtenção dos coeficientes das fórmulas secundárias (4.2), (4.3) e (4.4), tomamos a condição da soma das linhas

$$c_i = \sum_{j=1}^5 a_{ij}, \quad i = 1, 2, 3, 4, 5,$$

que também forma um sistema, de onde tiramos três equações que ao substituirmos os coeficientes α_i , resultam em

$$\beta_{21} = 2 - \gamma_{20} - \gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 3 - \gamma_{30} - \gamma_{31} - \gamma_{32}, \quad \beta_{41} = 4 - \gamma_{40} - \gamma_{41} - \gamma_{42} - \gamma_{43}. \quad (4.5)$$

Com o objetivo de obtermos os coeficientes γ_{ij} , vamos trabalhar com as doze equações restantes das condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 5. Para diminuirmos esse número de equações, tomemos a seguinte condição de simplificação

$$\frac{c^2}{2} = Ac, \quad (4.6)$$

necessária para termos ordem de estágio mínima igual a 2. Porém, ao desenvolvermos essa

condição, encontramos três equações que ao resolvermos substituindo os α_i , fornecem

$$\beta_{21} = 4 - 2\gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 9 - 2\gamma_{31} - 4\gamma_{32}, \quad \beta_{41} = 16 - 2\gamma_{41} - 4\gamma_{42} - 6\gamma_{43}. \quad (4.7)$$

De β_{21} acima podemos notar que

$$\gamma_{21} = \frac{4 - \beta_{21}}{2}. \quad (4.8)$$

Assim, substituindo esse resultado em β_{21} dado por (4.5), obtemos

$$\gamma_{20} = -\frac{\beta_{21}}{2}.$$

Como $\beta_{20} + \beta_{21} = 1$, temos também que

$$\beta_{20} = 1 - \beta_{21}.$$

De β_{41} dado por (4.7), podemos tirar que

$$\gamma_{43} = \frac{16 - \beta_{41} - 2\gamma_{41} - 4\gamma_{42}}{6}. \quad (4.9)$$

As doze equações que temos para trabalhar são as seguintes: (1.29), (1.30), (1.31), (1.32), (1.33), (1.34), (1.35), (1.36), (1.37), (1.38), (1.39) e (1.40).

Ao simplificarmos estas equações, usando (4.6), obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^5 b_i c_i^2 &= \frac{1}{3}, \quad \sum_{i=1}^5 b_i c_i^3 = \frac{1}{4}, \quad \sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \quad \sum_{i=1}^5 b_i c_i^4 = \frac{1}{5}, \\ \sum_{i,j=1}^5 b_i c_i a_{ij} c_j^2 &= \frac{1}{15}, \quad \sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20}, \quad \sum_{i,j,k=1}^5 b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60}, \end{aligned}$$

das quais retemos somente aquelas que ainda não foram trabalhadas, são elas

$$\sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \quad \sum_{i,j=1}^5 b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15}, \quad \sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20}, \quad \sum_{i,j,k=1}^5 b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60}.$$

Agora, ao considerarmos as três primeiras equações, substituindo β_{31} , γ_{21} e γ_{43} dados, respectivamente por (4.7), (4.8) e (4.9), encontramos

$$\begin{aligned} \frac{11}{180}\beta_{21} + \frac{53}{1080}\gamma_{31} + \frac{53}{135}\gamma_{32} + \frac{133}{4320}\beta_{41} + \frac{19}{360}\gamma_{41} + \frac{19}{360}\gamma_{42} &= \frac{383}{540} \\ \frac{11}{90}\beta_{21} + \frac{53}{360}\gamma_{31} + \frac{53}{45}\gamma_{32} + \frac{133}{1080}\beta_{41} + \frac{19}{90}\gamma_{41} + \frac{19}{90}\gamma_{42} &= \frac{1319}{540} \\ \frac{11}{120}\beta_{21} + \frac{53}{720}\gamma_{31} + \frac{371}{360}\gamma_{32} + \frac{323}{2880}\beta_{41} + \frac{19}{90}\gamma_{41} + \frac{19}{72}\gamma_{42} &= \frac{383}{180}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Tomando a quarta equação ficamos com uma expressão não linear extensa, por isso, a apresentamos no apêndice (equação (A.1)).

Trabalhando então com as três equações de (4.10), isolamos γ_{31} , γ_{41} e β_{41} do lado esquerdo. Escalonamos o sistema de três equações o qual fornece os seguintes resultados:

$$\begin{aligned}\gamma_{31} &= \frac{2(213 - 66\beta_{21} - 212\gamma_{32})}{53}, \\ \beta_{41} &= \frac{-2392 + 1320\beta_{21} + 3816\gamma_{32} + 456\gamma_{42}}{95}, \\ \gamma_{41} &= \frac{1962 - 660\beta_{21} - 2226\gamma_{32} - 361\gamma_{42}}{95}.\end{aligned}$$

Agora, se substituirmos γ_{31} em β_{31} na equação (4.7), obtemos

$$\beta_{31} = \frac{3(-125 + 88\beta_{21} + 212\gamma_{32})}{53}$$

e pelo fato de $\beta_{30} + \beta_{31} = 1$, temos que

$$\beta_{30} = \frac{428 - 264\beta_{21} - 636\gamma_{32}}{53}.$$

Voltando em β_{31} e β_{41} dado por (4.5) e em γ_{43} dado por (4.9) e substituindo os coeficientes que acabamos de obter, encontramos

$$\begin{aligned}\gamma_{30} &= \frac{108 - 132\beta_{21} - 265\gamma_{32}}{53}, \\ \gamma_{40} &= \frac{812 - 660\beta_{21} - 1696\gamma_{32} - 171\gamma_{42}}{95}, \\ \gamma_{43} &= \frac{-2 + 106\gamma_{32} - 19\gamma_{42}}{95}.\end{aligned}$$

Por fim, resta trabalharmos com a equação não linear onde, substituindo todos os coeficientes obtidos até o momento, encontramos

$$\frac{-11\beta_{21}}{23850} - \frac{\gamma_{32}}{2700} - \frac{\beta_{21}\gamma_{32}}{10800} + \frac{19\gamma_{42}}{286200} + \frac{19\beta_{21}\gamma_{42}}{1144800} = \frac{22}{11925}$$

que resolvendo fornece

$$\gamma_{42} = \frac{2(264 + 53\gamma_{32})}{19}.$$

Vamos então substituir esse último resultado nos coeficientes onde ele aparece.

Logo, obtemos

$$\begin{aligned}\beta_{41} &= \frac{8(257 + 33\beta_{21} + 159\gamma_{32})}{19}, \quad \gamma_{40} = \frac{-2(394 + 66\beta_{21} + 265\gamma_{32})}{19}, \\ \gamma_{41} &= \frac{-2(807 + 66\beta_{21} + 424\gamma_{32})}{19}, \quad \gamma_{43} = -\frac{106}{19}.\end{aligned}$$

E, novamente, de $\beta_{40} + \beta_{41} = 1$ temos que

$$\beta_{40} = \frac{-3(679 + 88\beta_{21} + 424\gamma_{32})}{19}.$$

Portanto, obtemos todos os coeficientes dessa família de métodos em função dos parâmetros β_{21} e γ_{32} , também denotados por s e t , respectivamente. Logo, substituindo esses coeficientes em (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4), teremos o método

$$y_{n+1} = y_n + h\left[\frac{251}{720}f_n + \frac{323}{360}f_{n+1} - \frac{11}{30}\hat{f}_{n+2} + \frac{53}{360}\hat{f}_{n+3} - \frac{19}{720}\hat{f}_{n+4}\right],$$

onde

$$\hat{y}_{n+2} = (1-s)y_n + sy_{n+1} + h\left[-\frac{s}{2}f_n + \left(\frac{4-s}{2}\right)f_{n+1}\right],$$

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+3} = & \left(\frac{428 - 264s - 636t}{53}\right)y_n + \left(\frac{3(-125 + 88s + 212t)}{53}\right)y_{n+1} + \\ & h\left[\left(\frac{108 - 132s - 265t}{53}\right)f_n + \left(\frac{2(213 - 66s - 212t)}{53}\right)f_{n+1} + t\hat{f}_{n+2}\right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+4} = & \left(\frac{-3(679 + 88s + 424t)}{19}\right)y_n + \left(\frac{8(257 + 33s + 159t)}{19}\right)y_{n+1} + \\ & h\left[\left(\frac{-2(394 + 66s + 265t)}{19}\right)f_n + \left(\frac{-2(807 + 66s + 424t)}{19}\right)f_{n+1} + \right. \\ & \left. \left(\frac{2(264 + 53t)}{19}\right)\hat{f}_{n+2} - \frac{106}{19}\hat{f}_{n+3}\right]. \end{aligned}$$

4.1.1 Análise da Estabilidade

Aplicando essa família de métodos à equação teste (1.41), temos

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

onde $\hat{h} = h\lambda$, e por (2.7)

$$R(\hat{h}) = \frac{P(\hat{h})}{Q(\hat{h})}$$

onde,

$$\begin{aligned} P(\hat{h}) = & 1 + (\alpha_0 + \alpha_2\beta_{20} + \alpha_3\beta_{30} + \alpha_4\beta_{40})\hat{h} + (\alpha_2\gamma_{20} + \alpha_3(\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{32}) + \alpha_4(\gamma_{40} + \\ & \beta_{20}\gamma_{42} + \beta_{30}\gamma_{43}))\hat{h}^2 + (\alpha_3\gamma_{32}\gamma_{20} + \alpha_4(\gamma_{42}\gamma_{20} + \gamma_{43}\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{43}\gamma_{32}))\hat{h}^3 + \\ & \alpha_4\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{20}\hat{h}^4 \end{aligned}$$

e

$$Q(\hat{h}) = 1 - (\alpha_1 + \alpha_2\beta_{21} + \alpha_3\beta_{31} + \alpha_4\beta_{41})\hat{h} - (\alpha_2\gamma_{21} + \alpha_3(\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{32}) + \alpha_4(\gamma_{41} + \beta_{21}\gamma_{42} + \beta_{31}\gamma_{43}))\hat{h}^2 - (\alpha_3\gamma_{32}\gamma_{21} + \alpha_4(\gamma_{42}\gamma_{21} + \gamma_{43}\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{43}\gamma_{32}))\hat{h}^3 - \alpha_4\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{21}\hat{h}^4.$$

Logo, com os valores calculados na seção anterior, temos

$$P(\hat{h}) = 1 + 4\hat{h} + ((111 - 106t)/60)\hat{h}^2 + ((108 - 212t - 53st)/360)\hat{h}^3 - (53st/720)\hat{h}^4 \quad (4.11)$$

e

$$Q(\hat{h}) = 1 + 3\hat{h} - ((99 + 106t)/60)\hat{h}^2 - ((-102 - 424t + 53st)/360)\hat{h}^3 - (212t - 53st/720)\hat{h}^4. \quad (4.12)$$

Determinar as propriedades de estabilidade para essa família de métodos, como no caso do método de ordem 4, é algo bastante complicado, já que também estamos trabalhando com uma família de métodos que dependem de dois parâmetros. Por isso, faremos apenas algumas análises.

Podemos obter métodos **A-estáveis**, verificando que, como

$$\lim_{\operatorname{Re} \hat{h} \rightarrow -\infty} R(\hat{h}) = \frac{-s}{-4 + s}$$

então,

$$\left| \frac{s}{4 - s} \right| \leq 1$$

resulta em $s \leq 2$.

Já, a condição da **I-estabilidade** fornece restrições ao parâmetro t e é verificada usando (1.49) e (1.50). Tomando $P(\hat{h})$ dado por (4.11), substituímos $\hat{h}$ por iy , obtendo

$$1 + 4iy + ((-111 + 106t)/60)y^2 + ((-108 + 212t + 53st)/360)iy^3 - (53st/720)y^4$$

e por $-iy$,

$$1 - 4iy + ((-111 + 106t)/60)y^2 - ((-108 + 212t + 53st)/360)iy^3 - (53st/720)y^4.$$

Multiplicando esses dois resultados, temos

$$\frac{1}{518400}(518400 + 17280(369 + 106t)y^2 + 144(3681 + 106t(-62 + 35s + 106t))y^4 + 4(11664 + 53t((-864 + 450s) + 53(16 + (-4 + s)s)t))y^6 + 2809s^2t^2y^8). \quad (4.13)$$

Tomando, agora, $Q(\hat{h})$ dado por (4.12) e também substituindo $\hat{h}$ por iy , temos

$$1 + 3iy + ((99 + 106t))/60y^2 + ((-102 - 424t + 53st)/360)iy^3 - (212t - 53st/720)y^4$$

e por $-iy$, encontramos

$$1 - 3iy + ((99 + 106t))/60y^2 - ((-102 - 424t + 53st)/360)iy^3 - (212t - 53st/720)y^4.$$

Fazendo a multiplicação desses dois resultados, obtemos

$$\frac{1}{518400}(518400 + 17280(369 + 106t)y^2 + 144(3681 + 106t(-62 + 35s + 106t))y^4 + 4(10404 + 53t(-744 + 390s + 53(16 + (-4 + s)s)t))y^6 + 2809(-4 + s)^2t^2y^8). \quad (4.14)$$

Assim, fazendo a diferença entre (4.14) e (4.13), temos o polinômio

$$E(y) = \frac{(-630 - 1590(-2 + s)t)y^6}{64800} - \frac{2809(-2 + s)t^2y^8}{64800}, \quad (4.15)$$

que deve ser não negativo. Então, analisemos quando

$$E(y) \geq 0. \quad (4.16)$$

Já concluímos anteriormente, que $s \leq 2$. Tomemos $s < 2$ pois, para $s = 2$, $E(y) < 0$. Assim, temos que o coeficiente de y^8 em (4.15) satisfaz

$$-2809(-2 + s)t^2 > 0$$

e então para satisfazer (4.16), tomemos

$$\begin{aligned} -630 - 1590(-2 + s)t &> 0 \implies 1590(2 - s)t > 630 \implies t > \frac{630}{1590(2 - s)} \\ \implies t &> \frac{21}{106 - 53s}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Logo, podemos concluir que para $0 \leq s < 2$, temos de (4.17) que

$$t \geq \frac{21}{106},$$

e assim, (4.16) é válido.

Porém, se tomarmos $s = 0$ e substituirmos em (4.11) e (4.12), obtemos

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + 4\hat{h} + ((111 - 106t)/60)\hat{h}^2 + ((108 - 212t)/360)\hat{h}^3}{1 + 3\hat{h} - ((99 + 106t)/60)\hat{h}^2 - ((-102 - 424t)/360)\hat{h}^3 - (212t)\hat{h}^4}. \quad (4.18)$$

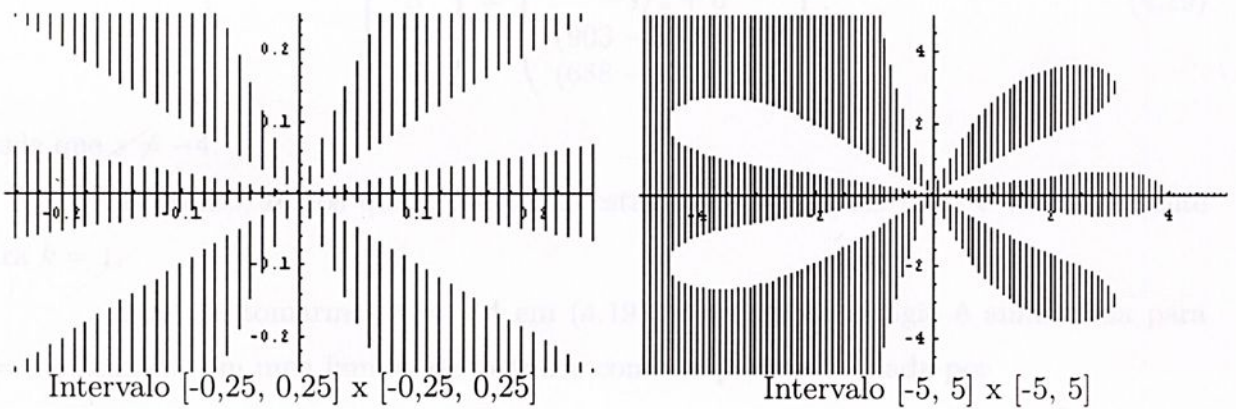
Assim, se considerarmos também a restrição sobre t , teremos que os métodos serão **L - estáveis**, já que

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

Em particular, se fizermos $t = \frac{54}{265}$ em (4.18), encontramos

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + 4\hat{h} + 149/100\hat{h}^2 + 9/50\hat{h}^3}{1 + 3\hat{h} - 201/100\hat{h}^2 + 157/300\hat{h}^3 - 3/50\hat{h}^4} = \frac{5 + 18\hat{h}}{5 + 18\hat{h}} \hat{R}_3^2(\hat{h}),$$

a qual é **L - aceitável**, e podemos verificar na figura abaixo sua *order star*:



4.1.2 Cálculo da Ordem de Estágio

Novamente, como para os métodos de ordem 4, supomos que os métodos de ordem 5 que queríamos obter tinham ordem de estágio 2, pois usamos a condição (4.6) para simplificar o número de equações que tínhamos para serem trabalhadas.

Verificando, da mesma maneira que fizemos anteriormente, que essa família de métodos têm realmente ordem de estágio 2, tomamos

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 251/720 & 323/360 & -11/30 & 53/360 & -19/720 \\ -109s/720 & (143s + 720)/360 & -11s/30 & 53s/360 & -19s/720 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{pmatrix},$$

onde

$$\begin{aligned} a_{41} &= (-5455 - 9592s - 10388t)/12720, & a_{42} &= (10745 + 12584s + 17596t)/6360, \\ a_{43} &= (1375 - 968s - 1802t)/530, & a_{44} &= (-125 + 88s + 212t)/120, \\ a_{45} &= (2375 - 1672s - 4028t)/12720, & a_{51} &= (-6413 - 3597s - 7791t)/1710, \\ a_{52} &= (10381 + 4719s + 13197t)/855, & a_{53} &= (-3388 - 1452s - 5406t)/285, \\ a_{54} &= (8851 + 1749s + 8427t)/855, & a_{55} &= (-257 - 33s - 159t)/90 \end{aligned}$$

e desenvolvemos (4.6), encontrando que $c^2 = 2Ac$ é válida.

Agora, ao verificarmos se $c^3 = 3Ac^2$, chegamos que

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 8 \\ 27 \\ 64 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -s/2 + 6 \\ (903 - 132s)/53 \\ (688 - 132s)/19 \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

desde que $s \neq -4$.

Portanto, temos que a ordem de estágio é $q = 2$, pois (2.6) é válida somente para $k = 1$.

Mas, se tomarmos $s = -4$ em (4.19), a ordem de estágio é aumentada para $q = 3$ e ficamos com uma família de métodos com um parâmetro dada por

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{251}{720} f_n + \frac{323}{360} f_{n+1} - \frac{11}{30} \hat{f}_{n+2} + \frac{53}{360} \hat{f}_{n+3} - \frac{19}{720} \hat{f}_{n+4} \right],$$

onde

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

$$\hat{y}_{n+3} = (28 - 12t)y_n + (-27 + 12t)y_{n+1} + h[(12 - 5t)f_n + (18 - 8t)f_{n+1} + t\hat{f}_{n+2}]$$

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+4} &= \left(\frac{-3(327 + 424t)}{19} \right) y_n + \left(\frac{8(125 + 159t)}{19} \right) y_{n+1} + h \left[\left(\frac{-2(130 + 265t)}{19} \right) f_n + \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{-2(543 + 424t)}{19} \right) f_{n+1} + \left(\frac{2(264 + 53t)}{19} \right) \hat{f}_{n+2} - \frac{106}{19} \hat{f}_{n+3} \right] \end{aligned}$$

que também corresponde à família de métodos referida por Chawla *et al.* [5], nossa segunda classe.

4.2 Segunda Classe

A diferença básica que temos entre a primeira classe e a segunda é em relação à ordem de estágio. Como a segunda classe possui a ordem de estágio $q = 3$, temos duas condições de simplificação para serem utilizadas, são elas

$$c^2 = 2Ac \text{ e } c^3 = 3Ac^2. \quad (4.20)$$

Dessa forma, conseguimos diminuir ainda mais o número de equações utilizadas na construção da família de métodos.

Além disso, ao desenvolvermos as condições (4.20), temos da primeira, como vimos anteriormente, o resultado (4.7) e desenvolvendo a segunda da mesma forma, temos

$$\beta_{21} = 8 - 3\gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 27 - 3\gamma_{31} - 12\gamma_{32}, \quad \beta_{41} = 64 - 3\gamma_{41} - 12\gamma_{42} - 27\gamma_{43}. \quad (4.21)$$

Logo, substituindo β_{21} dado por (4.5) em (4.7) e (4.21), resolvemos o sistema, encontrando

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

Assim, voltando em β_{21} dado por (4.5), obtemos

$$\beta_{21} = -4$$

e de $\beta_{20} + \beta_{21} = 1$, encontramos

$$\beta_{20} = 5.$$

De maneira análoga, substituindo β_{31} dado por (4.5) em (4.7) e (4.21), encontramos

$$\gamma_{30} = 12 - 5\gamma_{32}, \quad \gamma_{31} = 18 - 8\gamma_{32}, \quad \beta_{30} = 28 - 12\gamma_{32}, \quad \beta_{31} = -27 + 12\gamma_{32}.$$

E por último, substituindo β_{41} dado por (4.5) em (4.7) e (4.21), temos as equações

$$\begin{aligned} -\gamma_{40} + \gamma_{41} + 3\gamma_{42} + 5\gamma_{43} &= 12 \\ -\gamma_{40} + 2\gamma_{41} + 11\gamma_{42} + 26\gamma_{43} &= 60. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Agora, usando as condições (4.20) para simplificarmos as doze equações das condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 5, obtemos

$$\sum_{i=1}^5 b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{i=1}^5 b_i c_i^3 = \frac{1}{4}, \quad \sum_{i=1}^5 b_i c_i^4 = \frac{1}{5}, \quad \sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20},$$

onde as três primeiras já foram utilizadas. Logo, resta-nos apenas a equação

$$\sum_{i,j=1}^5 b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20}.$$

Ao desenvolvermos essa equação, já substituindo os resultados obtidos, encontramos

$$\frac{19}{2880} \gamma_{40} - \frac{19}{960} \gamma_{41} - \frac{589}{2880} \gamma_{42} - \frac{2033}{2880} \gamma_{43} = -\frac{507}{720} - \frac{53}{120} \gamma_{32}.$$

Assim, juntando as equações (4.22) a essa última e passando as parcelas que envolvem o coeficiente γ_{43} para o lado direito da igualdade, obtemos, considerando o escalonamento do sistema

$$\begin{aligned} \gamma_{40} &= \frac{694 - 530\gamma_{32} + 171\gamma_{43}}{19}, \quad \gamma_{41} = \frac{928 - 848\gamma_{32} + 361\gamma_{43}}{19}, \\ \gamma_{42} &= \frac{-2 + 106\gamma_{32} - 95\gamma_{43}}{19}. \end{aligned}$$

Substituindo esses resultados em β_{41} dado por (4.21), encontramos

$$\beta_{41} = \frac{8(-193 + 159\gamma_{32} - 57\gamma_{43})}{19},$$

e de $\beta_{40} + \beta_{41} = 1$, obtemos

$$\beta_{40} = \frac{3(521 - 424\gamma_{32} + 152\gamma_{43})}{19}.$$

Portanto, da mesma forma que na classe anterior, obtemos todos os coeficientes dessa família de métodos em função de dois parâmetros, γ_{32} e γ_{43} , que vamos denotar respectivamente por t e s . Então, substituindo os coeficientes em (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4), temos

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{251}{720} f_n + \frac{323}{360} f_{n+1} - \frac{11}{30} \hat{f}_{n+2} + \frac{53}{360} \hat{f}_{n+3} - \frac{19}{720} \hat{f}_{n+4} \right],$$

onde

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

$$\hat{y}_{n+3} = (28 - 12t)y_n + (-27 + 12t)y_{n+1} + h[(12 - 5t)f_n + (18 - 8t)f_{n+1} + t \hat{f}_{n+2}],$$

$$\hat{y}_{n+4} = \left(\frac{3(521 + 152s - 424t)}{19}\right)y_n + \left(\frac{8(-193 - 57s + 159t)}{19}\right)y_{n+1} + h\left[\left(\frac{694 + 171s - 530t}{19}\right)f_n + \left(\frac{928 + 361s - 848t}{19}\right)f_{n+1} + \left(\frac{-2 - 95s + 106t}{19}\right)\hat{f}_{n+2} + s\hat{f}_{n+3}\right].$$

4.2.1 Análise da Estabilidade

Analogamente, aplicamos essa família de métodos à equação teste (1.41). Assim,

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

com $\hat{h} = h\lambda$ e

$$R(\hat{h}) = \frac{360 + (168 - 228s)\hat{h} + (30 - 114s + 114st)\hat{h}^2 + (2 - 19s)\hat{h}^3 - (19st)\hat{h}^4}{360 - (192 + 228s)\hat{h} - (-42 - 114s - 114st)\hat{h}^2 - (4 + 19s + 114st)\hat{h}^3 + (38st)\hat{h}^4}. \quad (4.23)$$

Como na classe anterior, também veremos, nessa classe, que determinar as propriedades de estabilidade para essa família de métodos, é uma árdua tarefa. Sendo assim, vamos nos restringir a apenas algumas observações.

Para $s \neq 0$ e $t \neq 0$ temos métodos **A-estáveis**, mas não temos métodos **L-estáveis**, pois

$$\lim_{\text{Re } \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| = \frac{1}{2}.$$

Assim, com o intuito de obtermos métodos **L-estáveis**, percebemos que ao tomarmos $t = 0$ em (4.23), temos

$$R(\hat{h}) = \frac{360 + (168 - 228s)\hat{h} + (30 - 114s)\hat{h}^2 + (2 - 19s)\hat{h}^3}{360 - (192 + 228s)\hat{h} - (-42 - 114s)\hat{h}^2 - (4 + 19s)\hat{h}^3}. \quad (4.24)$$

Logo, notamos que ao zerarmos o coeficiente de $\hat{h}^3$ no numerador, obtemos $s = \frac{2}{19}$. Dessa forma, a função de estabilidade irá tornar-se

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

que é a aproximação de Padé $\hat{R}_3^2(\hat{h})$, que por sua vez é **L-aceitável**. Portanto, o método

obtido com esses valores para t e s é **L - estável** e é dado por

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{251}{720} f_n + \frac{323}{360} f_{n+1} - \frac{11}{30} \hat{f}_{n+2} + \frac{53}{360} \hat{f}_{n+3} - \frac{19}{720} \hat{f}_{n+4} \right],$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+2} &= 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f_n + 4f_{n+1}], \\ \hat{y}_{n+3} &= 28y_n - 27y_{n+1} + h[12f_n + 18f_{n+1}], \\ \hat{y}_{n+4} &= \frac{1611}{19}y_n - \frac{1592}{19}y_{n+1} + h \left[\frac{712}{19}f_n + \frac{966}{19}f_{n+1} - \frac{12}{19}\hat{f}_{n+2} + \frac{2}{19}\hat{f}_{n+3} \right]. \end{aligned}$$

Ainda, com $t = 0$, podemos garantir a **A₀-estabilidade**, isto é, estabilidade para $\hat{h} \in \mathbb{R}^-$, na qual de acordo com Chawla *et al.* [5] temos a restrição $s \geq -\frac{1}{19}$. Isso segue da expressão da função de estabilidade (4.24) e da condição

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

uma vez que

$$\lim_{\operatorname{Re} \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| = \left| \frac{-2 + 19s}{4 + 19s} \right|,$$

o que produz $|R(\hat{h})| < 1$.

Também teremos $s \geq -\frac{1}{19}$ para a **I-estabilidade**, pois, tomando o numerador de (4.24) e substituindo $\hat{h}$ por iy , temos

$$360 - 12i(-14 + 19s)y + 6(-5 + 19s)y^2 + i(-2 + 19s)y^3$$

e por $-iy$, encontramos

$$360 + 12i(-14 + 19s)y + 6(-5 + 19s)y^2 + i(2 - 19s)y^3.$$

Assim, multiplicando essas duas expressões, obtemos

$$129600 + 144(46 + 19s(2 + 19s))y^2 + 228(1 + s(2 + 19s))y^4 + (2 - 19s)^2y^6. \quad (4.25)$$

Agora tomando o denominador de (4.24) e fazendo as mesmas substituições, encontramos

$$360 - 12i(16 + 19s)y - 6(7 + 19s)y^2 + i(4 + 19s)y^3$$

e

$$360 + 12i(16 + 19s)y - 6(7 + 19s)y^2 - i(4 + 19s)y^3.$$

Novamente multiplicando essas duas expressões, temos

$$129600 + 144(46 + 19s(2 + 19s))y^2 + 228(1 + s(2 + 19s))y^4 + (4 + 19s)^2y^6. \quad (4.26)$$

Por fim, fazendo a diferença de (4.26) por (4.25), ficamos com o polinômio

$$E(y) = 12(1 + 19s)y^6,$$

que deve ser não negativo, como foi visto em (1.49)-(1.50). Logo,

$$12(1 + 19s) \geq 0 \implies 12 + 228s \geq 0 \implies 228s \geq -12 \implies s \geq -\frac{1}{19}.$$

Já para o caso $s = 0$, temos por (4.23) a seguinte função de estabilidade

$$R(\hat{h}) = \frac{360 + 168\hat{h} + 30\hat{h}^2 + 2\hat{h}^3}{360 - 192\hat{h} + 42\hat{h}^2 - 4\hat{h}^3},$$

que independe de t .

Nesse caso, obtemos

$$\lim_{\operatorname{Re} \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| = \frac{1}{2},$$

o que nos fornece $|R(\hat{h})| < 1$. Assim, o método é **A-estável** e então definido por

$$y_{n+1} = y_n + h\left[\frac{251}{720}f_n + \frac{323}{360}f_{n+1} - \frac{11}{30}\hat{f}_{n+2} + \frac{53}{360}\hat{f}_{n+3} - \frac{19}{720}\hat{f}_{n+4}\right],$$

onde

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

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

$$\hat{y}_{n+4} = \frac{1563}{19}y_n - \frac{1544}{19}y_{n+1} + h\left[\frac{694}{19}f_n + \frac{928}{19}f_{n+1} - \frac{2}{19}\hat{f}_{n+2}\right].$$

Capítulo 5

Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Seis

Construiremos, neste capítulo, os métodos de ordem seis da mesma maneira que fizemos nos casos anteriores. Usaremos um algoritmo particular que fornece as condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 6 pois estas são dificilmente encontradas. A partir desse capítulo, consideraremos a ordem de estágio máxima 3, já que estaremos trabalhando com um número maior de equações.

5.1 Uma Família de Métodos

Para ordem $p = 6$, é possível encontrarmos uma família a dois parâmetros de métodos estendidos de passo um, dada por

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f_n + \alpha_1 f_{n+1} + \alpha_2 \hat{f}_{n+2} + \alpha_3 \hat{f}_{n+3} + \alpha_4 \hat{f}_{n+4} + \alpha_5 \hat{f}_{n+5}] \quad (5.1)$$

com

$$\hat{f}_{n+2} = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}), \quad \hat{f}_{n+3} = f(x_{n+3}, \hat{y}_{n+3}), \quad \hat{f}_{n+4} = f(x_{n+4}, \hat{y}_{n+4}), \quad \hat{f}_{n+5} = f(x_{n+5}, \hat{y}_{n+5})$$

onde

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20} y_n + \beta_{21} y_{n+1} + h[\gamma_{20} f_n + \gamma_{21} f_{n+1}], \quad (5.2)$$

$$\hat{y}_{n+3} = \beta_{30}y_n + \beta_{31}y_{n+1} + h[\gamma_{30}f_n + \gamma_{31}f_{n+1} + \gamma_{32}\hat{f}_{n+2}], \quad (5.3)$$

$$\hat{y}_{n+4} = \beta_{40}y_n + \beta_{41}y_{n+1} + h[\gamma_{40}f_n + \gamma_{41}f_{n+1} + \gamma_{42}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{43}\hat{f}_{n+3}], \quad (5.4)$$

$$\hat{y}_{n+5} = \beta_{50}y_n + \beta_{51}y_{n+1} + h[\gamma_{50}f_n + \gamma_{51}f_{n+1} + \gamma_{52}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{53}\hat{f}_{n+3} + \gamma_{54}\hat{f}_{n+4}], \quad (5.5)$$

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

Continuando o mesmo raciocínio dos capítulos anteriores, construímos essa família de métodos, encontrando primeiramente os coeficientes α_i da fórmula principal (5.1) através das seguintes condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 6

$$\sum_{i=1}^6 b_i c_i^k = \sum_{i=0}^5 \alpha_i i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4, 5,$$

que corresponde a um sistema linear com solução

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

Seguindo para a determinação dos coeficientes das fórmulas secundárias (5.2), (5.3), (5.4) e (5.5), consideremos a condição da soma das linhas

$$c_i = \sum_{j=1}^6 a_{ij}, \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, 6,$$

que corresponde a um sistema, onde temos quatro equações que ao substituirmos os α_i , obtemos

$$\beta_{21} = 2 - \gamma_{20} - \gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 3 - \gamma_{30} - \gamma_{31} - \gamma_{32}, \quad (5.6)$$

$$\beta_{41} = 4 - \gamma_{40} - \gamma_{41} - \gamma_{42} - \gamma_{43}, \quad \beta_{51} = 5 - \gamma_{50} - \gamma_{51} - \gamma_{52} - \gamma_{53} - \gamma_{54}.$$

Agora, com o intuito de encontrarmos os coeficientes γ_{ij} , tomamos as equações das condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 6 que ainda não foram trabalhadas. Para obtermos tais condições de ordem, utilizamos um algoritmo que as forneceu. Como temos trinta e uma equações restantes para trabalharmos, é recomendável utilizarmos as condições de simplificação

$$c^2 = 2Ac \quad \text{e} \quad c^3 = 3Ac^2, \quad (5.7)$$

supondo dessa maneira ordem de estágio máxima igual a 3. Notemos que nesse caso, usamos essa restrição ao invés da ordem de estágio mínima igual a 2 usada nos casos anteriores,

pelo fato de conseguirmos diminuir um número maior de equações.

Desenvolvendo então as equações de (5.7) obtemos oito equações, que resolvidas a partir da substituição dos α_i , resultam em

$$\beta_{21} = 4 - 2\gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 9 - 2\gamma_{31} - 4\gamma_{32}, \quad (5.8)$$

$$\beta_{41} = 16 - 2\gamma_{41} - 4\gamma_{42} - 6\gamma_{43}, \quad \beta_{51} = 25 - 2\gamma_{51} - 4\gamma_{52} - 6\gamma_{53} - 8\gamma_{54}$$

e

$$\beta_{21} = 8 - 3\gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 27 - 3\gamma_{31} - 12\gamma_{32}, \quad (5.9)$$

$$\beta_{41} = 64 - 3\gamma_{41} - 12\gamma_{42} - 27\gamma_{43}, \quad \beta_{51} = 125 - 3\gamma_{51} - 12\gamma_{52} - 27\gamma_{53} - 48\gamma_{54}.$$

Assim, fazendo como no caso anterior, substituindo β_{21} dado por (5.6) em (5.8) e (5.9), encontramos

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

e substituindo β_{31} dado por (5.6) em (5.8) e (5.9), obtemos

$$\gamma_{30} = 12 - 5\gamma_{32}, \quad \gamma_{31} = 18 - 8\gamma_{32}, \quad \beta_{30} = 28 - 12\gamma_{32}, \quad \beta_{31} = -27 + 12\gamma_{32}.$$

Também substituindo β_{41} dado por (5.6) em (5.8) e (5.9), temos as equações

$$-\gamma_{40} + \gamma_{41} + 3\gamma_{42} + 5\gamma_{43} = 12 \quad (5.10)$$

$$-\gamma_{40} + 2\gamma_{41} + 11\gamma_{42} + 26\gamma_{43} = 60$$

e enfim substituindo β_{51} dado por (5.6) em (5.8) e (5.9), chegamos nas equações

$$-\gamma_{50} + \gamma_{51} + 3\gamma_{52} + 5\gamma_{53} + 7\gamma_{54} = 20 \quad (5.11)$$

$$-\gamma_{50} + 2\gamma_{51} + 11\gamma_{52} + 26\gamma_{53} + 47\gamma_{54} = 120.$$

Podemos simplificar as equações (5.10) fazendo a diferença entre elas. Logo encontramos

$$\gamma_{41} = 48 - 8\gamma_{42} - 21\gamma_{43}. \quad (5.12)$$

Fazendo o mesmo nas equações (5.11), obtemos

$$\gamma_{51} = 100 - 8\gamma_{52} - 21\gamma_{53} - 40\gamma_{54}. \quad (5.13)$$

Para ordens superiores as condições de ordem incluem as condições de ordem para métodos de ordens inferiores. Podemos nesse caso considerar o resultado do caso anterior com a mesma ordem de estágio $q = 3$. Assim, vamos trabalhar com a mesma

equação que retivemos naquele momento apenas modificada para métodos com ordem 6, que é

$$\sum_{i,j=1}^6 b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20}.$$

Ao desenvolvermos essa equação, substituindo os coeficientes que já encontramos, obtemos a seguinte expressão

$$-\frac{173}{5760}\beta_{41} + \frac{3}{640}\beta_{51} + \frac{241}{240}\gamma_{32} - \frac{173}{240}\gamma_{43} + \frac{9}{80}\gamma_{53} + \frac{9}{20}\gamma_{54} = \frac{9163}{5760}. \quad (5.14)$$

Agora, ao invés das trinta e uma equações que tínhamos, restaram dezenove equações que são

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^6 b_i a_{ij} c_j^4 &= \frac{1}{30}, \quad \sum_{i,j,k=1}^6 b_i a_{ij} a_{jk} c_k^3 = \frac{1}{120}, \quad \sum_{i,j=1}^6 b_i c_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{24}, \\ \sum_{i,j=1}^6 b_i c_i^3 a_{ij} c_j &= \frac{1}{12}, \quad \sum_{i=1}^6 b_i c_i \left(\sum_{j=1}^6 a_{ij} c_j \right)^2 = \frac{1}{24}, \quad \sum_{i,j=1}^6 b_i c_i^2 a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{18}, \\ \sum_{i,j,k=1}^6 b_i c_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k &= \frac{1}{48}, \quad \sum_{i,j=1}^6 b_i a_{ij} c_j a_{ij} a_{ji} c_i = \frac{1}{72}, \quad \sum_{i,j=1}^6 b_i a_{ij} \left(\sum_{k=1}^6 a_{jk} c_k \right)^2 = \frac{1}{120}, \\ \sum_{i,j,k=1}^6 b_i c_i^2 a_{ij} a_{jk} c_k &= \frac{1}{36}, \quad \sum_{i,j,k=1}^6 b_i a_{ij} c_j^2 a_{jk} c_k = \frac{1}{60}, \quad \sum_{i,j,k,m=1}^6 b_i a_{ij} a_{jk} a_{km} c_m^2 = \frac{1}{360}, \\ \sum_{i,j=1}^6 b_i a_{ij} c_j a_{ij} c_j^2 &= \frac{1}{36}, \quad \sum_{i,j,k=1}^6 b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{72}, \quad \sum_{i,j,k=1}^6 b_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{90}, \\ \sum_{i,j,k,m,o=1}^6 b_i a_{ij} a_{jk} a_{km} a_{mo} c_o &= \frac{1}{720}, \quad \sum_{i,j,k,m=1}^6 b_i c_i a_{ij} a_{jk} a_{km} c_m = \frac{1}{144}, \\ \sum_{i,j,k,m=1}^6 b_i a_{ij} c_j a_{jk} a_{km} c_m &= \frac{1}{180}, \quad \sum_{i,j,k,m=1}^6 b_i a_{ij} a_{jk} c_k a_{km} c_m = \frac{1}{240}. \end{aligned}$$

Ao simplificarmos usando (5.7), ficamos apenas com as equações

$$\sum_{i=1}^6 b_i c_i^5 = \frac{1}{6}, \quad \sum_{i,j=1}^6 b_i a_{ij} c_j^4 = \frac{1}{30}, \quad \sum_{i,j,k=1}^6 b_i a_{ij} a_{jk} c_k^3 = \frac{1}{120}, \quad \sum_{i,j=1}^6 b_i c_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{24}$$

e como a primeira já foi trabalhada logo no início, retemos apenas as outras três.

Desenvolvendo então essas três equações, novamente substituindo os coeficientes já obtidos, encontramos

$$-\frac{173}{7200}\beta_{41} + \frac{3}{800}\beta_{51} + \frac{3133}{900}\gamma_{32} - \frac{173}{180}\gamma_{42} - \frac{173}{24}\gamma_{43} + \frac{3}{20}\gamma_{52} + \frac{9}{8}\gamma_{53} + \frac{81}{20}\gamma_{54} = \frac{1847}{1440} \quad (5.15)$$

$$-\frac{173}{1440}\beta_{41} + \frac{3}{128}\beta_{51} + \frac{241}{80}\gamma_{32} - \frac{173}{60}\gamma_{43} + \frac{9}{16}\gamma_{53} + \frac{9}{4}\gamma_{54} = \frac{31759}{5760} \quad (5.16)$$

e uma expressão não linear extensa, que pode ser vista no apêndice (equação (A.2)).

Vamos trabalhar com as equações (5.14), (5.15) e (5.16). Então, tomamos as três e escalonamos esse sistema mudando os coeficientes γ_{32} e γ_{43} para o lado direito da igualdade. Logo, obtemos os seguintes resultados

$$\begin{aligned} \gamma_{42} &= -\frac{9}{865} + \frac{482}{173}\gamma_{32} - \frac{69}{10}\gamma_{43} + \frac{27}{173}\gamma_{52} + \frac{1863}{1730}\gamma_{53} + \frac{3321}{865}\gamma_{54}, \\ \beta_{51} &= -\frac{1631}{9} + \frac{1928}{9}\gamma_{32} - 24\gamma_{53} - 96\gamma_{54}, \\ \beta_{41} &= -\frac{14056}{173} + \frac{11568}{173}\gamma_{32} - 24\gamma_{43}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Voltando à expressão não linear citada anteriormente, podemos agora substituir esses últimos coeficientes encontrados e assim obtermos

$$-\frac{63}{1600}\gamma_{53} - \frac{30393}{138400}\gamma_{54} + \frac{9}{160}\gamma_{32}\gamma_{53} + \frac{2169}{6920}\gamma_{32}\gamma_{54} = \frac{1}{800} - \frac{1211}{4800}\gamma_{43} + \frac{173}{480}\gamma_{32}\gamma_{43},$$

a qual isolando o coeficiente γ_{54} do lado esquerdo, fornece

$$\gamma_{54} = \frac{173(6 - 1211\gamma_{43} + 1730\gamma_{32}\gamma_{43} + 189\gamma_{53} - 270\gamma_{32}\gamma_{53})}{54(-3377 + 4820\gamma_{32})}. \quad (5.18)$$

Como obtivemos o coeficiente β_{41} , podemos a partir dele encontrarmos outros coeficientes. Então, substituindo esse resultado e γ_{41} dado por (5.12) na expressão de β_{41} dado por (5.8), encontramos

$$\gamma_{42} = \frac{-18 + 964\gamma_{32} - 865\gamma_{43}}{173} \quad (5.19)$$

que substituído em (5.12), fornece

$$\gamma_{41} = \frac{8448 - 7712\gamma_{32} + 3287\gamma_{43}}{173}.$$

Agora, substituindo todos esses coeficientes encontrados na expressão de β_{41} dado por (5.6), obtemos

$$\gamma_{40} = \frac{6318 - 4820\gamma_{32} + 1557\gamma_{43}}{173}.$$

E por último de $\beta_{40} + \beta_{41} = 1$, temos

$$\beta_{40} = \frac{3(4743 - 3856\gamma_{32} + 1384\gamma_{43})}{173}.$$

Fazendo o mesmo com o coeficiente β_{51} que encontramos, ou seja, substituindo-o juntamente com γ_{51} dado por (5.13) e γ_{54} dado por (5.18), na expressão de β_{51} dado por (5.8), obtemos

$$\gamma_{52} = \frac{40012 + 2323240\gamma_{32}^2 + 1466521\gamma_{43} + 227016\gamma_{53} - 2\gamma_{32}(847597 + 1047515\gamma_{43} + 161865\gamma_{53})}{27(-3377 + 4820\gamma_{32})} \quad (5.20)$$

Com o intuito de encontrarmos o coeficiente γ_{53} , vamos retornar à expressão de γ_{42} dado por (5.17). Assim, substituindo γ_{52} , γ_{54} e γ_{42} dados, respectivamente por, (5.20), (5.18) e (5.19), encontramos que

$$\gamma_{53} = \frac{964 + 173\gamma_{43}}{27}.$$

Logo, substituindo esse resultado em (5.20) e em (5.18), obtemos

$$\gamma_{52} = \frac{-2412 + 482\gamma_{32} - 865\gamma_{43}}{27} \quad \text{e} \quad \gamma_{54} = -\frac{173}{27},$$

que substituídos em β_{51} dado por (5.17), fornece

$$\beta_{51} = \frac{-3807 + 1928\gamma_{32} - 1384\gamma_{43}}{9}.$$

Substituindo os coeficientes γ_{52} , γ_{53} e γ_{54} em (5.13), temos que

$$\gamma_{51} = \frac{8672 - 3856\gamma_{32} + 3287\gamma_{43}}{27}$$

e substituindo todos esses coeficientes encontrados na expressão de β_{51} dado por (5.6), obtemos

$$\gamma_{50} = \frac{4505 - 2410\gamma_{32} + 1557\gamma_{43}}{27}.$$

Por fim, encontramos a partir de $\beta_{50} + \beta_{51} = 1$, que

$$\beta_{50} = \frac{8(477 - 241\gamma_{32} + 173\gamma_{43})}{9}.$$

Assim, encontramos todos os coeficientes dessa família de métodos em função dos dois parâmetros γ_{32} e γ_{43} , respectivamente denotados por t e s . Então, substituindo os

coeficientes em (5.1), (5.2), (5.3), (5.4) e (5.5), obtemos

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{95}{288} f_n + \frac{1427}{1440} f_{n+1} - \frac{133}{240} \hat{f}_{n+2} + \frac{241}{720} \hat{f}_{n+3} - \frac{173}{1440} \hat{f}_{n+4} + \frac{3}{160} \hat{f}_{n+5} \right],$$

onde

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

$$\hat{y}_{n+3} = (28 - 12t)y_n + (-27 + 12t)y_{n+1} + h[(12 - 5t)f_n + (18 - 8t)f_{n+1} + t\hat{f}_{n+2}],$$

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+4} = & \left(\frac{3(4743 + 1384s - 3856t)}{173} \right) y_n + \left(\frac{8(-1757 - 519s + 1446t)}{173} \right) y_{n+1} + \\ & h \left[\left(\frac{6318 + 1557s - 4820t}{173} \right) f_n + \left(\frac{8448 + 3287s - 7712t}{173} \right) f_{n+1} + \right. \\ & \left. \left(\frac{-18 - 865s + 964t}{173} \right) \hat{f}_{n+2} + s\hat{f}_{n+3} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+5} = & \left(\frac{8(477 + 173s - 241t)}{9} \right) y_n + \left(\frac{-3807 + 1928t - 1384s}{9} \right) y_{n+1} + \\ & h \left[\left(\frac{4505 - 2410t + 1557s}{27} \right) f_n + \left(\frac{8672 - 3856t + 3287s}{27} \right) f_{n+1} + \right. \\ & \left. \left(\frac{-2412 + 482t - 865s}{27} \right) \hat{f}_{n+2} + \left(\frac{964 + 173s}{27} \right) \hat{f}_{n+3} - \frac{173}{27} \hat{f}_{n+4} \right]. \end{aligned}$$

5.2 Análise da Estabilidade

Quando aplicamos essa família de métodos à equação linear teste (1.41), encontramos

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

onde $\hat{h} = h\lambda$, e de (2.7)

$$R(\hat{h}) = \frac{P(\hat{h})}{Q(\hat{h})}$$

com,

$$\begin{aligned} P(\hat{h}) = & 1 + (\alpha_0 + \alpha_2\beta_{20} + \alpha_3\beta_{30} + \alpha_4\beta_{40} + \alpha_5\beta_{50})\hat{h} + (\alpha_2\gamma_{20} + \alpha_3(\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{32}) + \\ & \alpha_4(\gamma_{40} + \beta_{20}\gamma_{42} + \beta_{30}\gamma_{43}) + \alpha_5(\gamma_{50} + \beta_{20}\gamma_{52} + \beta_{30}\gamma_{53} + \beta_{40}\gamma_{54}))\hat{h}^2 + \\ & (\alpha_3\gamma_{32}\gamma_{20} + \alpha_4(\gamma_{42}\gamma_{20} + \gamma_{43}\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{43}\gamma_{32}) + \alpha_5(\gamma_{52}\gamma_{20} + \gamma_{53}\gamma_{30} + \\ & \gamma_{54}\gamma_{40} + \beta_{20}\gamma_{54}\gamma_{42} + \beta_{30}\gamma_{54}\gamma_{43}))\hat{h}^3 + (\alpha_4\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{20} + \alpha_5(\gamma_{53}\gamma_{32}\gamma_{20} + \\ & \gamma_{54}\gamma_{42}\gamma_{20} + \gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}))\hat{h}^4 + \alpha_5\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{20}\hat{h}^5 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
Q(\hat{h}) = & 1 - (\alpha_1 + \alpha_2\beta_{21} + \alpha_3\beta_{31} + \alpha_4\beta_{41} + \alpha_5\beta_{51})\hat{h} - (\alpha_2\gamma_{21} + \alpha_3(\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{32}) + \\
& \alpha_4(\gamma_{41} + \beta_{21}\gamma_{42} + \beta_{31}\gamma_{43}) + \alpha_5(\gamma_{51} + \beta_{21}\gamma_{52} + \beta_{31}\gamma_{53} + \beta_{41}\gamma_{54}))\hat{h}^2 - \\
& (\alpha_3\gamma_{32}\gamma_{21} + \alpha_4(\gamma_{42}\gamma_{21} + \gamma_{43}\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{43}\gamma_{32}) + \alpha_5(\gamma_{52}\gamma_{21} + \gamma_{53}\gamma_{31} + \\
& \gamma_{54}\gamma_{41} + \beta_{21}\gamma_{54}\gamma_{42} + \beta_{31}\gamma_{54}\gamma_{43}))\hat{h}^3 - (\alpha_4\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{21} + \alpha_5(\gamma_{53}\gamma_{32}\gamma_{21} + \\
& \gamma_{54}\gamma_{42}\gamma_{21} + \gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}))\hat{h}^4 - \alpha_5\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{21}\hat{h}^5.
\end{aligned}$$

Então, substituindo os valores obtidos anteriormente, temos

$$P(\hat{h}) = 720 + 3600\hat{h} - 12(-132 + 173s)\hat{h}^2 + 6(46 + 173(-1+t)s)\hat{h}^3 - (-18 + 173s)\hat{h}^4 - 173st\hat{h}^5 \quad (5.21)$$

e

$$Q(\hat{h}) = 720 + 2880\hat{h} - 12(138 + 173s)\hat{h}^2 + 6(62 + 173(1+t)s)\hat{h}^3 - (36 + 173(1+6t)s)\hat{h}^4 + 346st\hat{h}^5. \quad (5.22)$$

Novamente, como nos casos anteriores, é um tanto quanto complicado determinar as propriedades de estabilidade para esses métodos pois estamos tratando de métodos a dois parâmetros. Assim, vamos fazer algumas observações.

Para t e s diferentes de zero, temos métodos **A-estáveis**, já que

$$\lim_{\text{Re } \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| = \frac{1}{2}.$$

Agora, analisando a **I-estabilidade**, tomamos $P(\hat{h})$ dado por (5.21) e substituímos $\hat{h}$ por iy , obtendo

$$720 + 3600iy + 12(-132 + 173s)y^2 - 6(46 + 173(-1+t)s)iy^3 - (-18 + 173s)y^4 - (173st)iy^5$$

e por $-iy$, onde encontramos

$$720 - 3600iy + 12(-132 + 173s)y^2 + 6(46 + 173(-1+t)s)iy^3 - (-18 + 173s)y^4 + (173st)iy^5.$$

Se multiplicarmos esses dois resultados, ficamos com

$$4(518400 + 17280(618 + 173s)y^2 + 144(3804 + 29929s^2 - 346s(-13 + 150t))y^4 + 12(1596 - 2076s(-2 + 27t) + 29929s^2(1 - 6t + 3t^2))y^6 + (324 + 2076s(-3 + 46t) + 29929s^2(1 - 12t + 12t^2))y^8 + 29929s^2t^2y^{10}). \quad (5.23)$$

Fazendo as mesmas substituições em $Q(\hat{h})$ dado por (5.22), temos

$$720 + 2880iy + 12(138 + 173s)y^2 - 6(62 + 173(1 + t)s)iy^3 - (36 + 173(1 + 6t)s)y^4 + (346st)iy^5$$

e

$$720 - 2880iy + 12(138 + 173s)y^2 + 6(62 + 173(1 + t)s)iy^3 - (36 + 173(1 + 6t)s)y^4 - (346st)iy^5.$$

Multiplicando esses dois resultados, obtemos

$$4(518400 + 17280(618 + 173s)y^2 + 144(3804 + 29929s^2 - 346s(-13 + 150t))y^4 + 12(1596 - 2076s(-2 + 27t) + 29929s^2(1 - 6t + 3t^2))y^6 + (1296 - 4152s(-3 + 44t) + 29929s^2(1 - 12t + 12t^2))y^8 + 119716s^2t^2y^{10}). \quad (5.24)$$

Desta forma, fazendo a diferença entre (5.24) e (5.23), chegamos no seguinte polinômio

$$E(y) = (3888 + 74736s - 1112736st)y^8 + 359148s^2t^2y^{10},$$

que deve ser não negativo, de acordo com (1.49)-(1.50).

Temos que

$$359148s^2t^2y^{10} \geq 0.$$

Agora, analisando o termo

$$(3888 + 74736s - 1112736st)y^8,$$

notamos que temos

$$3888 + 74736s - 1112736st = 0,$$

para $t = \frac{9}{113}$ e $s = \frac{339}{1211}$, valores esses que também anulam a expressão

$$66 + 1211s - 18165st$$

que multiplica $\hat{h}^7$ e a expressão

$$435 + 8477s - 125944st$$

que multiplica $\hat{h}^8$, quando fazemos a diferença entre $R(\hat{h})$ e $\exp(\hat{h})$. Logo, como ficam

restando termos multiplicados por $\hat{h}^9$ em diante, temos que para esses valores de s e t a seguinte função de estabilidade

$$R(\hat{h}) = \frac{1680 + 8400\hat{h} + 2340\hat{h}^2 + 20\hat{h}^3 - 71\hat{h}^4 - 9\hat{h}^5}{1680 + 6720\hat{h} - 5220\hat{h}^2 + 1600\hat{h}^3 - 251\hat{h}^4 + 18\hat{h}^5}$$

é uma aproximação de ordem 8 para a exponencial e **A-aceitável**.

Tentando obter métodos **L - estáveis**, observamos que para $t = 0$, a função de estabilidade toma a forma

$$R(\hat{h}) = \frac{720 + 3600\hat{h} - 12(-132 + 173s)\hat{h}^2 + 6(46 - 173s)\hat{h}^3 - (-18 + 173s)\hat{h}^4}{720 + 2880\hat{h} - 12(138 + 173s)\hat{h}^2 + 6(62 + 173s)\hat{h}^3 - (36 + 173s)\hat{h}^4}.$$

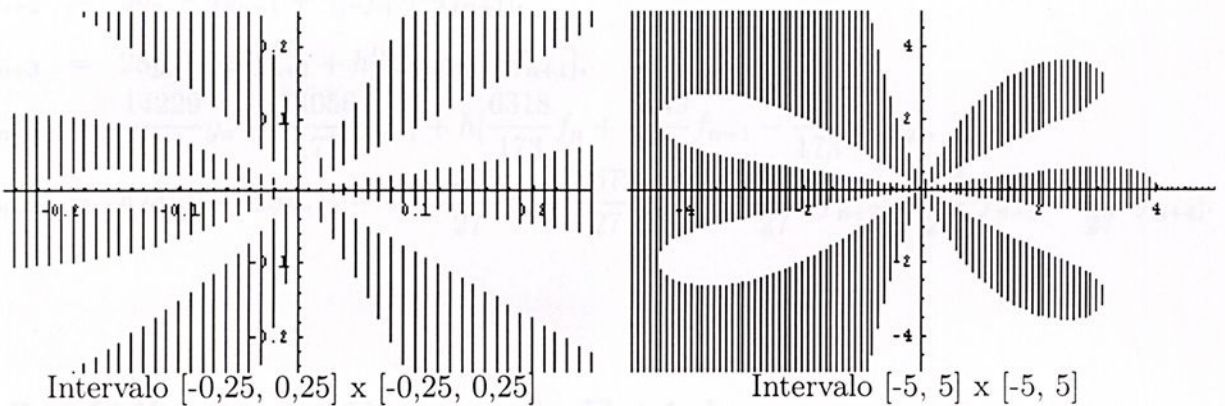
Então, com o intuito de obtermos

$$\lim_{\text{Re } \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| = 0,$$

anulamos o coeficiente de $\hat{h}^4$ no numerador de $R(\hat{h})$, encontrando $s = \frac{18}{173}$. Assim, temos que a função de estabilidade, torna-se

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + 5\hat{h} + (19/10)\hat{h}^2 + (7/30)\hat{h}^3}{1 + 4\hat{h} - (13/5)\hat{h}^2 + (2/3)\hat{h}^3 - (3/40)\hat{h}^4},$$

cujas *order star* é dada por



Portanto, o método que encontramos com esses valores para t e s é dado por

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{95}{288} f_n + \frac{1427}{1440} f_{n+1} - \frac{133}{240} f_{n+2} + \frac{241}{720} f_{n+3} - \frac{173}{1440} f_{n+4} + \frac{3}{160} f_{n+5} \right],$$

onde

$$\begin{aligned}
\hat{y}_{n+2} &= 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f_n + 4f_{n+1}], \\
\hat{y}_{n+3} &= 28y_n - 27y_{n+1} + h[12f_n + 18f_{n+1}], \\
\hat{y}_{n+4} &= \frac{14661}{173}y_n - \frac{14488}{173}y_{n+1} + h\left[\frac{6480}{173}f_n + \frac{8790}{173}f_{n+1} - \frac{108}{173}\hat{f}_{n+2} + \frac{18}{173}\hat{f}_{n+3}\right], \\
\hat{y}_{n+5} &= 440y_n - 439y_{n+1} + h\left[\frac{4667}{27}f_n + \frac{9014}{27}f_{n+1} - \frac{2502}{27}\hat{f}_{n+2} + \frac{982}{27}\hat{f}_{n+3} - \frac{173}{27}\hat{f}_{n+4}\right].
\end{aligned}$$

Agora, tomando $s = 0$, temos que a função de estabilidade é definida por

$$R(\hat{h}) = \frac{720 + 3600\hat{h} + 1584\hat{h}^2 + 276\hat{h}^3 + 18\hat{h}^4}{720 + 2880\hat{h} - 1656\hat{h}^2 + 372\hat{h}^3 - 36\hat{h}^4}$$

e independe de t . Logo, obtemos

$$\lim_{\operatorname{Re} \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| = \frac{1}{2},$$

o que fornece $|R(\hat{h})| < 1$, ou seja, o método é **A-estável**. Assim, definimos esse método por

$$y_{n+1} = y_n + h\left[\frac{95}{288}f_n + \frac{1427}{1440}f_{n+1} - \frac{133}{240}\hat{f}_{n+2} + \frac{241}{720}\hat{f}_{n+3} - \frac{173}{1440}\hat{f}_{n+4} + \frac{3}{160}\hat{f}_{n+5}\right],$$

onde

$$\begin{aligned}
\hat{y}_{n+2} &= 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f_n + 4f_{n+1}], \\
\hat{y}_{n+3} &= 28y_n - 27y_{n+1} + h[12f_n + 18f_{n+1}], \\
\hat{y}_{n+4} &= \frac{14229}{173}y_n - \frac{14056}{173}y_{n+1} + h\left[\frac{6318}{173}f_n + \frac{8449}{173}f_{n+1} - \frac{18}{173}\hat{f}_{n+2}\right], \\
\hat{y}_{n+5} &= 424y_n - 423y_{n+1} + h\left[\frac{4505}{27}f_n + \frac{8672}{27}f_{n+1} - \frac{2412}{27}\hat{f}_{n+2} + \frac{964}{27}\hat{f}_{n+3} - \frac{173}{27}\hat{f}_{n+4}\right].
\end{aligned}$$

5.3 Cálculo da Ordem de Estágio

Vimos no início desse capítulo, durante a construção da família de métodos estendidos, que foi de grande importância a utilização das condições de simplificação (5.7), supondo ordem de estágio máxima igual a 3.



Verifiquemos então, que temos isso válido. Como

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 95/288 & 1427/1440 & -133/240 & 241/720 & -173/1440 & 3/160 \\ 49/72 & 13/360 & 133/60 & -241/180 & 173/360 & -3/40 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{pmatrix},$$

onde

$$\begin{aligned} a_{41} &= 99/32 - 25t/24, & a_{42} &= -1401/160 + 467t/120, & a_{43} &= 1197/80 - 113t/20, \\ a_{44} &= -723/80 + 241t/60, & a_{45} &= 519/160 - 173t/120, & a_{46} &= (-81 + 36t)/160, \\ a_{51} &= (60533 - 36150t + 6747s)/6228, & a_{52} &= (-986599 - 148953s + 675282t)/31140, \\ a_{53} &= (233141 + 43077s - 163398t)/5190, & a_{54} &= (-423437 + 348486t - 109509s)/15570, \\ a_{55} &= (1757 + 519s - 1446t)/180, & a_{56} &= (-5271 + 4338t - 1557s)/3460, \\ a_{61} &= (70815 - 48200t + 17992s)/2592, & a_{62} &= (-1270029 + 900376t - 397208s)/12960, \\ a_{63} &= (313371 - 217864t + 114872s)/2160, & a_{64} &= (-686127 + 464648t - 292024s)/6480, \\ a_{65} &= (575571 - 333544t + 239432s)/12960, & a_{66} &= (-3807 + 1928t - 1384s)/480, \end{aligned}$$

desenvolvemos $c^2 = 2Ac$ e encontramos essa condição satisfeita.

Ao desenvolvermos $c^3 = 3Ac^2$, também temos a validade da condição.

Agora em $c^4 = 4Ac^3$, não obtemos um resultado satisfatório, já que

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 16 \\ 81 \\ 256 \\ 625 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 12 \\ 45 + 12t \\ (19160 + 11568t)/173 \\ (1969 + 1928t)/9 \end{pmatrix},$$

para qualquer valor de t .

Sendo assim, confirmamos que a ordem de estágio é $q = 3$, pois (2.6) é válida para $k = 1, 2$.

Capítulo 6

Métodos Estendidos de Passo Um de Ordem Sete

Neste capítulo, novamente seguiremos o mesmo raciocínio que utilizamos para construirmos os métodos de ordens inferiores. A diferença que teremos, neste caso, é que não obteremos uma família de métodos, mas apenas um método estendido de passo um de ordem sete.

6.1 Obtenção do Método

Para ordem $p = 7$, definimos um método estendido de passo um por

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f_n + \alpha_1 f_{n+1} + \alpha_2 \hat{f}_{n+2} + \alpha_3 \hat{f}_{n+3} + \alpha_4 \hat{f}_{n+4} + \alpha_5 \hat{f}_{n+5} + \alpha_6 \hat{f}_{n+6}] \quad (6.1)$$

onde

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_{20}y_n + \beta_{21}y_{n+1} + h[\gamma_{20}f_n + \gamma_{21}f_{n+1}], \quad (6.2)$$

$$\hat{y}_{n+3} = \beta_{30}y_n + \beta_{31}y_{n+1} + h[\gamma_{30}f_n + \gamma_{31}f_{n+1} + \gamma_{32}\hat{f}_{n+2}], \quad (6.3)$$

$$\hat{y}_{n+4} = \beta_{40}y_n + \beta_{41}y_{n+1} + h[\gamma_{40}f_n + \gamma_{41}f_{n+1} + \gamma_{42}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{43}\hat{f}_{n+3}], \quad (6.4)$$

$$\hat{y}_{n+5} = \beta_{50}y_n + \beta_{51}y_{n+1} + h[\gamma_{50}f_n + \gamma_{51}f_{n+1} + \gamma_{52}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{53}\hat{f}_{n+3} + \gamma_{54}\hat{f}_{n+4}], \quad (6.5)$$

$$\hat{y}_{n+6} = \beta_{60}y_n + \beta_{61}y_{n+1} + h[\gamma_{60}f_n + \gamma_{61}f_{n+1} + \gamma_{62}\hat{f}_{n+2} + \gamma_{63}\hat{f}_{n+3} + \gamma_{64}\hat{f}_{n+4} + \gamma_{65}\hat{f}_{n+5}], \quad (6.6)$$

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

Observe que neste caso vamos encontrar um método e não uma família de métodos com parâmetros livres, ou seja, soluções ótimas conforme nos casos anteriores. Isso ocorre pelo fato de, nesse caso, existir mais equações do que incógnitas γ_{ij} . Assim, para $p = 7$ temos uma solução devido à não-independência das equações.

Já nos casos anteriores, temos que o número de parâmetros livres é igual à diferença entre o número de incógnitas γ_{ij} e o número de equações (ver tabela da subseção 2.1.1).

Novamente, vamos construir o método partindo da obtenção dos coeficientes α_i da fórmula principal (6.1), tomando algumas das condições de ordem dos métodos de Runge - Kutta de ordem 7, que são

$$\sum_{i=1}^7 b_i c_i^k = \sum_{i=0}^6 \alpha_i i^k = \frac{1}{k+1}, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6,$$

e que formam um sistema cuja solução fornece

$$\alpha_0 = \frac{19087}{60480}, \alpha_1 = \frac{2713}{2520}, \alpha_2 = -\frac{15487}{20160}, \alpha_3 = \frac{586}{945}, \alpha_4 = -\frac{6737}{20160}, \alpha_5 = \frac{263}{2520}, \alpha_6 = -\frac{863}{60480}.$$

Com o objetivo de encontrarmos os coeficientes das fórmulas secundárias (6.2), (6.3), (6.4), (6.5) e (6.6), vamos utilizar a condição da soma das linhas dada por:

$$c_i = \sum_{j=1}^7 a_{ij}, \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7,$$

que se constitui em um sistema com cinco equações, as quais substituindo os coeficientes α_i , resultam em

$$\begin{aligned} \beta_{21} &= 2 - \gamma_{20} - \gamma_{21}, & \beta_{31} &= 3 - \gamma_{30} - \gamma_{31} - \gamma_{32}, & \beta_{41} &= 4 - \gamma_{40} - \gamma_{41} - \gamma_{42} - \gamma_{43}, \\ \beta_{51} &= 5 - \gamma_{50} - \gamma_{51} - \gamma_{52} - \gamma_{53} - \gamma_{54}, & \beta_{61} &= 6 - \gamma_{60} - \gamma_{61} - \gamma_{62} - \gamma_{63} - \gamma_{64} - \gamma_{65}. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Partindo então para a obtenção dos coeficientes γ_{ij} , tomemos as equações restantes das condições de ordem. Como no caso anterior, obtemos as condições de ordem fornecidas por um algoritmo particular. Nesse caso teremos setenta e oito equações para trabalharmos. Assim, como anteriormente, é necessário utilizarmos as condições de

simplificação

$$c^2 = 2Ac \text{ e } c^3 = 3Ac^2, \quad (6.8)$$

que correspondem a impor ordem de estágio máxima igual a 3.

Ao desenvolvermos as equações (6.8), obtemos dez equações que substituindo os coeficientes α_i e resolvendo-as, fornecem

$$\begin{aligned} \beta_{21} &= 4 - 2\gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 9 - 2\gamma_{31} - 4\gamma_{32}, \quad \beta_{41} = 16 - 2\gamma_{41} - 4\gamma_{42} - 6\gamma_{43}, \\ \beta_{51} &= 25 - 2\gamma_{51} - 4\gamma_{52} - 6\gamma_{53} - 8\gamma_{54}, \quad \beta_{61} = 36 - 2\gamma_{61} - 4\gamma_{62} - 6\gamma_{63} - 8\gamma_{64} - 10\gamma_{65} \end{aligned} \quad (6.9)$$

e

$$\begin{aligned} \beta_{21} &= 8 - 3\gamma_{21}, \quad \beta_{31} = 27 - 3\gamma_{31} - 12\gamma_{32}, \\ \beta_{41} &= 64 - 3\gamma_{41} - 12\gamma_{42} - 27\gamma_{43}, \quad \beta_{51} = 125 - 3\gamma_{51} - 12\gamma_{52} - 27\gamma_{53} - 48\gamma_{54}, \\ \beta_{61} &= 216 - 3\gamma_{61} - 12\gamma_{62} - 27\gamma_{63} - 48\gamma_{64} - 75\gamma_{65}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Então, trabalhando com as equações (6.7), (6.9) e (6.10), da mesma maneira que foi feito em casos anteriores, obtemos

$$\begin{aligned} \gamma_{20} &= 2, \quad \gamma_{21} = 4, \quad \beta_{20} = 5, \quad \beta_{21} = -4, \quad \gamma_{30} = 12 - 5\gamma_{32}, \\ \gamma_{31} &= 18 - 8\gamma_{32}, \quad \beta_{30} = 28 - 12\gamma_{32}, \quad \beta_{31} = -27 + 12\gamma_{32}, \\ \gamma_{41} &= 48 - 8\gamma_{42} - 21\gamma_{43}, \quad \gamma_{51} = 100 - 8\gamma_{52} - 21\gamma_{53} - 40\gamma_{54} \end{aligned}$$

e substituindo β_{61} dado por (6.7) em (6.9) e (6.10), encontramos as equações

$$\begin{aligned} -\gamma_{60} + \gamma_{61} + 3\gamma_{62} + 5\gamma_{63} + 7\gamma_{64} + 9\gamma_{65} &= 30 \\ -\gamma_{60} + 2\gamma_{61} + 11\gamma_{62} + 26\gamma_{63} + 47\gamma_{64} + 74\gamma_{65} &= 210, \end{aligned}$$

as quais subtraindo uma da outra, fornecem

$$\gamma_{61} = 180 - 8\gamma_{62} - 21\gamma_{63} - 40\gamma_{64} - 65\gamma_{65}.$$

Como vimos anteriormente, podemos considerar as equações que retivemos nos casos anteriores com mesma ordem de estágio. Sendo assim, tomando primeiramente a

equação retida para $p = 5$ modificada para o nosso caso, obtendo

$$\sum_{i,j=1}^7 b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20},$$

que considerando as substituições dos coeficientes obtidos até o momento, é da forma

$$-\frac{6737}{80640}\beta_{41} + \frac{263}{10080}\beta_{51} - \frac{863}{241920}\beta_{61} + \frac{586}{315}\gamma_{32} - \frac{6737}{3360}\gamma_{43} + \frac{263}{420}\gamma_{53} + \frac{263}{105}\gamma_{54} - \frac{863}{10080}\gamma_{63} - \frac{863}{2520}\gamma_{64} - \frac{863}{1008}\gamma_{65} = \frac{7351}{2240}. \quad (6.11)$$

Agora, tomando as equações retidas para $p = 6$ e também reescrevendo-as, temos

$$\sum_{i,j=1}^7 b_i a_{ij} c_j^4 = \frac{1}{30}, \quad \sum_{i,j,k=1}^7 b_i a_{ij} a_{jk} c_k^3 = \frac{1}{120}, \quad \sum_{i,j=1}^7 b_i c_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{24}.$$

Ao desenvolvermos essas equações com as devidas substituições, obtemos três equações. As equações (6.12) e (6.13) que apresentamos a seguir e a equação (A.3), que por ser muito extensa é apresentada no apêndice.

$$-\frac{6737}{100800}\beta_{41} + \frac{263}{12600}\beta_{51} - \frac{863}{302400}\beta_{61} + \frac{30472}{4725}\gamma_{32} - \frac{6737}{2520}\gamma_{42} - \frac{6737}{336}\gamma_{43} + \frac{263}{315}\gamma_{52} + \frac{263}{42}\gamma_{53} + \frac{789}{35}\gamma_{54} - \frac{863}{7560}\gamma_{62} - \frac{863}{1008}\gamma_{63} - \frac{863}{280}\gamma_{64} - \frac{863}{108}\gamma_{65} = \frac{7379}{2800} \quad (6.12)$$

$$-\frac{6737}{20160}\beta_{41} + \frac{263}{2016}\beta_{51} - \frac{863}{40320}\beta_{61} + \frac{586}{105}\gamma_{32} - \frac{6737}{840}\gamma_{43} + \frac{263}{84}\gamma_{53} + \frac{263}{21}\gamma_{54} - \frac{863}{1680}\gamma_{63} - \frac{863}{420}\gamma_{64} - \frac{863}{168}\gamma_{65} = \frac{5465}{504} \quad (6.13)$$

Depois do desenvolvimento das equações retidas anteriormente, ficamos ainda com quarenta e sete equações para trabalharmos. Por isso, vamos aplicar nelas as condições de simplificação (6.8) obtendo as seguintes equações

$$\sum_{i=1}^7 b_i c_i^6 = \frac{1}{7}, \quad \sum_{i,j=1}^7 b_i c_i^2 a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{28}, \quad \sum_{i,j=1}^7 b_i c_i a_{ij} c_j^4 = \frac{1}{35},$$

$$\sum_{i,j=1}^7 b_i a_{ij} c_j^5 = \frac{1}{42}, \quad \sum_{i,j,k=1}^7 b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k^3 = \frac{1}{140}, \quad \sum_{i,j,k=1}^7 b_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k^3 = \frac{1}{168},$$

$$\sum_{i,j,k=1}^7 b_i a_{ij} a_{jk} c_k^4 = \frac{1}{210}, \quad \sum_{i,j,k,m=1}^7 b_i a_{ij} a_{jk} a_{km} c_m^3 = \frac{1}{840},$$

das quais só não retemos a primeira, pois já foi utilizada.

Assim, desenvolvendo as equações retidas e fazendo a substituição dos coeficientes que já obtivemos, encontramos as equações

$$-\frac{6737}{5040}\beta_{41} + \frac{1315}{2016}\beta_{51} - \frac{863}{6720}\beta_{61} + \frac{586}{35}\gamma_{32} - \frac{6737}{210}\gamma_{43} + \frac{1315}{84}\gamma_{53} + \frac{1315}{21}\gamma_{54} - \frac{863}{280}\gamma_{63} - \frac{863}{70}\gamma_{64} - \frac{863}{28}\gamma_{65} = \frac{115579}{3360} \quad (6.14)$$

$$-\frac{6737}{25200}\beta_{41} + \frac{263}{2520}\beta_{51} - \frac{863}{50400}\beta_{61} + \frac{30472}{1575}\gamma_{32} - \frac{6737}{630}\gamma_{42} - \frac{6737}{84}\gamma_{43} + \frac{263}{63}\gamma_{52} + \frac{1315}{42}\gamma_{53} + \frac{789}{7}\gamma_{54} - \frac{863}{1260}\gamma_{62} - \frac{863}{168}\gamma_{63} - \frac{2589}{140}\gamma_{64} - \frac{863}{18}\gamma_{65} = \frac{54683}{6300} \quad (6.15)$$

$$-\frac{6737}{120960}\beta_{41} + \frac{263}{15120}\beta_{51} - \frac{863}{362880}\beta_{61} + \frac{15236}{945}\gamma_{32} - \frac{6737}{840}\gamma_{42} - \frac{249269}{3360}\gamma_{43} + \frac{263}{105}\gamma_{52} + \frac{9731}{420}\gamma_{53} + \frac{10783}{105}\gamma_{54} - \frac{863}{2520}\gamma_{62} - \frac{31931}{10080}\gamma_{63} - \frac{35383}{2520}\gamma_{64} - \frac{14671}{336}\gamma_{65} = \frac{22237}{10080} \quad (6.16)$$

e mais quatro equações não lineares, que não são aqui apresentadas por serem muita extensas, mas que podem ser vistas no apêndice (equações (A.4), (A.5), (A.6) e (A.7)).

Vamos trabalhar então primeiramente com as equações (6.11), (6.13) e (6.14), ou seja, escalonamos essas equações e obtemos

$$\begin{aligned} \beta_{61} &= -\frac{295524}{863} + \frac{450048}{863}\gamma_{32} - 24\gamma_{63} - 96\gamma_{64} - 240\gamma_{65}, \\ \beta_{51} &= -\frac{47645}{263} + \frac{56256}{263}\gamma_{32} - 24\gamma_{53} - 96\gamma_{54}, \\ \beta_{41} &= -\frac{547288}{6737} + \frac{450048}{6737}\gamma_{32} - 24\gamma_{43}. \end{aligned}$$

Tomemos agora, as equações (6.12), (6.15) e (6.16) onde substituindo os coeficientes anteriores e efetuando o escalonamento, encontramos

$$\begin{aligned}\gamma_{53} &= -\frac{74}{34453} + \frac{6737}{2104}\gamma_{43} - \frac{944}{131}\gamma_{54} + \frac{863}{6312}\gamma_{63} + \frac{101834}{103359}\gamma_{64} + \frac{1600865}{413436}\gamma_{65}, \\ \gamma_{42} &= -\frac{564}{33685} + \frac{75008}{20211}\gamma_{32} - \frac{69}{10}\gamma_{43} + \frac{863}{20211}\gamma_{62} + \frac{19849}{67370}\gamma_{63} + \frac{35383}{33685}\gamma_{64} + \frac{55232}{20211}\gamma_{65}, \\ \gamma_{52} &= -\frac{18477}{689060} + \frac{4688}{789}\gamma_{32} - \frac{464853}{21040}\gamma_{43} + \frac{3291}{131}\gamma_{54} + \frac{863}{3156}\gamma_{62} + \frac{19849}{21040}\gamma_{63} - \frac{49191}{689060}\gamma_{64} - \\ &\quad \frac{7621153}{826872}\gamma_{65}.\end{aligned}$$

Substituindo todos esses coeficientes encontrados nos dois escalonamentos, nas cinco equações extensas que citamos anteriormente, obtemos

$$\left(\frac{88299357}{247113160} - \frac{6794342}{13238205}\gamma_{32}\right)\gamma_{54} - \left(\frac{96580919}{1976905280} - \frac{11147371}{158858460}\gamma_{32}\right)\gamma_{64} - \left(\frac{21738107}{69457248} - \frac{17336807}{38587360}\gamma_{32}\right)\gamma_{65} = \frac{49}{62880} + \frac{37}{55020}\gamma_{32}$$

$$\left(-\frac{35417947}{370669740} + \frac{18834482}{92667435}\gamma_{32}\right)\gamma_{54} + \left(\frac{116219347}{8896073760} - \frac{30901441}{1112009220}\gamma_{32}\right)\gamma_{64} + \left(\frac{11630651}{138914496} - \frac{12379735}{69457248}\gamma_{32}\right)\gamma_{65} = -\frac{101}{220080} + \frac{37}{18340}\gamma_{32}$$

$$\begin{aligned}&\left(\frac{88299357}{49422632} - \frac{6794342}{2647641}\gamma_{32}\right)\gamma_{54} + \left(\frac{863}{28800} - \frac{863}{20160}\gamma_{32}\right)\gamma_{63} - \left(\frac{3433644853}{44480368800} - \frac{125161753}{1112009220}\gamma_{32}\right)\gamma_{64} - \\ &\left(\frac{714847927}{694572480} - \frac{515160083}{347286240}\gamma_{32}\right)\gamma_{65} = -\frac{3739}{2200800} + \frac{37}{11004}\gamma_{32} + \frac{6737}{9600}\gamma_{43} - \frac{6737}{6720}\gamma_{32}\gamma_{43}\end{aligned}$$

e outras duas equações que, por serem extensas, estão no apêndice (ver equações (A.8) e (A.9)).

Escalonando então essas três equações, vamos encontrar os seguintes resultados

$$\begin{aligned}\gamma_{65} &= -\frac{6312}{863}, \\ \gamma_{54} &= \frac{-40422 + 863\gamma_{64}}{6312}, \\ \gamma_{63} &= [-5313552744 - 953130549\gamma_{43} + 226922398\gamma_{64} + 10\gamma_{32}(136161507\gamma_{43} - \\ &\quad 37504(-20211 + 863\gamma_{64}))]/5814031(-7 + 10\gamma_{32}).\end{aligned}$$

Voltando aos coeficientes γ_{52} , γ_{42} , γ_{53} , β_{51} , β_{61} , γ_{61} e γ_{51} que encontramos, e substituindo esses três coeficientes dados acima, obtemos longas expressões. Sendo assim, vamos escrevê-las em termos de γ_{32} e γ_{43} . Temos que em β_{51} , γ_{51} e γ_{41} , também podemos substituir os novos resultados dos coeficientes γ_{53} , γ_{52} e γ_{42} .

Assim, como temos os coeficientes β_{41} , γ_{41} e γ_{42} , podemos tomar a equação de β_{41} dado por (6.9) e então encontrarmos

$$\gamma_{62} = (17695013454 - 26972334044\gamma_{32} + 25266444480\gamma_{32}^2 + 4765652745\gamma_{43} - 6808075350\gamma_{32}\gamma_{43} - 564588408\gamma_{64} + 802999062\gamma_{32}\gamma_{64})/5814031(-7 + 10\gamma_{32}).$$

Em seguida, tomando esse resultado e os coeficientes β_{61} , γ_{61} , γ_{63} e γ_{65} , e substituindo na equação de β_{61} , também dado por (6.9), obtemos

$$\gamma_{64} = \frac{40422(-65 + 348\gamma_{32})}{863(-144 + 773\gamma_{32})},$$

concluindo então que $\gamma_{32} \neq \frac{144}{773}$.

Podemos substituir γ_{64} em γ_{62} , γ_{63} e γ_{54} , e assim encontrarmos

$$\gamma_{62} = \frac{28990592\gamma_{32}^2 + 144(122101 + 101055\gamma_{43}) - 3\gamma_{32}(33434466 + 26038505\gamma_{43})}{863(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\gamma_{63} = \frac{3(-4(131257 + 242532\gamma_{43}) + \gamma_{32}(2887808 + 5207701\gamma_{43}))}{863(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\gamma_{54} = \frac{-6737(-79 + 425\gamma_{32})}{1052(-144 + 773\gamma_{32})}.$$

Substituindo então γ_{62} e γ_{64} nas longas expressões dos coeficientes citados anteriormente, obtemos

$$\gamma_{41} = \frac{328928 - 300032\gamma_{32} + 128003\gamma_{43}}{6737},$$

$$\gamma_{42} = \frac{-694 + 37504\gamma_{32} - 33685\gamma_{43}}{6737},$$

$$\gamma_{51} = \frac{33744062 - 202953864\gamma_{32} + 115962368\gamma_{32}^2 + 18432432\gamma_{43} - 98946319\gamma_{32}\gamma_{43}}{151488 - 813196\gamma_{32}},$$

$$\gamma_{52} = \frac{7440648 - 42728558\gamma_{32} + 14495296\gamma_{32}^2 + 4850640\gamma_{43} - 26038505\gamma_{32}\gamma_{43}}{1052(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\gamma_{53} = \frac{-2962802 + 15939200\gamma_{32} - 970128\gamma_{43} + 5207701\gamma_{32}\gamma_{43}}{1052(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\gamma_{61} = \frac{-(83935668 + 231924736\gamma_{32}^2 + 55297296\gamma_{43} - 3\gamma_{32}(165015100 + 98946319\gamma_{43}))}{863(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\beta_{51} = \frac{11864340 - 71848249\gamma_{32} + 43485888\gamma_{32}^2 + 5820768\gamma_{43} - 31246206\gamma_{32}\gamma_{43}}{263(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\beta_{61} = \frac{12(28990592\gamma_{32}^2 + 72(132463 + 80844\gamma_{43}) - 3\gamma_{32}(18905141 + 10415402\gamma_{43}))}{863(-144 + 773\gamma_{32})}.$$

Conseguimos encontrar os coeficientes γ_{40} , γ_{50} e γ_{60} pelas equações de β_{41} , β_{51} e β_{61} dadas em (6.7), então

$$\gamma_{40} = \frac{246002 - 187520\gamma_{32} + 60633\gamma_{43}}{6737},$$

$$\gamma_{50} = \frac{-(19480807 - 118157695\gamma_{32} + 72476480\gamma_{32}^2 + 8731152\gamma_{43} - 46869309\gamma_{32}\gamma_{43})}{1052(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\gamma_{60} = \frac{-(45546954 - 271994664\gamma_{32} + 144952960\gamma_{32}^2 + 26193456\gamma_{43} - 140607927\gamma_{32}\gamma_{43})}{863(-144 + 773\gamma_{32})}.$$

E, enfim, obtemos β_{40} , β_{50} e β_{60} a partir de

$$\beta_{j0} + \beta_{j1} = 1, \quad j = 4, 5, 6.$$

Logo,

$$\beta_{40} = \frac{554025 - 450048\gamma_{32} + 161688\gamma_{43}}{6737},$$

$$\beta_{50} = \frac{-2(5951106 - 36025774\gamma_{32} + 21742944\gamma_{32}^2 + 2910384\gamma_{43} - 156263103\gamma_{32}\gamma_{43})}{263(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\beta_{60} = \frac{114572304 - 681252175\gamma_{32} + 347887104\gamma_{32}^2 + 69849216\gamma_{43} - 374954472\gamma_{32}\gamma_{43}}{124272 - 667099\gamma_{32}}.$$

Portanto, encontramos todos os coeficientes que compõem o método estendido de passo um definido pelas equações (6.1), (6.2), (6.3), (6.4), (6.5) e (6.6).

6.2 Análise da Estabilidade

Ao aplicarmos esse método à equação linear teste (1.41), obtemos

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

com $\hat{h} = h\lambda$, onde, por (2.7),

$$R(\hat{h}) = \frac{P(\hat{h})}{Q(\hat{h})}$$

com,

$$\begin{aligned}
P(\hat{h}) = & 1 + (\alpha_0 + \alpha_2\beta_{20} + \alpha_3\beta_{30} + \alpha_4\beta_{40} + \alpha_5\beta_{50} + \alpha_6\beta_{60})\hat{h} + (\alpha_2\gamma_{20} + \alpha_3(\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{32}) + \\
& \alpha_4(\gamma_{40} + \beta_{20}\gamma_{42} + \beta_{30}\gamma_{43}) + \alpha_5(\gamma_{50} + \beta_{20}\gamma_{52} + \beta_{30}\gamma_{53} + \beta_{40}\gamma_{54}) + \alpha_6(\gamma_{60} + \beta_{20}\gamma_{62} + \\
& \beta_{30}\gamma_{63} + \beta_{40}\gamma_{64} + \beta_{50}\gamma_{65}))\hat{h}^2 + (\alpha_3\gamma_{32}\gamma_{20} + \alpha_4(\gamma_{42}\gamma_{20} + \gamma_{43}\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{43}\gamma_{32}) + \\
& \alpha_5(\gamma_{52}\gamma_{20} + \gamma_{53}\gamma_{30} + \gamma_{54}\gamma_{40} + \beta_{20}\gamma_{54}\gamma_{42} + \beta_{30}\gamma_{54}\gamma_{43}) + \alpha_6(\gamma_{62}\gamma_{20} + \gamma_{63}\gamma_{30} + \gamma_{64}\gamma_{40} + \\
& \gamma_{65}\gamma_{50} + \beta_{20}\gamma_{63}\gamma_{32} + \beta_{20}\gamma_{64}\gamma_{42} + \beta_{20}\gamma_{65}\gamma_{52} + \beta_{30}\gamma_{64}\gamma_{43} + \beta_{30}\gamma_{65}\gamma_{53} + \beta_{40}\gamma_{65}\gamma_{54}))\hat{h}^3 + \\
& (\alpha_4\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{20} + \alpha_5(\gamma_{53}\gamma_{32}\gamma_{20} + \gamma_{54}\gamma_{42}\gamma_{20} + \gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}) + \alpha_6(\gamma_{63}\gamma_{32}\gamma_{20} + \\
& \gamma_{64}\gamma_{42}\gamma_{20} + \gamma_{65}\gamma_{52}\gamma_{20} + \gamma_{64}\gamma_{43}\gamma_{30} + \gamma_{65}\gamma_{53}\gamma_{30} + \gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{40} + \beta_{20}\gamma_{64}\gamma_{43}\gamma_{32} + \\
& \beta_{20}\gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{42} + \beta_{30}\gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{43}))\hat{h}^4 + (\alpha_5\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{20} + \alpha_6(\gamma_{64}\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{20} + \gamma_{65}\gamma_{53}\gamma_{32}\gamma_{20} + \\
& \gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{42}\gamma_{20} + \gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{30} + \beta_{20}\gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}))\hat{h}^5 + \alpha_6\gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{20}\hat{h}^6
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
Q(\hat{h}) = & 1 - (\alpha_1 + \alpha_2\beta_{21} + \alpha_3\beta_{31} + \alpha_4\beta_{41} + \alpha_5\beta_{51} + \alpha_6\beta_{61})\hat{h} - (\alpha_2\gamma_{21} + \alpha_3(\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{32}) + \\
& \alpha_4(\gamma_{41} + \beta_{21}\gamma_{42} + \beta_{31}\gamma_{43}) + \alpha_5(\gamma_{51} + \beta_{21}\gamma_{52} + \beta_{31}\gamma_{53} + \beta_{41}\gamma_{54}) + \alpha_6(\gamma_{61} + \beta_{21}\gamma_{62} + \\
& \beta_{31}\gamma_{63} + \beta_{41}\gamma_{64} + \beta_{51}\gamma_{65}))\hat{h}^2 - (\alpha_3\gamma_{32}\gamma_{21} + \alpha_4(\gamma_{42}\gamma_{21} + \gamma_{43}\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{43}\gamma_{32}) + \\
& \alpha_5(\gamma_{52}\gamma_{21} + \gamma_{53}\gamma_{31} + \gamma_{54}\gamma_{41} + \beta_{21}\gamma_{54}\gamma_{42} + \beta_{31}\gamma_{54}\gamma_{43}) + \alpha_6(\gamma_{62}\gamma_{21} + \gamma_{63}\gamma_{31} + \gamma_{64}\gamma_{41} + \\
& \gamma_{65}\gamma_{51} + \beta_{21}\gamma_{63}\gamma_{32} + \beta_{21}\gamma_{64}\gamma_{42} + \beta_{21}\gamma_{65}\gamma_{52} + \beta_{31}\gamma_{64}\gamma_{43} + \beta_{31}\gamma_{65}\gamma_{53} + \beta_{41}\gamma_{65}\gamma_{54}))\hat{h}^3 - \\
& (\alpha_4\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{21} + \alpha_5(\gamma_{53}\gamma_{32}\gamma_{21} + \gamma_{54}\gamma_{42}\gamma_{21} + \gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}) + \alpha_6(\gamma_{63}\gamma_{32}\gamma_{21} + \\
& \gamma_{64}\gamma_{42}\gamma_{21} + \gamma_{65}\gamma_{52}\gamma_{21} + \gamma_{64}\gamma_{43}\gamma_{31} + \gamma_{65}\gamma_{53}\gamma_{31} + \gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{41} + \beta_{21}\gamma_{64}\gamma_{43}\gamma_{32} + \\
& \beta_{21}\gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{42} + \beta_{31}\gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{43}))\hat{h}^4 - (\alpha_5\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{21} + \alpha_6(\gamma_{64}\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{21} + \gamma_{65}\gamma_{53}\gamma_{32}\gamma_{21} + \\
& \gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{42}\gamma_{21} + \gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{31} + \beta_{21}\gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}))\hat{h}^5 - \alpha_6\gamma_{65}\gamma_{54}\gamma_{43}\gamma_{32}\gamma_{21}\hat{h}^6.
\end{aligned}$$

Assim, substituindo os valores encontrados na seção anterior, temos

$$\begin{aligned}
P(\hat{h}) = & 1 + 6\hat{h} - ((-4739 + 25486\gamma_{32})/(288 - 1546\gamma_{32}))\hat{h}^2 - ((417766 - \gamma_{32}(2247176 - \\
& 2863225\gamma_{43}) - 532223\gamma_{43})/(420(-144 + 773\gamma_{32})))\hat{h}^3 - ((1712172 - \gamma_{32}(24024694 - \\
& 35894736\gamma_{43}) - 6386676\gamma_{43} - 5\gamma_{32}^2(-15939200 + 1664039\gamma_{43}))/((10080(-144 + \\
& 773\gamma_{32})))\hat{h}^4 - ((54826 - 294964\gamma_{32} - 532223\gamma_{43} + 2863225\gamma_{32}\gamma_{43})/(5040(-144 + \\
& 773\gamma_{32})))\hat{h}^5 - ((6737\gamma_{32}(-79 + 425\gamma_{32})\gamma_{43})/(5040(-144 + 773\gamma_{32})))\hat{h}^6
\end{aligned}$$

e



$$Q(\hat{h}) = 1 + 5\hat{h} + ((3155 - 16983\gamma_{32})/(288 - 1546\gamma_{32}))\hat{h}^2 + ((406064 - \gamma_{32}(2185014 + 532223\gamma_{43}))/((420(-144 + 773\gamma_{32})))\hat{h}^3 - ((559257 - 2\gamma_{32}(2985901 + 3981567\gamma_{43}) + 1596669\gamma_{43} + \gamma_{32}^2(15939200 - 3381974\gamma_{43}))/((2520(-144 + 773\gamma_{32})))\hat{h}^4 - ((\gamma_{32}(589928 - 330113\gamma_{43}) - 79(1388 + 6737\gamma_{43}) + 17179350\gamma_{32}^2\gamma_{43}))/((5040(-144 + 773\gamma_{32})))\hat{h}^5 + ((6737\gamma_{32}(-79 + 425\gamma_{32})\gamma_{43}))/((2520(-144 + 773\gamma_{32})))\hat{h}^6.$$

Mais uma vez, como nos casos anteriores, vamos fazer algumas observações quanto às propriedades da estabilidade.

Para $\gamma_{32} \neq 0$ e $\gamma_{43} \neq 0$ temos métodos **A-estáveis**, pois

$$\lim_{\text{Re } \hat{h} \rightarrow -\infty} |R(\hat{h})| = \frac{1}{2}.$$

Já para obtermos métodos **L - estáveis**, analisando a função de estabilidade, verificamos, da mesma maneira que nos casos anteriores, que será conveniente tomarmos $\gamma_{32} = 0$. Então, consequentemente teremos que $\gamma_{43} = \frac{694}{6737}$ e assim

$$R(\hat{h}) = \frac{1 + 6\hat{h} + (4739/288)\hat{h}^2 + (6049/1008)\hat{h}^3 + (5857/8064)\hat{h}^4}{1 + 5\hat{h} + (3155/288)\hat{h}^2 - (1707/224)\hat{h}^3 + (1787/896)\hat{h}^4 - (27413/120960)\hat{h}^5}.$$

Sendo assim, para esses valores de γ_{32} e γ_{43} obtemos um método **L - estável** dado por

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{19087}{60480} f_n + \frac{2713}{2520} f_{n+1} - \frac{15487}{20160} \hat{f}_{n+2} + \frac{586}{945} \hat{f}_{n+3} - \frac{6737}{20160} \hat{f}_{n+4} + \frac{263}{2520} \hat{f}_{n+5} - \frac{863}{60480} \hat{f}_{n+6} \right]$$

onde

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

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

$$\hat{y}_{n+4} = \frac{570681}{6737} y_n - \frac{563944}{6737} y_{n+1} + h \left[\frac{252248}{6737} f_n + \frac{342114}{6737} f_{n+1} - \frac{4164}{6737} \hat{f}_{n+2} + \frac{694}{6737} \hat{f}_{n+3} \right],$$

$$\hat{y}_{n+5} = \frac{347273}{1052} y_n - \frac{346221}{1052} y_{n+1} + h \left[\frac{20380231}{151488} f_n + \frac{17821423}{75744} f_{n+1} - \frac{330847}{6312} \hat{f}_{n+2} + \frac{1531369}{75744} \hat{f}_{n+3} - \frac{532223}{151488} \hat{f}_{n+4} \right],$$

$$\hat{y}_{n+6} = \frac{845609}{863}y_n - \frac{844746}{863}y_{n+1} + h\left[\frac{8040871}{20712}f_n + \frac{7469335}{10356}f_{n+1} - \frac{132511}{863}\hat{f}_{n+2} + \frac{156241}{10356}\hat{f}_{n+3} + \frac{437905}{20712}\hat{f}_{n+4} - \frac{6312}{863}\hat{f}_{n+5}\right].$$

6.3 Cálculo da Ordem de Estágio

Durante a construção desse método estendido, objetivando simplificar o número de equações que tínhamos para trabalharmos, utilizamos as condições de simplificação (6.8), as quais nos fizeram admitir ordem de estágio máxima igual a 3.

Vamos agora verificar se este resultado é realmente válido. Temos que

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{19087}{60480} & \frac{2713}{2520} & \frac{-15487}{20160} & \frac{586}{945} & \frac{-6737}{20160} & \frac{263}{2520} & \frac{-863}{60480} \\ \frac{11153}{15120} & \frac{-193}{630} & \frac{15487}{5040} & \frac{-2344}{945} & \frac{6737}{5040} & \frac{-263}{630} & \frac{863}{15120} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} & a_{47} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} & a_{57} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & a_{66} & a_{67} \\ a_{71} & a_{72} & a_{73} & a_{74} & a_{75} & a_{76} & a_{77} \end{pmatrix},$$

onde

$$a_{41} = (70137 - 24452\gamma_{32})/20160, \quad a_{42} = (1033(-9 + 4\gamma_{32}))/840,$$

$$a_{43} = (139383 - 55228\gamma_{32})/6720, \quad a_{44} = (586(-9 + 4\gamma_{32}))/315,$$

$$a_{45} = (-6737(-9 + 4\gamma_{32}))/6720, \quad a_{46} = (263(-9 + 4\gamma_{32}))/840,$$

$$a_{47} = (-863(-9 + 4\gamma_{32}))/20160,$$

$$a_{51} = (554014363 - 343892928\gamma_{32} + 72618123\gamma_{43})/50931720,$$

$$a_{52} = (-81986723 + 58112448\gamma_{32} - 14511498\gamma_{43})/2122155,$$

$$a_{53} = (1057732277 - 776726592\gamma_{32} + 228121557\gamma_{43})/16977240,$$

$$a_{54} = (-320710768 + 263728128\gamma_{32} - 88382703\gamma_{43})/6366465,$$

$$a_{55} = (68411 - 56256\gamma_{32} + 20211\gamma_{43})/2520,$$

$$a_{56} = (263(-68411 + 56256\gamma_{32} - 20211\gamma_{43}))/2122155,$$

$$\begin{aligned}
a_{57} &= (-863(-68411 + 56256\gamma_{32} - 20211\gamma_{43}))/50931720, \\
a_{61} &= (-265829233344\gamma_{32}^2 - 108(630510595 + 193648328\gamma_{43}) + \\
&\quad \gamma_{32}(415176819737 + 112267618158\gamma_{43}))/ (15906240(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{62} &= (44920922304\gamma_{32}^2 + 288(37948595 + 14511498\gamma_{43}) - \\
&\quad \gamma_{32}(67063365217 + 22434775908\gamma_{43}))/ (662760(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{63} &= (-600409655616\gamma_{32}^2 - 108(1354094145 + 608324152\gamma_{43}) + \\
&\quad \gamma_{32}(897361899943 + 352675927122\gamma_{43}))/ (5302080(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{64} &= (101930921472\gamma_{32}^2 + 54(463151205 + 235687208\gamma_{43}) - \\
&\quad \gamma_{32}(153349751656 + 68319829419\gamma_{43}))/ (994140(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{65} &= -(6737(11466180 - 69706249\gamma_{32} + 43485888\gamma_{32}^2 + 5820768\gamma_{43} - \\
&\quad 31246206\gamma_{32}\gamma_{43}))/ (5302080(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{66} &= (11864340 - 71848249\gamma_{32} + 43485888\gamma_{32}^2 + 5820768\gamma_{43} - \\
&\quad 31246206\gamma_{32}\gamma_{43})/ (2520(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{67} &= -(863(11864340 - 71848249\gamma_{32} + 43485888\gamma_{32}^2 + 5820768\gamma_{43} - \\
&\quad 31246206\gamma_{32}\gamma_{43}))/ (15906240(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{71} &= (-177219488896\gamma_{32}^2 - 72(659965499 + 290472492\gamma_{43}) + \\
&\quad 3\gamma_{32}(96108609253 + 37422539386\gamma_{43}))/ (4349520(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{72} &= (29947281536\gamma_{32}^2 + 144(57279877 + 29022996\gamma_{43}) - \\
&\quad 3\gamma_{32}(16636476533 + 7478258636\gamma_{43}))/ (181230(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{73} &= (-400273103744\gamma_{32}^2 - 72(1641195121 + 912486228\gamma_{43}) + \\
&\quad 3\gamma_{32}(236614015787 + 117558642374\gamma_{43}))/ (1449840(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{74} &= (67953947648\gamma_{32}^2 + 36(607204559 + 353530812\gamma_{43}) - \\
&\quad 3\gamma_{32}(43403990984 + 22773276473\gamma_{43}))/ (271845(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{75} &= [-6737(28990592\gamma_{32}^2 + 72(141563 + 80844\gamma_{43}) - 3\gamma_{32}(20074421 + \\
&\quad 10415402\gamma_{43}))]/ (1449840(-144 + 773\gamma_{32})), \\
a_{76} &= [263(28990592\gamma_{32}^2 + 72(142543 + 80844\gamma_{43}) - 3\gamma_{32}(20203781 + \\
&\quad 10415402\gamma_{43}))]/ (181230(-144 + 773\gamma_{32})),
\end{aligned}$$



$$a_{77} = (-28990592\gamma_{32}^2 - 72(132463 + 80844\gamma_{43}) + 3\gamma_{32}(18905141 + 10415402\gamma_{43})) / (5040(-144 + 773\gamma_{32})).$$

Ao desenvolvermos $c^2 = 2Ac$, encontramos que essa condição é satisfeita.

Desenvolvemos então $c^3 = 3Ac^2$ e obtemos também a validade dessa condição.

Quanto à condição $c^4 = 4Ac^3$, não conseguimos um resultado satisfatório, pois

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 16 \\ 81 \\ 256 \\ 625 \\ 1296 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 12 \\ 45 + 12\gamma_{32} \\ (8(93277 + 56256\gamma_{32}))/6737 \\ (3(19185 + 18752\gamma_{32}))/263 \\ (12(27153 + 37504\gamma_{32}))/863 \end{pmatrix},$$

para qualquer valor de γ_{32} .

Assim, temos que a ordem de estágio é $q = 3$, já que (2.6) é válida para $k = 1, 2$.

7.1 Preliminares

Antes de iniciarmos a descrição do algoritmo, é importante citarmos algumas definições que serão necessárias durante o seu desenvolvimento.

Capítulo 7

Sistemas *Stiff*: Um Algoritmo com Passo e Ordem Variáveis

Nos capítulos anteriores, apresentamos uma teoria geral para métodos estendidos de passo um estabilizados, baseados nas fórmulas de Runge - Kutta, que permitiu restabelecer uma família de métodos obtidos anteriormente em [18], [10], [4], [5] e construirmos novos métodos de ordens mais altas pertencentes à mesma família. Todos esses métodos, em geral, dependiam de parâmetros, o que foi significativo na procura das condições paramétricas que revelariam as sub-famílias de métodos **A-** e **L- estáveis**. Usando alguns métodos particulares desta família, Van Hecke e outros [23] desenvolveram um algoritmo, com passo e ordem variáveis, que foi testado em alguns problemas de valor inicial para sistemas de equações diferenciais ordinárias.

O objetivo deste capítulo é descrever o referido algoritmo e utilizando o código nele baseado ilustrá-lo através de resultados numéricos obtidos com a resolução de problemas do tipo *stiff*. Os problemas teste foram escolhidos do conjunto de problemas teste fornecidos em CWI [22].

7.1 Preliminares

Antes de iniciarmos a descrição do algoritmo, é importante citarmos algumas definições que serão necessárias durante o seu desenvolvimento.



A primeira, se refere a uma outra forma de escrevermos os *métodos estendidos de passo um*, que é:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^p w_i f(x_{n+\alpha_i}, y_{n+\alpha_i}),$$

onde

$$y_{n+\alpha_i} \approx \bar{y}_{n+\alpha_i} = \delta_i y_{n+1} + (1 - \delta_i) y_n + h \sum_{j=1}^{m(i)} a_{ij} f(x_{n+\alpha_j}, \bar{y}_{n+\alpha_j}), \quad (7.1)$$

e

$$\alpha_i = \delta_i + \sum_{j=1}^{m(i)} a_{ij}.$$

Os inteiros $m(i)$ devem satisfazer $m(i) \leq p$. Note que se em (7.1), tomarmos $m(i) = i - 1$ e $\delta_i \equiv 0$, temos a *fórmula de Runge - Kutta explícita*. Se tomarmos $m(i) = i$, $\delta_i = 0$ e $a_{ii} = \beta_i$, para todo i , encontramos a *fórmula de Runge - Kutta diagonalmente implícita* e se tomarmos $m(i) = p$ e $\delta_i = 0$, obtemos a *fórmula de Runge - Kutta implícita*. Se, entretanto, tomarmos $m(i) = i - 1$ e $\delta_i \neq 0$ para ao menos um i , temos uma fórmula implícita apenas na incógnita y_{n+1} , que é conhecida como **fórmula de Runge - Kutta mono-implícita**, a qual é usualmente denotada por *MIRK*.

Agora, analisando a implementação dos métodos estendidos de passo um, consideremos um sistema de primeira ordem (em geral, não linear) de m equações diferenciais:

$$\begin{cases} {}^1y' = {}^1f(x, {}^1y, {}^2y, \dots, {}^my) \\ {}^2y' = {}^2f(x, {}^1y, {}^2y, \dots, {}^my) \\ \vdots \\ {}^my' = {}^mf(x, {}^1y, {}^2y, \dots, {}^my). \end{cases}$$

Aplicando a este sistema, as fórmulas dos métodos estendidos de passo um, reescritas na forma padrão que exhibe suas características mono-implícitas (7.1), obtemos

$$\begin{aligned} {}^1y_{n+1} &= {}^1H(x_n, {}^1y_n, {}^1y_{n+1}) \\ {}^2y_{n+1} &= {}^2H(x_n, {}^2y_n, {}^2y_{n+1}) \\ &\vdots \\ {}^my_{n+1} &= {}^mH(x_n, {}^my_n, {}^my_{n+1}) \end{aligned} \quad (7.2)$$

onde my_n é a solução numérica no ponto x_n .

Como estamos trabalhando com métodos implícitos, a forma de obtermos $\mathbf{y}_{n+1}$ é resolvermos iterativamente uma equação ou um sistema não linear, em geral, pelo *método de Newton*.

Assim, conhecendo os valores x_n , x_{n+1} e o valor inicial $\mathbf{y}_n$, determinamos $\mathbf{y}_{n+1}$, que é uma aproximação para a solução de:

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n+1}) = \begin{bmatrix} {}^1y_{n+1} - {}^1H(x_n, {}^1y_n, {}^1y_{n+1}) \\ {}^2y_{n+1} - {}^2H(x_n, {}^2y_n, {}^2y_{n+1}) \\ \vdots \\ {}^my_{n+1} - {}^mH(x_n, {}^my_n, {}^my_{n+1}) \end{bmatrix} = \mathbf{0}.$$

7.2 Método de Newton para Sistemas

A iteração de Newton aplicada ao sistema $\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n+1}) = \mathbf{0}$, $\mathbf{F} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, tem a seguinte forma:

$$\mathbf{G}(\mathbf{y}_{n+1}^{(k)}) = \mathbf{y}_{n+1}^{(k)} - \mathbf{J}_{\mathbf{F}}^{-1}(\mathbf{y}_{n+1}^{(k)})\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n+1}^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots$$

onde $\mathbf{J}_{\mathbf{F}}(\mathbf{y}_{n+1}) = (\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{y}_{n+1})$ é a matriz Jacobiana de $\mathbf{F}$ em relação a $\mathbf{y}_{n+1}$.

Para evitarmos o cálculo computacionalmente “pesado” da matriz inversa fazemos uma pequena alteração no método, de forma a substituírmos este cálculo pela resolução de um sistema linear. Logo, o método de Newton toma a forma:

$$\mathbf{J}_{\mathbf{F}}(\mathbf{y}_{n+1}^{(k)})\mathbf{Z} = -\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n+1}^{(k)}),$$

onde $\mathbf{Z}$ é determinado resolvendo o sistema linear acima e, então,

$$\mathbf{y}_{n+1}^{(k+1)} = \mathbf{y}_{n+1}^{(k)} + \mathbf{Z}.$$

Assim, escrevendo o método de Newton, e fazendo as devidas substituições para nossos métodos, encontramos:

$$(I - B^{(k)})(\mathbf{y}_{n+1}^{(k+1)} - \mathbf{y}_{n+1}^{(k)}) = \mathbf{H}(x_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{y}_{n+1}^{(k)}) - \mathbf{y}_{n+1}^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (7.2)$$

onde a matriz $B^{(k)}$ é, em geral, expressa em termos dos produtos das matrizes Jacobianas do sistema calculadas nos pontos x_{n+1} , x_{n+2} , $\dots$. Expressões explícitas para tais matrizes

$B^{(k)}$ são dadas em [3].

7.3 Algoritmo e Implementação

O presente código é baseado nos seguintes métodos **L - estáveis** de ordem 2 a 6, obtidos ao atribuímos os valores indicados aos parâmetros t e s das fórmulas encontradas anteriormente, onde $\hat{f}_i = f(x_i, \hat{y}_i)$:

Ordem 2: Regra do Trapézio:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f_n + f_{n+1}]. \quad (7.3)$$

Ordem 3: $t = 0$

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h\left[\frac{5}{12}f_n + \frac{2}{3}f_{n+1} - \frac{1}{12}\hat{f}_{n+2}\right], \\ \hat{y}_{n+2} &= y_n + 2hf_{n+1}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Ordem 4: $t = 1/4, s = 0$

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h\left[\frac{3}{8}f_n + \frac{19}{24}f_{n+1} - \frac{5}{24}\hat{f}_{n+2} + \frac{1}{24}\hat{f}_{n+3}\right], \\ \hat{y}_{n+2} &= y_n + 2hf_{n+1}, \\ \hat{y}_{n+3} &= 5y_n - 4y_{n+1} + h\left[\frac{3}{4}f_n + 6f_{n+1} + \frac{1}{4}\hat{f}_{n+2}\right]. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Ordem 5: $t = 0, s = 2/19$

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h\left[\frac{251}{720}f_n + \frac{323}{360}f_{n+1} - \frac{11}{30}\hat{f}_{n+2} + \frac{53}{360}\hat{f}_{n+3} - \frac{19}{720}\hat{f}_{n+4}\right], \\ \hat{y}_{n+2} &= 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f_n + 4f_{n+1}], \\ \hat{y}_{n+3} &= 28y_n - 27y_{n+1} + h[12f_n + 18f_{n+1}], \\ \hat{y}_{n+4} &= \frac{1611}{19}y_n - \frac{1592}{19}y_{n+1} + h\left[\frac{712}{19}f_n + \frac{966}{19}f_{n+1} - \frac{12}{19}\hat{f}_{n+2} + \frac{2}{19}\hat{f}_{n+3}\right]. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Ordem 6: $t = 0, s = 18/173$

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h\left[\frac{95}{288}f_n + \frac{1427}{1440}f_{n+1} - \frac{133}{240}\hat{f}_{n+2} + \frac{241}{720}\hat{f}_{n+3} - \frac{173}{1440}\hat{f}_{n+4} + \frac{3}{160}\hat{f}_{n+5}\right], \\ \hat{y}_{n+2} &= 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f_n + 4f_{n+1}], \\ \hat{y}_{n+3} &= 28y_n - 27y_{n+1} + h[12f_n + 18f_{n+1}], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{y}_{n+4} &= \frac{14661}{173}y_n - \frac{14488}{173}y_{n+1} + h\left[\frac{6480}{173}f_n + \frac{8790}{173}f_{n+1} - \frac{108}{173}\hat{f}_{n+2} + \frac{18}{173}\hat{f}_{n+3}\right], \\ \hat{y}_{n+5} &= 440y_n - 439y_{n+1} + h\left[\frac{4667}{27}f_n + \frac{9014}{27}f_{n+1} - \frac{2502}{27}\hat{f}_{n+2} + \frac{982}{27}\hat{f}_{n+3} - \frac{173}{27}\hat{f}_{n+4}\right].\end{aligned}\quad (7.7)$$

Vale notarmos que considerando a classificação das fórmulas de Runge - Kutta os métodos de ordem 3 e 4 tem ordem de estágio 2 enquanto os de ordem 5 e 6 tem ordem de estágio 3.

Examinamos, a seguir, certos aspectos computacionais relevantes do algoritmo, baseado nas fórmulas (7.3)-(7.7).

Como entrada toma-se os dados fornecidos por CWI [22], isto é, o vetor inicial y_0 do problema considerado, os parâmetros especiais ocorridos no problema, a função $f(x, y)$, o Jacobiano do sistema provido na forma analítica, as tolerâncias escolhidas para o erro relativo $rtol$ e absoluto $atol$, o tamanho do passo inicial h_0 usado, os pontos inicial e final do intervalo de integração e a solução “exata” no ponto final proposto.

A saída do programa contém o número total de passos aceitos e rejeitados, o número de avaliações da função f , o número de avaliações do Jacobiano, o número de decomposições LU necessárias na resolução do sistema não linear algébrico pelo método de Newton e o número mínimo de dígitos significativos corretos na solução numérica no ponto final, dado por

$$scd = -\log(\text{da norma do máximo do erro relativo no ponto final}). \quad (7.8)$$

Cada uma das fórmulas (7.3)-(7.7) pode ser reescrita na seguinte forma padrão que exhibe suas características mono-implícitas:

$$y_{n+1} = H(x_n, y_n, y_{n+1}).$$

A solução desejada será produzida pela iteração de Newton, isto é, (7.2). Mas, usa-se o chamado **esquema de iteração de Newton modificado**, o qual toma todos os Jacobianos nos diferentes pontos igual ao Jacobiano $J = J(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)})$. Dessa maneira, a matriz B reduz-se a um polinômio em J . As seguintes matrizes B foram encontradas após alguns cálculos e elas são referentes aos métodos (7.3)-(7.7):

Ordem 2:

$$B = \frac{1}{2}h\mathbf{J}.$$

Ordem 3:

$$B = \frac{2}{3}h\mathbf{J} - \frac{1}{6}h^2\mathbf{J}^2.$$

Ordem 4:

$$B = \frac{5}{8}h\mathbf{J} - \frac{1}{6}h^2\mathbf{J}^2 + \frac{1}{48}h^3\mathbf{J}^3.$$

Ordem 5:

$$B = \frac{3}{5}h\mathbf{J} - \frac{3}{20}h^2\mathbf{J}^2 + \frac{1}{60}h^3\mathbf{J}^3.$$

Ordem 6:

$$B = -4h\mathbf{J} + \frac{13}{5}h^2\mathbf{J}^2 - \frac{2}{3}h^3\mathbf{J}^3 + \frac{3}{40}h^4\mathbf{J}^4.$$

O número de iterações em (7.2) é restrito a apenas duas, isto é, $k = 0$ e 1 . Com a finalidade de reduzir o esforço computacional, o Jacobiano não é atualizado após a primeira iteração, isto é (7.2) é substituído por

$$(I - B^{(0)})(\mathbf{y}_{n+1}^{(k+1)} - \mathbf{y}_{n+1}^{(k)}) = \mathbf{H}(x_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{y}_{n+1}^{(k)}) - \mathbf{y}_{n+1}^{(k)}, \quad k = 0, 1. \quad (7.9)$$

Isto significa que a decomposição LU de $(I - B^{(0)})$ será realizada somente uma vez por passo de integração. Alguns autores chamam esse tipo de aproximação de **iteração pseudo-Newton**.

A partir do primeiro passo de integração, o algoritmo é iniciado com o método de ordem 4 (7.5). Para a primeira iteração inicial $\mathbf{y}_1^{(0)}$ é usado o *método de Euler explícito*. Do segundo ao décimo passo de iteração aceito, os valores iniciais $\mathbf{y}_{n+1}^{(0)}$ são linearmente extrapolados sob os já aceitos $\mathbf{y}_n$ e $\mathbf{y}_{n-1}$. A partir do décimo passo em diante, a extrapolação é realizada por meio de um polinômio de quinto grau.

Em cada passo seguinte dois métodos de ordem consecutiva, p e $p + 1$, tomados do conjunto (7.3)-(7.7), são iniciados com o mesmo comprimento do passo h , o mesmo $\mathbf{y}_{n+1}^{(0)}$ inicial e o valor aceito $\mathbf{y}_n$ obtido com o método de ordem mais alta previamente em uso. Essa idéia de combinar em um passo dois métodos de ordens consecutivas é inspirada nos *métodos embutidos clássicos de Runge - Kutta explícitos*. Notemos que nos métodos de ordem 3 e 4, $\hat{\mathbf{y}}_{n+2}$ é dado pela mesma expressão, enquanto nos métodos de ordem 5 e 6, $\hat{\mathbf{y}}_{n+2}$ e $\hat{\mathbf{y}}_{n+3}$ são respectivamente os mesmos. Por isso, quando o par de métodos (7.4)-(7.5) está

sendo utilizado, na primeira iteração Newtoniana o valor da função $\hat{f}_{n+2}$ é o mesmo para ambos os métodos e assim, ele deve ser avaliado somente uma vez; similarmente, quando o par de métodos (7.6)-(7.7) é utilizado, $\hat{f}_{n+2}$ e $\hat{f}_{n+3}$ são os mesmos para ambos os métodos no primeiro passo da iteração.

A diferença entre os valores de y_{n+1} gerados depois de duas iterações pelos métodos de ordem consecutiva p e $p + 1$ respectivamente, é considerado como uma estimativa para o erro de truncamento local do método de ordem p . Como em muitos métodos embutidos de Runge - Kutta, por exemplo em [7], o método de ordem mais alta sustenta a solução. A diferença entre os valores produzidos pelos métodos de ordem mais alta e mais baixa, mais adiante denotada pelo vetor e , não é uma estimativa representativa do erro de truncamento local do método de ordem mais alta, mas ela é usada como base para o monitoramento do comprimento do passo e da ordem dos próximos métodos a serem usados.

Na verdade, antes de passarmos para o próximo passo de integração, a norma Euclidiana $\| \text{erro} \|$ do vetor com os componentes

$$\text{erro}_i = \frac{e_i}{\text{rtol} | (y_{n+1})_i | + \text{atol}}, \quad (7.9)$$

é calculada. O passo e a estratégia de ordem são então baseados no fator

$$\text{fac} = \left\{ \frac{1}{\| \text{erro} \|} \right\}^{1/p}, \quad (7.10)$$

da seguinte maneira:

se $\text{fac} \geq 0.9$ aceite o passo

se $0.9 \leq \text{fac} < 1.1$ e se a ordem $p + 1 \leq 5$

aumente p por 1 unidade e substitua h por $h * \text{fac}$

se $\text{fac} > 2$ e a ordem $p + 1 \geq 4$

diminua p por 1 unidade

nos casos restantes substitua h por $\min(8 * h, \text{fac} * h)$

se $\text{fac} < 0.9$ rejeite o passo

se o passo foi rejeitado três vezes consecutivamente

aumente p por 1 unidade

senão

substitua h por $\max(\text{fac} * h, h/3)$.

Para compreendermos melhor as definições de (7.9) e (7.10), e também os valores tomados como base para o controle do passo e da ordem, analisamos os artigos de Shampine e Watts [15] e [16].

Uma vez que um passo tomado incluía o ponto final, a solução nesse ponto final é determinada pela interpolação polinomial dos últimos cinco pontos.

7.4 Problemas Testes

7.4.1 Problema Químico Akzo Nobel

Esse p.v.i. é um sistema *stiff* de seis equações diferenciais não lineares de primeira ordem, definido da seguinte forma

$$M \frac{dy}{dt} = f(y), \quad y(0) = y_0, \quad y'(0) = y'_0,$$

com

$$y \in \mathbb{R}^6, \quad 0 \leq t \leq 180.$$

A matriz M é de posto 5 e dada por

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

e a função f por

$$f(y) = \begin{pmatrix} -2r_1 & +r_2 & -r_3 & -r_4 & & \\ -r_1/2 & & & -r_4 & -r_5/2 & +F_{in} \\ r_1 & -r_2 & +r_3 & & & \\ & -r_2 & +r_3 & -2r_4 & & \\ & r_2 & -r_3 & & +r_5 & \\ K_S \cdot y_1 \cdot y_4 & -y_6 & & & & \end{pmatrix},$$

onde os r_i e F_{in} são variáveis auxiliares, dadas por

$$r_1 = k_1 \cdot y_1^4 \cdot y_2^{1/2}, \quad r_2 = k_2 \cdot y_3 \cdot y_4, \quad r_3 = \frac{k_2}{K} \cdot y_1 \cdot y_5,$$

$$r_4 = k_3 \cdot y_1 \cdot y_4^2, \quad r_5 = k_4 \cdot y_6^2 \cdot y_2^{1/2}, \quad F_{in} = klA \cdot \left(\frac{p(CO_2)}{H} - y_2 \right).$$

Os valores dos parâmetros $k_1, k_2, k_3, k_4, K, klA, p(CO_2)$ e H são:

$$k_1 = 18.7, \quad k_2 = 0.58, \quad k_3 = 0.09, \quad k_4 = 0.42, \quad K = 34.4,$$

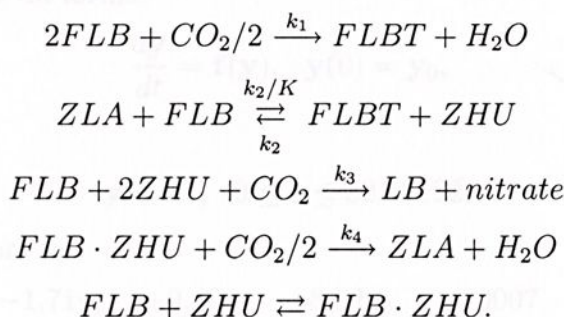
$$klA = 3.3, \quad K_S = 115.83, \quad p(CO_2) = 0.9, \quad H = 737.$$

Os vetores iniciais são:

$$\mathbf{y}_0 = (0.444, 0.00123, 0, 0.007, 0, K_S \cdot y_{0,1} \cdot y_{0,4})^T \quad \text{e} \quad \mathbf{y}'_0 = \mathbf{f}(\mathbf{y}_0).$$

Pela definição de r_1 e r_5 , está claro que a função $\mathbf{f}$ não pode ser avaliada para valores negativos de y_2 .

O problema descreve um processo químico, no qual duas espécies, *FLB* e *ZHU*, são misturadas, enquanto dióxido de carbono é continuamente adicionado. A espécie resultante e de importância é *ZLA*. As equações são:



A última equação de reação descreve um equilíbrio, $K_S = \frac{[FLB \cdot ZHU]}{[FLB] \cdot [ZHU]}$. O valor de K_S representa um parâmetro de estimação. As outras equações descrevem reações com velocidades dadas por r_1, r_2, r_3, r_4 e r_5 onde $y_1, y_2, \dots, y_6$ representam respectivamente as concentrações $[FLB], [CO_2], [FLBT], [ZHU], [ZLA]$ e $[FLB \cdot ZHU]$.

A quantidade de dióxido de carbono por unidade de volume é denotado por F_{in} , onde klA é a massa do coeficiente de transferência, H é a constante de Henry e $p(CO_2)$ é a pressão parcial de dióxido de carbono (independente de $[CO_2]$).

O processo é iniciado misturando-se 0.444 mol/litro de *FLB* com 0.007 mol/litro de *ZHU*. A concentração de dióxido de carbono no começo é 0.00123 mol/litro.

Inicialmente, nenhuma outra espécie está presente. A simulação é realizada no intervalo de tempo $[0, 180 \text{ minutos}]$.

Abaixo temos a solução no ponto final do intervalo de integração, encontrada na descrição do problema, em CWI [22]:

$$\begin{aligned} y_1 &= 0.1150794920661702, & y_2 &= 0.1203831471567715 \cdot 10^{-2}, \\ y_3 &= 0.1611562887407974, & y_4 &= 0.3656156421249283 \cdot 10^{-3}, \\ y_5 &= 0.1708010885264404 \cdot 10^{-1}, & y_6 &= 0.4873531310307455 \cdot 10^{-2}. \end{aligned}$$

7.4.2 Problema HIRES

Neste problema o p.v.i. é um sistema *stiff* com oito equações diferenciais ordinárias não lineares. O nome HIRES refere-se a “High Irradiance Response” (Resposta da Alta Irradiação), o qual é descrito através de equações diferenciais ordinárias.

O problema é da forma

$$\frac{dy}{dt} = f(y), \quad y(0) = y_0,$$

com

$$y \in \mathbb{R}^8, \quad 0 \leq t \leq 321.8122.$$

A função f é definida por

$$f(y) = \begin{pmatrix} -1.71y_1 & +0.43y_2 & +8.32y_3 & +0.0007 & & & & \\ 1.71y_1 & -8.75y_2 & & & & & & \\ -10.03y_3 & +0.43y_4 & +0.035y_5 & & & & & \\ 8.32y_2 & +1.71y_3 & -1.12y_4 & & & & & \\ -1.745y_5 & +0.43y_6 & +0.43y_7 & & & & & \\ -280y_6y_8 & +0.69y_4 & +1.71y_5 & -0.43y_6 & +0.69y_7 & & & \\ 280y_6y_8 & -1.81y_7 & & & & & & \\ -280y_6y_8 & +1.81y_7 & & & & & & \end{pmatrix}.$$

O vetor inicial y_0 é dado por $(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0.0057)^T$.

O problema HIRES origina-se da fisiologia vegetal e descreve a quantidade de luz que está envolvida na morfogênese. Ele explica a “Resposta da Alta Irradiação” de fotomorfogênese na base do fitocromo, por meio de uma reação química envolvendo oito reagentes. O esquema de reação é dado na Figura 7.4.1.

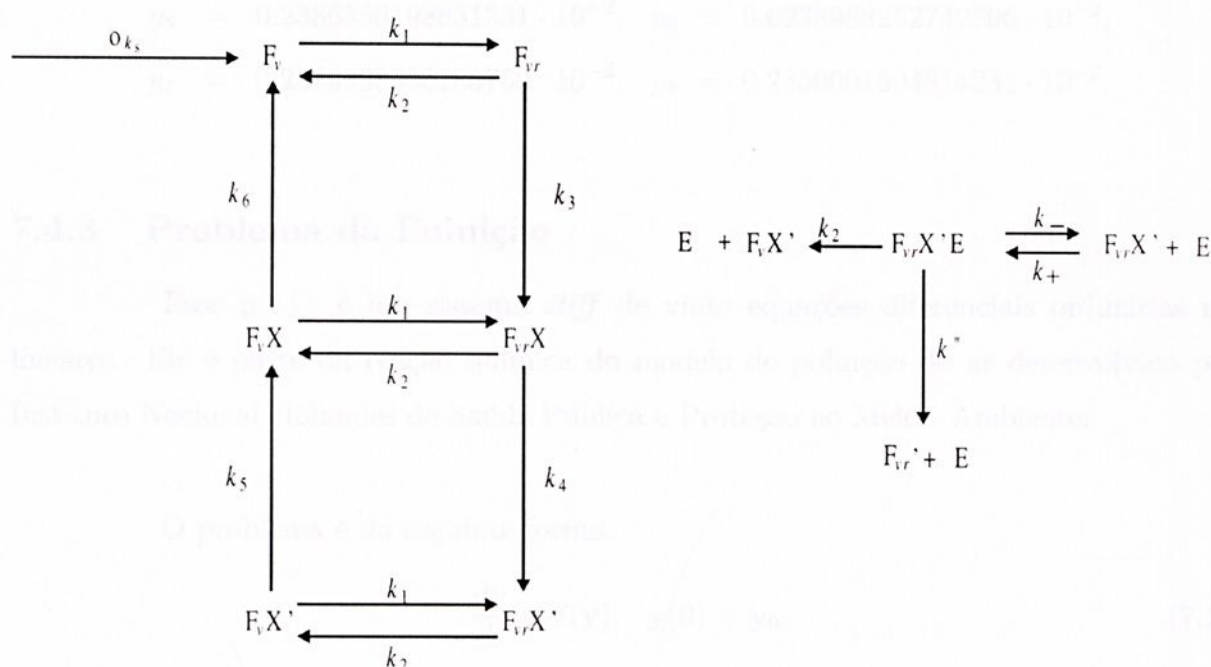


Figura 7.4.1: Esquema de reação para o problema HIRES.

F_v e F_{vr} referem-se à forma absorvente do fitocromo vermelho e vermelho-remoto, respectivamente. Elas podem ser ligadas por dois receptores X e X' , parcialmente influenciados pela enzima E . Os valores dos parâmetros são:

$$\begin{aligned} k_1 &= 1.71, \quad k_2 = 0.43, \quad k_3 = 8.32, \quad k_4 = 0.69, \quad k_5 = 0.035, \\ k_6 &= 8.32, \quad k_+ = 280, \quad k_- = 0.69, \quad k^* = 0.69, \quad o_{ks} = 0.0007. \end{aligned}$$

Identificando as concentrações de F_v , F_{vr} , F_vX , F_{vrX} , F_vX' , $F_{vrX'}$, $F_{vrX'E}$ e E com y_i , $i \in \{1, \dots, 8\}$, respectivamente, seguem as equações diferenciais mencionadas anteriormente.

O ponto final do intervalo de integração, 321.8122, foi escolhido arbitrariamente.

A solução referente ao ponto final do intervalo de integração dada abaixo, como no problema 7.4.1, é parte da descrição do problema, encontrado em CWI [22]:

$$\begin{aligned} y_1 &= 0.7371312573325668 \cdot 10^{-3}, \quad y_2 = 0.1442485726316185 \cdot 10^{-3}, \\ y_3 &= 0.5888729740967575 \cdot 10^{-4}, \quad y_4 = 0.1175651343283149 \cdot 10^{-2}, \end{aligned}$$

$y_5 = 0.2386356198831331 \cdot 10^{-2}, \quad y_6 = 0.6238968252742796 \cdot 10^{-2},$
 $y_7 = 0.2849998395185769 \cdot 10^{-2}, \quad y_8 = 0.2850001604814231 \cdot 10^{-2}.$

7.4.3 Problema da Poluição

Esse p.v.i. é um sistema *stiff* de vinte equações diferenciais ordinárias não lineares. Ele é parte da reação química do modelo de poluição do ar desenvolvido pelo Instituto Nacional Holandês de Saúde Pública e Proteção ao Meio - Ambiente.

O problema é da seguinte forma:

$\frac{dy}{dt} = f(y), \quad y(0) = y_0,$ (7.11)

com

$y \in \mathbb{R}^{20}, \quad 0 \leq t \leq 60.$

A função *f* é definida por

$$f(y) = \begin{pmatrix} -\sum_{j \in \{1,10,14,23,24\}} r_j + \sum_{j \in \{2,3,9,11,12,22,25\}} r_j \\ -r_2 - r_3 - r_9 - r_{12} + r_1 + r_{21} \\ -r_{15} + r_1 + r_{17} + r_{19} + r_{22} \\ -r_2 - r_{16} - r_{17} - r_{23} + r_{15} \\ -r_3 + 2r_4 + r_6 + r_7 + r_{13} + r_{20} \\ -r_6 - r_8 - r_{14} - r_{20} + r_3 + 2r_{18} \\ -r_4 - r_5 - r_6 + r_{13} \\ r_4 + r_5 + r_6 + r_7 \\ -r_7 - r_8 \\ -r_{12} + r_7 + r_9 \\ -r_9 - r_{10} + r_8 + r_{11} \\ r_9 \\ -r_{11} + r_{10} \\ -r_{13} + r_{12} \\ r_{14} \\ -r_{18} - r_{19} + r_{16} \\ -r_{20} \\ r_{20} \\ -r_{21} - r_{22} - r_{24} + r_{23} + r_{25} \\ -r_{25} + r_{24} \end{pmatrix},$$

onde os *r_i* são variáveis auxiliares, dadas por

$$\begin{aligned}
r_1 &= k_1 \cdot y_1, \quad r_2 = k_2 \cdot y_2 \cdot y_4, \quad r_3 = k_3 \cdot y_5 \cdot y_2, \quad r_4 = k_4 \cdot y_7, \quad r_5 = k_5 \cdot y_7, \quad r_6 = k_6 \cdot y_7 \cdot y_6, \\
r_7 &= k_7 \cdot y_9, \quad r_8 = k_8 \cdot y_9 \cdot y_6, \quad r_9 = k_9 \cdot y_{11} \cdot y_2, \quad r_{10} = k_{10} \cdot y_{11} \cdot y_1, \quad r_{11} = k_{11} \cdot y_{13}, \\
r_{12} &= k_{12} \cdot y_{10} \cdot y_2, \quad r_{13} = k_{13} \cdot y_{14}, \quad r_{14} = k_{14} \cdot y_1 \cdot y_6, \quad r_{15} = k_{15} \cdot y_3, \quad r_{16} = k_{16} \cdot y_4, \\
r_{17} &= k_{17} \cdot y_4, \quad r_{18} = k_{18} \cdot y_{16}, \quad r_{19} = k_{19} \cdot y_{16}, \quad r_{20} = k_{20} \cdot y_{17} \cdot y_6, \quad r_{21} = k_{21} \cdot y_{19}, \\
r_{22} &= k_{22} \cdot y_{19}, \quad r_{23} = k_{23} \cdot y_1 \cdot y_4, \quad r_{24} = k_{24} \cdot y_{19} \cdot y_1, \quad r_{25} = k_{25} \cdot y_{20}.
\end{aligned}$$

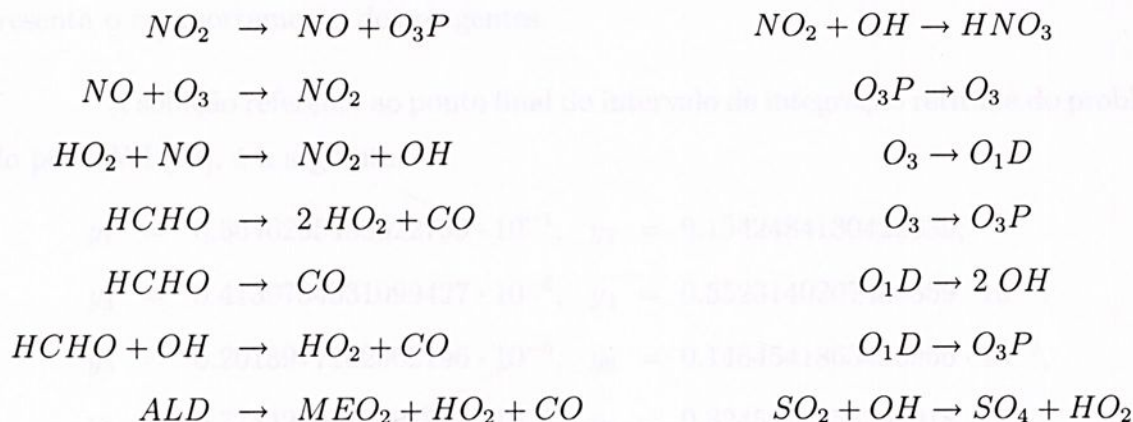
Os valores dos parâmetros k_j são:

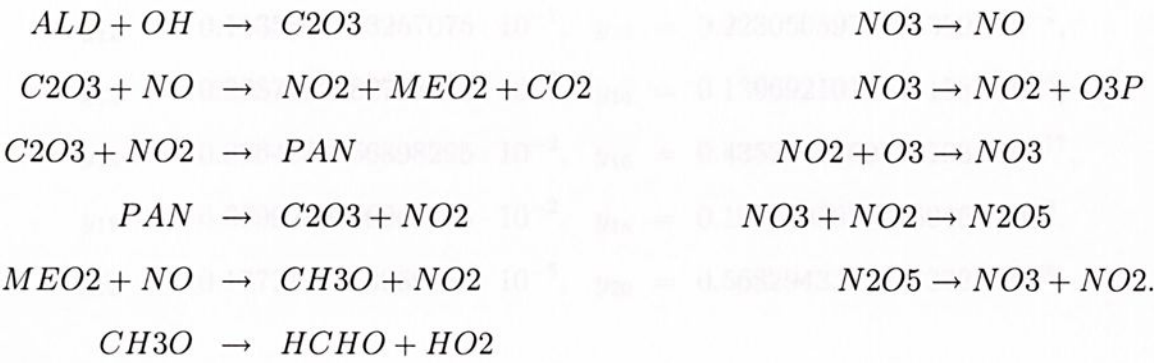
$$\begin{aligned}
k_1 &= 0.350, \quad k_2 = 0.266 \cdot 10^2, \quad k_3 = 0.123 \cdot 10^5, \quad k_4 = 0.860 \cdot 10^{-3}, \\
k_5 &= 0.820 \cdot 10^{-3}, \quad k_6 = 0.150 \cdot 10^5, \quad k_7 = 0.130 \cdot 10^{-3}, \\
k_8 &= 0.240 \cdot 10^5, \quad k_9 = 0.165 \cdot 10^5, \quad k_{10} = 0.900 \cdot 10^4, \\
k_{11} &= 0.220 \cdot 10^{-1}, \quad k_{12} = 0.120 \cdot 10^5, \quad k_{13} = 0.188 \cdot 10, \\
k_{14} &= 0.163 \cdot 10^5, \quad k_{15} = 0.480 \cdot 10^7, \quad k_{16} = 0.350 \cdot 10^{-3}, \\
k_{17} &= 0.175 \cdot 10^{-1}, \quad k_{18} = 0.100 \cdot 10^9, \quad k_{19} = 0.444 \cdot 10^{12}, \\
k_{20} &= 0.124 \cdot 10^4, \quad k_{21} = 0.210 \cdot 10, \quad k_{22} = 0.578 \cdot 10, \\
k_{23} &= 0.474 \cdot 10^{-1}, \quad k_{24} = 0.178 \cdot 10^4, \quad k_{25} = 0.312 \cdot 10.
\end{aligned}$$

Finalmente, o vetor inicial y_0 é dado por

$$y_0 = (0, 0.2, 0, 0.04, 0, 0, 0.1, 0.3, 0.01, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0.007, 0, 0, 0)^T.$$

O problema é um modelo químico consistindo de vinte e cinco reações e vinte compostos reagindo. O esquema de reação é o seguinte:





Escrevendo as velocidades da reação r_j para toda equação de reação e fazendo a identificação nos dados abaixo que registram as concentrações em $t = 0$,

y_1	$[NO_2]$	0	y_{11}	$[C_2O_3]$	0
y_2	$[NO]$	0.2	y_{12}	$[CO_2]$	0
y_3	$[O_3P]$	0	y_{13}	$[PAN]$	0
y_4	$[O_3]$	0.04	y_{14}	$[CH_3O]$	0
y_5	$[HO_2]$	0	y_{15}	$[HNO_3]$	0
y_6	$[OH]$	0	y_{16}	$[O_1D]$	0
y_7	$[HCHO]$	0.1	y_{17}	$[SO_2]$	0.007
y_8	$[CO]$	0.3	y_{18}	$[SO_4]$	0
y_9	$[ALD]$	0.01	y_{19}	$[NO_3]$	0
y_{10}	$[MEO_2]$	0	y_{20}	$[N_2O_5]$	0.

chega-se ao sistema de equações diferenciais (7.11). O intervalo de tempo $[0, 60]$ suficiente representa o comportamento dos reagentes.

A solução referente ao ponto final do intervalo de integração retirada do problema dado por CWI [22], é a seguinte:

$y_1 = 0.5646255480022769 \cdot 10^{-1}, \quad y_2 = 0.1342484130422339,$
 $y_3 = 0.4139734331099427 \cdot 10^{-8}, \quad y_4 = 0.5523140207484359 \cdot 10^{-2},$
 $y_5 = 0.2018977262302196 \cdot 10^{-6}, \quad y_6 = 0.1464541863493966 \cdot 10^{-6},$
 $y_7 = 0.7784249118997964 \cdot 10^{-1}, \quad y_8 = 0.3245075353396018,$
 $y_9 = 0.7494013383880406 \cdot 10^{-2}, \quad y_{10} = 0.1622293157301561 \cdot 10^{-7},$

$$\begin{aligned} y_{11} &= 0.1135863833257075 \cdot 10^{-7}, & y_{12} &= 0.2230505975721359 \cdot 10^{-2}, \\ y_{13} &= 0.2087162882798630 \cdot 10^{-3}, & y_{14} &= 0.1396921016840158 \cdot 10^{-4}, \\ y_{15} &= 0.8964884856898295 \cdot 10^{-2}, & y_{16} &= 0.4352846369330103 \cdot 10^{-17}, \\ y_{17} &= 0.6899219696263405 \cdot 10^{-2}, & y_{18} &= 0.1007803037365946 \cdot 10^{-3}, \\ y_{19} &= 0.1772146513969984 \cdot 10^{-5}, & y_{20} &= 0.5682943292316392 \cdot 10^{-4}. \end{aligned}$$

7.5 Resultados Numéricos

Na tabela abaixo, temos para os três problemas testes dados na seção 7.4: as tolerâncias escolhidas para o erro relativo *rtol* e absoluto *atol*, o tamanho do passo inicial usado, os valores *scd* como definido em (7.8), o número total de passos realizados e de passos aceitos, as avaliações da função, as avaliações do Jacobiano, as decomposições LU, obtidos pelo presente código:

Problema	<i>rtol</i>	<i>atol</i>	h_0	<i>scd</i>	passos	aceitos	#f	#Jac	#LU
HIRES	10 ⁻⁴	10 ⁻⁴	10 ⁻³	2.07	125	95	1014	47	251
	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷	10 ⁻³	3.60	634	591	6137	145	1269
	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹⁰	10 ⁻³	7.33	4262	4235	37669	875	8525
Poluição	10 ⁻⁴	10 ⁻⁴	10 ⁻⁶	1.21	531	283	5656	140	1063
	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷	10 ⁻⁶	4.26	572	365	6874	146	1145
	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹⁰	10 ⁻⁶	6.74	3595	2589	40852	742	7191
Chemakzo	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷	10 ⁻⁴	5.33	146	122	1877	50	293
	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹⁰	10 ⁻⁴	7.87	637	603	6671	146	1275

Já na tabela seguinte temos, para os mesmos problemas, resultados similares obtidos com o código VODE [1], que para sistemas *stiff* é baseado nos métodos de diferenciação regressiva (métodos BDF):

Problema	<i>rtol</i>	<i>atol</i>	<i>scd</i>	passos	aceitos	#f	#Jac	#LU
HIRES	10 ⁻⁴	10 ⁻⁴	1.33	131	129	191	10	24
	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷	3.35	389	362	612	9	73
	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹⁰	6.60	875	828	1204	15	123
Poluição	10 ⁻⁴	10 ⁻⁴	1.65	55	55	106	5	17
	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷	3.63	149	149	210	4	26
	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹⁰	4.72	375	357	528	7	60
Chemakzo	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷	5.91	183	170	263	4	41
	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹⁰	7.87	367	358	450	7	44



Comparando os resultados das duas tabelas, notamos que VODE fornece resultados superiores. Também percebemos, que as fórmulas (7.3)-(7.7) utilizadas na implementação do presente algoritmo, exigem um maior esforço computacional com respeito ao número de avaliações da função f e das decomposições LU. Porém, para baixas precisões, observamos que o código simples é mais ou menos competitivo com o excelente código VODE considerando o número de passos exigidos para gerar a solução com uma precisão prescrita.

	$p=2$	$p=3$	$p=4$	$p=5$	$p=6$	$p=7$
ordem de cálculo 1	A					
ordem de cálculo 2		L	L	L		
ordem de cálculo 3		A	A	L	L	L

Podemos perceber, durante o decorrer desta investigação, que a medida que queríamos construir métodos estendidos de passo um de ordem maior, estes eram mais difíceis de serem encontrados. Assim, a partir de determinado momento, a obtenção de métodos de ordem superior tornou-se cada vez mais difícil. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior.

Assim, é importante perceber que cada vez que se tenta obter um método de ordem superior, é necessário fazer uma análise cuidadosa da estabilidade e da precisão. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior.

No estudo que estamos realizando, estamos nos concentrando na estabilidade e na precisão. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior.

Quando se trata de métodos de ordem superior, é importante lembrar que a estabilidade é um fator crucial. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior. É isso que ocorre com os métodos de ordem superior.

Conclusão

No início deste trabalho, assumimos a tarefa de investigar a existência de métodos lineares de passo múltiplo **A-** e **L - estáveis** na forma geral dos métodos estendidos de passo um de ordem mais alta possível, por meio do correspondente método de Runge - Kutta. Sendo assim, tendo concluído tal tarefa, resumimos na tabela abaixo, a existência de métodos ótimos **A-** e **L - estáveis** e suas respectivas ordens de estágio:

	$p = 2$	$p = 3$	$p = 4$	$p = 5$	$p = 6$	$p = 7$
<i>ordem de estágio 1</i>	A					
<i>ordem de estágio 2</i>		L	L	L		
<i>ordem de estágio 3</i>		A	A	L	L	L

Pudemos perceber, durante o decorrer desta dissertação, que à medida que queríamos construir métodos estendidos de passo um de ordem mais alta, mais difícil tornava-se resolver os sistemas de equações para encontrarmos os coeficientes desses métodos. E isso era devido ao número de equações ser cada vez maior e também pelo fato dessas equações serem mais complexas, por serem não-lineares.

Assim, como tínhamos em cada caso um número maior de equações para trabalharmos, precisávamos utilizar uma ferramenta que nos ajudasse e foram então as condições de simplificação que desempenharam esse papel de grande importância.

No estudo que desenvolvemos durante as análises da estabilidade, destacamos a estabilidade no eixo imaginário e a teoria *order star*, a qual conseguimos implementar obtendo assim, as figuras referentes a algumas funções de estabilidade.

Quanto ao cálculo da ordem de estágio, achamos interessante o fato de ser possível para alguns casos, tomarmos valores específicos para os parâmetros, os quais permitiram aumentar a ordem de estágio e forneceram novos métodos.

É importante observarmos que durante o trabalho, utilizamos o software *Mathematica* [17], sempre que houve necessidade, sem o qual muitos dos resultados deste trabalho não poderiam ser obtidos.

Com o intuito de compreendermos melhor o algoritmo em [23], citado no capítulo 7, buscamos informações adicionais em [15]-[16] e inclusive com um dos autores. Porém, infelizmente não alcançamos uma contribuição importante. Assim, apenas integramos os problemas que foram possíveis e mostramos os resultados obtidos.

Constatamos que o código não é competitivo com o conhecido código VODE se precisão mais elevada é desejada. Isto se deve ao elevado esforço computacional dispendido, principalmente para a avaliação da função $f(x,y)$ e para o cálculo do Jacobiano. Além disso, constatamos que o código VODE é também mais estável, pois produz um número bem menor de passos rejeitados.

Deixamos, então, como sugestão para futuros trabalhos, desenvolver melhorias nesse algoritmo. Como, por exemplo, implementar os métodos usando a técnica *deferred correction*. Um estudo nesse sentido foi feito em [21].

Apêndice A

Equações Extensas

Neste apêndice, apresentamos as equações extensas citadas anteriormente, que não apareceram durante a construção dos métodos nos capítulos anteriores.

$$\begin{aligned}
 & \frac{7139 \beta_{21}}{32400} - \frac{121 \beta_{21}^2}{5400} - \frac{24857 \beta_{31}}{388800} - \frac{583 \beta_{21} \beta_{31}}{64800} + \frac{2809 \beta_{31}^2}{388800} + \frac{8911 \beta_{41}}{777600} + \frac{209 \beta_{21} \beta_{41}}{129600} - \frac{1007 \beta_{31} \beta_{41}}{388800} + \\
 & \frac{361 \beta_{41}^2}{1555200} + \frac{53 \gamma_{31}}{1080} - \frac{583 \beta_{21} \gamma_{31}}{10800} + \frac{2809 \beta_{31} \gamma_{31}}{129600} - \frac{1007 \beta_{41} \gamma_{31}}{259200} + \frac{53 \gamma_{32}}{180} - \frac{2597 \beta_{21} \gamma_{32}}{10800} + \frac{2809 \beta_{31} \gamma_{32}}{32400} - \\
 & \frac{1007 \beta_{41} \gamma_{32}}{64800} - \frac{19 \gamma_{41}}{2160} + \frac{209 \beta_{21} \gamma_{41}}{21600} - \frac{1007 \beta_{31} \gamma_{41}}{259200} + \frac{361 \beta_{41} \gamma_{41}}{518400} - \frac{19 \gamma_{42}}{360} + \frac{931 \beta_{21} \gamma_{42}}{21600} - \frac{1007 \beta_{31} \gamma_{42}}{64800} + \\
 & \frac{361 \beta_{41} \gamma_{42}}{129600} + \frac{209 \beta_{21} \gamma_{43}}{2400} - \frac{3781 \beta_{31} \gamma_{43}}{86400} + \frac{361 \beta_{41} \gamma_{43}}{57600} - \frac{19 \gamma_{31} \gamma_{43}}{720} - \frac{19 \gamma_{32} \gamma_{43}}{180} = \frac{161}{864}
 \end{aligned}$$

(A.1)

$$\begin{aligned}
 & \frac{3234581 \beta_{41}}{8294400} + \frac{29929 \beta_{41}^2}{8294400} - \frac{18697 \beta_{51}}{307200} - \frac{173 \beta_{41} \beta_{51}}{153600} + \frac{9 \beta_{51}^2}{102400} - \frac{209911 \gamma_{32}}{21600} - \frac{41693 \beta_{41} \gamma_{32}}{172800} + \\
 & \frac{241 \beta_{51} \gamma_{32}}{6400} + \frac{58081 \gamma_{32}^2}{14400} - \frac{173 \gamma_{42}}{1440} + \frac{241681 \gamma_{43}}{57600} + \frac{29929 \beta_{41} \gamma_{43}}{345600} - \frac{173 \beta_{51} \gamma_{43}}{12800} - \frac{46883 \gamma_{32} \gamma_{43}}{14400} + \\
 & \frac{3 \gamma_{52}}{160} - \frac{4191 \gamma_{53}}{6400} - \frac{173 \beta_{41} \gamma_{53}}{12800} + \frac{27 \beta_{51} \gamma_{53}}{12800} + \frac{813 \gamma_{32} \gamma_{53}}{1600} - \frac{3771 \gamma_{54}}{1600} - \frac{79 \beta_{41} \gamma_{54}}{1600} + \frac{27 \beta_{51} \gamma_{54}}{3200} + \\
 & \frac{723 \gamma_{32} \gamma_{54}}{400} + \frac{9 \gamma_{43} \gamma_{54}}{80} = - \frac{14556551}{1382400}
 \end{aligned}$$

(A.2)

$$\begin{aligned}
& \frac{28221293 \beta_{41}}{12700800} + \frac{45387169 \beta_{41}^2}{1625702400} - \frac{1101707 \beta_{51}}{1587600} - \frac{1771831 \beta_{41} \beta_{51}}{101606400} + \frac{69169 \beta_{51}^2}{25401600} + \frac{3615107 \beta_{61}}{38102400} + \\
& \frac{5814031 \beta_{41} \beta_{61}}{2438553600} - \frac{226969 \beta_{51} \beta_{61}}{304819200} + \frac{744769 \beta_{61}^2}{14631321600} - \frac{4847978 \gamma_{32}}{99225} - \frac{1973941 \beta_{41} \gamma_{32}}{1587600} + \frac{77059 \beta_{51} \gamma_{32}}{198450} - \\
& \frac{252859 \beta_{61} \gamma_{32}}{4762800} + \frac{1373584 \gamma_{32}^2}{99225} - \frac{6737 \gamma_{42}}{20160} + \frac{430204609 \gamma_{43}}{16934400} + \frac{45387169 \beta_{41} \gamma_{43}}{67737600} - \frac{1771831 \beta_{51} \gamma_{43}}{8467200} + \\
& \frac{5814031 \beta_{61} \gamma_{43}}{203212800} - \frac{33705211 \gamma_{32} \gamma_{43}}{2116800} + \frac{263 \gamma_{52}}{2520} - \frac{16794391 \gamma_{53}}{2116800} - \frac{1771831 \beta_{41} \gamma_{53}}{8467200} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{53}}{1058400} - \\
& \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{53}}{25401600} + \frac{1315789 \gamma_{32} \gamma_{53}}{264600} - \frac{16021171 \gamma_{54}}{529200} - \frac{1716601 \beta_{41} \gamma_{54}}{2116800} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{54}}{264600} - \\
& \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{54}}{6350400} + \frac{616472 \gamma_{32} \gamma_{54}}{33075} + \frac{263 \gamma_{43} \gamma_{54}}{420} - \frac{863 \gamma_{62}}{60480} + \frac{55108591 \gamma_{63}}{50803200} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{63}}{203212800} - \\
& \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{63}}{25401600} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{63}}{609638400} - \frac{4317589 \gamma_{32} \gamma_{63}}{6350400} + \frac{52571371 \gamma_{64}}{12700800} + \frac{5632801 \beta_{41} \gamma_{64}}{50803200} - \\
& \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{64}}{6350400} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{64}}{152409600} - \frac{252859 \gamma_{32} \gamma_{64}}{99225} - \frac{863 \gamma_{43} \gamma_{64}}{10080} + \frac{26693453 \gamma_{65}}{2540160} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{65}}{20321280} - \\
& \frac{472061 \beta_{51} \gamma_{65}}{5080320} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{65}}{60963840} - \frac{252859 \gamma_{32} \gamma_{65}}{39690} - \frac{863 \gamma_{53} \gamma_{65}}{10080} - \frac{863 \gamma_{54} \gamma_{65}}{2520} = - \frac{99804763}{2257920}
\end{aligned}$$

(A.3)

$$\begin{aligned}
& \frac{1626251167 \beta_{41}}{203212800} + \frac{45387169 \beta_{41}^2}{406425600} - \frac{144106379 \beta_{51}}{50803200} - \frac{1771831 \beta_{41} \beta_{51}}{22579200} + \frac{69169 \beta_{51}^2}{5080320} + \frac{132272873 \beta_{61}}{304819200} + \\
& \frac{5814031 \beta_{41} \beta_{61}}{487710720} - \frac{2496659 \beta_{51} \beta_{61}}{609638400} + \frac{744769 \beta_{61}^2}{2438553600} - \frac{120889163 \gamma_{32}}{793800} - \frac{1973941 \beta_{41} \gamma_{32}}{453600} + \frac{154118 \beta_{51} \gamma_{32}}{99225} - \\
& \frac{252859 \beta_{61} \gamma_{32}}{1058400} + \frac{1373584 \gamma_{32}^2}{33075} - \frac{6737 \gamma_{42}}{5040} + \frac{680497633 \gamma_{43}}{8467200} + \frac{45387169 \beta_{41} \gamma_{43}}{16934400} - \frac{1771831 \beta_{51} \gamma_{43}}{1693440} + \\
& \frac{5814031 \beta_{61} \gamma_{43}}{33868800} - \frac{8603149 \gamma_{32} \gamma_{43}}{176400} + \frac{263 \gamma_{52}}{504} - \frac{25902607 \gamma_{53}}{1058400} - \frac{1771831 \beta_{41} \gamma_{53}}{2116800} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{53}}{211680} - \\
& \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{53}}{4233600} + \frac{1371019 \gamma_{32} \gamma_{53}}{88200} - \frac{23969557 \gamma_{54}}{264600} - \frac{3405587 \beta_{41} \gamma_{54}}{1058400} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{54}}{52920} - \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{54}}{1058400} + \\
& \frac{616472 \gamma_{32} \gamma_{54}}{11025} + \frac{263 \gamma_{43} \gamma_{54}}{84} - \frac{863 \gamma_{62}}{10080} + \frac{82821247 \gamma_{63}}{25401600} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{63}}{50803200} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{63}}{5080320} + \\
& \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{63}}{101606400} - \frac{2294717 \gamma_{32} \gamma_{63}}{1058400} + \frac{75209587 \gamma_{64}}{6350400} + \frac{2771093 \beta_{41} \gamma_{64}}{6350400} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{64}}{1270080} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{64}}{25401600} - \\
& \frac{252859 \gamma_{32} \gamma_{64}}{33075} - \frac{863 \gamma_{43} \gamma_{64}}{1680} + \frac{606689 \gamma_{65}}{19845} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{65}}{5080320} - \frac{594607 \beta_{51} \gamma_{65}}{1270080} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{65}}{10160640} - \\
& \frac{252859 \gamma_{32} \gamma_{65}}{13230} - \frac{863 \gamma_{53} \gamma_{65}}{1680} - \frac{863 \gamma_{54} \gamma_{65}}{420} = - \frac{804366247}{5644800}
\end{aligned}$$

(A.4)



$$\begin{aligned}
& \frac{794366407 \beta_{41}}{101606400} + \frac{45387169 \beta_{41}^2}{406425600} - \frac{4021007 \beta_{51}}{1451520} - \frac{1771831 \beta_{41} \beta_{51}}{22579200} + \frac{69169 \beta_{51}^2}{5080320} + \frac{258289859 \beta_{61}}{609638400} + \\
& \frac{5814031 \beta_{41} \beta_{61}}{487710720} - \frac{2496659 \beta_{51} \beta_{61}}{609638400} + \frac{744769 \beta_{61}^2}{2438553600} - \frac{117625729 \gamma_{32}}{793800} - \frac{1973941 \beta_{41} \gamma_{32}}{453600} + \frac{154118 \beta_{51} \gamma_{32}}{99225} - \\
& \frac{252859 \beta_{61} \gamma_{32}}{1058400} + \frac{1373584 \gamma_{32}^2}{33075} - \frac{6737 \gamma_{42}}{5040} + \frac{64547197 \gamma_{43}}{705600} + \frac{45387169 \beta_{41} \gamma_{43}}{16934400} - \frac{1771831 \beta_{51} \gamma_{43}}{2116800} + \\
& \frac{5814031 \beta_{61} \gamma_{43}}{50803200} - \frac{132698689 \gamma_{32} \gamma_{43}}{2116800} + \frac{263 \gamma_{52}}{630} - \frac{5144543 \gamma_{53}}{141120} - \frac{1771831 \beta_{41} \gamma_{53}}{1693440} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{53}}{211680} - \\
& \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{53}}{5080320} + \frac{1282651 \gamma_{32} \gamma_{53}}{52920} - \frac{1631389 \gamma_{54}}{11760} - \frac{1727647 \beta_{41} \gamma_{54}}{423360} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{54}}{52920} - \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{54}}{1270080} + \\
& \frac{616472 \gamma_{32} \gamma_{54}}{6615} + \frac{263 \gamma_{43} \gamma_{54}}{105} - \frac{863 \gamma_{62}}{15120} + \frac{1901189 \gamma_{63}}{313600} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{63}}{33868800} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{63}}{4233600} + \\
& \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{63}}{101606400} - \frac{8363333 \gamma_{32} \gamma_{63}}{2116800} + \frac{49278163 \gamma_{64}}{2116800} + \frac{632579 \beta_{41} \gamma_{64}}{940800} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{64}}{1058400} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{64}}{25401600} - \\
& \frac{505718 \gamma_{32} \gamma_{64}}{33075} - \frac{863 \gamma_{43} \gamma_{64}}{2520} + \frac{32620537 \gamma_{65}}{564480} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{65}}{3386880} - \frac{938081 \beta_{51} \gamma_{65}}{1693440} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{65}}{10160640} - \\
& \frac{252859 \gamma_{32} \gamma_{65}}{6615} - \frac{863 \gamma_{53} \gamma_{65}}{2016} - \frac{863 \gamma_{54} \gamma_{65}}{504} = - \frac{28789007}{211680}
\end{aligned}$$

(A.5)

$$\begin{aligned}
& \frac{226477729 \beta_{41}}{127008000} + \frac{45387169 \beta_{41}^2}{2032128000} - \frac{8841271 \beta_{51}}{15876000} - \frac{1771831 \beta_{41} \beta_{51}}{127008000} + \frac{69169 \beta_{51}^2}{31752000} + \frac{29011471 \beta_{61}}{381024000} + \\
& \frac{5814031 \beta_{41} \beta_{61}}{3048192000} - \frac{226969 \beta_{51} \beta_{61}}{381024000} + \frac{744769 \beta_{61}^2}{18289152000} - \frac{158556071 \gamma_{32}}{1488375} - \frac{3947882 \beta_{41} \gamma_{32}}{1488375} + \frac{1232944 \beta_{51} \gamma_{32}}{1488375} - \\
& \frac{505718 \beta_{61} \gamma_{32}}{4465125} + \frac{71426368 \gamma_{32}^2}{1488375} + \frac{457368193 \gamma_{42}}{12700800} + \frac{45387169 \beta_{41} \gamma_{42}}{50803200} - \frac{1771831 \beta_{51} \gamma_{42}}{6350400} + \frac{5814031 \beta_{61} \gamma_{42}}{152409600} - \\
& \frac{1973941 \gamma_{32} \gamma_{42}}{99225} + \frac{2297027309 \gamma_{43}}{8467200} + \frac{45387169 \beta_{41} \gamma_{43}}{6773760} - \frac{1771831 \beta_{51} \gamma_{43}}{846720} + \frac{5814031 \beta_{61} \gamma_{43}}{20321280} - \\
& \frac{80796841 \gamma_{32} \gamma_{43}}{529200} - \frac{17854807 \gamma_{52}}{1587600} - \frac{1771831 \beta_{41} \gamma_{52}}{6350400} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{52}}{793800} - \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{52}}{19051200} + \frac{616472 \gamma_{32} \gamma_{52}}{99225} - \\
& \frac{89671691 \gamma_{53}}{1058400} - \frac{1771831 \beta_{41} \gamma_{53}}{846720} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{53}}{105840} - \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{53}}{2540160} + \frac{3154159 \gamma_{32} \gamma_{53}}{66150} - \frac{53623333 \gamma_{54}}{176400} - \\
& \frac{1060153 \beta_{41} \gamma_{54}}{141120} + \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{54}}{29400} - \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{54}}{705600} + \frac{616472 \gamma_{32} \gamma_{54}}{3675} + \frac{263 \gamma_{42} \gamma_{54}}{315} + \frac{263 \gamma_{43} \gamma_{54}}{42} + \\
& \frac{58588207 \gamma_{62}}{38102400} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{62}}{152409600} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{62}}{19051200} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{62}}{457228800} - \frac{252859 \gamma_{32} \gamma_{62}}{297675} + \frac{294245891 \gamma_{63}}{25401600} + \\
& \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{63}}{20321280} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{63}}{2540160} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{63}}{60963840} - \frac{10349959 \gamma_{32} \gamma_{63}}{1587600} + \frac{175957933 \gamma_{64}}{4233600} + \\
& \frac{3478753 \beta_{41} \gamma_{64}}{3386880} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{64}}{705600} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{64}}{16934400} - \frac{252859 \gamma_{32} \gamma_{64}}{11025} - \frac{863 \gamma_{42} \gamma_{64}}{7560} - \frac{863 \gamma_{43} \gamma_{64}}{1008} + \\
& \frac{29391191 \gamma_{65}}{272160} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{65}}{2177280} - \frac{325351 \beta_{51} \gamma_{65}}{388800} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{65}}{6531840} - \frac{505718 \gamma_{32} \gamma_{65}}{8505} - \frac{863 \gamma_{52} \gamma_{65}}{7560} - \\
& \frac{863 \gamma_{53} \gamma_{65}}{1008} - \frac{863 \gamma_{54} \gamma_{65}}{280} = - \frac{55796067}{1568000}
\end{aligned}$$

(A.6)



$$\begin{aligned}
& - \frac{13211801841401 \beta_{41}}{292626432000} - \frac{1842219802541 \beta_{41}^2}{1638708019200} - \frac{305773357553 \beta_{41}^3}{32774160384000} + \frac{515764269599 \beta_{51}}{36578304000} + \frac{71916848459 \beta_{41} \beta_{51}}{102419251200} + \\
& \frac{11936825447 \beta_{41}^2 \beta_{51}}{1365590016000} - \frac{2807500541 \beta_{51}^2}{25604812800} - \frac{465991553 \beta_{41} \beta_{51}^2}{170698752000} + \frac{18191447 \beta_{51}^3}{64012032000} - \frac{1692412793399 \beta_{61}}{877879296000} - \\
& \frac{235985704259 \beta_{41} \beta_{61}}{2458062028800} - \frac{39169126847 \beta_{41}^2 \beta_{61}}{32774160384000} + \frac{9212444741 \beta_{51} \beta_{61}}{307257753600} + \frac{1529090153 \beta_{41} \beta_{51} \beta_{61}}{2048385024000} - \\
& \frac{59692847 \beta_{51}^2 \beta_{61}}{512096256000} - \frac{30229428941 \beta_{61}^2}{14748372172800} - \frac{5017508753 \beta_{41} \beta_{61}^2}{98322481152000} + \frac{195874247 \beta_{51} \beta_{61}^2}{12290310144000} - \frac{642735647 \beta_{61}^3}{884902330368000} + \\
& \frac{574545924749 \gamma_{32}}{571536000} + \frac{80120291249 \beta_{41} \gamma_{32}}{1600300800} + \frac{13298440517 \beta_{41}^2 \gamma_{32}}{21337344000} - \frac{3127747751 \beta_{51} \gamma_{32}}{200037600} - \\
& \frac{519146483 \beta_{41} \beta_{51} \gamma_{32}}{1333584000} + \frac{20266517 \beta_{51}^2 \gamma_{32}}{333396000} + \frac{10263293951 \beta_{61} \gamma_{32}}{4800902400} + \frac{1703511083 \beta_{41} \beta_{61} \gamma_{32}}{32006016000} - \\
& \frac{66501917 \beta_{51} \beta_{61} \gamma_{32}}{4000752000} + \frac{218217317 \beta_{61}^2 \gamma_{32}}{192036096000} - \frac{3484525061 \gamma_{32}^2}{6251175} - \frac{578364713 \beta_{41} \gamma_{32}^2}{41674500} + \frac{45156574 \beta_{51} \gamma_{32}^2}{10418625} - \\
& \frac{74087687 \beta_{61} \gamma_{32}^2}{125023500} + \frac{3219680896 \gamma_{32}^3}{31255875} + \frac{2432057 \gamma_{42}}{50803200} - \frac{32226896396603 \gamma_{43}}{85349376000} - \frac{785334185207 \beta_{41} \gamma_{43}}{42674688000} - \\
& \frac{305773357553 \beta_{41}^2 \gamma_{43}}{1365590016000} + \frac{30657991793 \beta_{51} \gamma_{43}}{5334336000} + \frac{11936825447 \beta_{41} \beta_{51} \gamma_{43}}{85349376000} - \frac{465991553 \beta_{51}^2 \gamma_{43}}{21337344000} - \\
& \frac{100600178393 \beta_{61} \gamma_{43}}{128024064000} - \frac{39169126847 \beta_{41} \beta_{61} \gamma_{43}}{2048385024000} + \frac{1529090153 \beta_{51} \beta_{61} \gamma_{43}}{256048128000} - \frac{5017508753 \beta_{61}^2 \gamma_{43}}{12290310144000} + \\
& \frac{294113618179 \gamma_{32} \gamma_{43}}{666792000} + \frac{227072006507 \beta_{41} \gamma_{32} \gamma_{43}}{21337344000} - \frac{8864470493 \beta_{51} \gamma_{32} \gamma_{43}}{2667168000} + \frac{29087597093 \beta_{61} \gamma_{32} \gamma_{43}}{64012032000} - \\
& \frac{5248709119 \gamma_{32}^2 \gamma_{43}}{41674500} - \frac{45387169 \gamma_{42} \gamma_{43}}{16934400} - \frac{45387169 \gamma_{43}^2}{2508800} + \frac{45387169 \gamma_{32} \gamma_{43}^2}{5644800} - \frac{94943 \gamma_{52}}{6350400} + \frac{1771831 \gamma_{43} \gamma_{52}}{2116800} + \\
& \frac{1258078336397 \gamma_{53}}{10668672000} + \frac{30657991793 \beta_{41} \gamma_{53}}{5334336000} + \frac{11936825447 \beta_{41}^2 \gamma_{53}}{170698752000} - \frac{1196831207 \beta_{51} \gamma_{53}}{666792000} - \\
& \frac{465991553 \beta_{41} \beta_{51} \gamma_{53}}{10668672000} + \frac{18191447 \beta_{51}^2 \gamma_{53}}{2667168000} + \frac{3927244607 \beta_{61} \gamma_{53}}{16003008000} + \frac{1529090153 \beta_{41} \beta_{61} \gamma_{53}}{256048128000} - \\
& \frac{59692847 \beta_{51} \beta_{61} \gamma_{53}}{32006016000} + \frac{195874247 \beta_{61}^2 \gamma_{53}}{1536288768000} - \frac{11481650821 \gamma_{32} \gamma_{53}}{83349000} - \frac{8864470493 \beta_{41} \gamma_{32} \gamma_{53}}{2667168000} + \\
& \frac{346052507 \beta_{51} \gamma_{32} \gamma_{53}}{333396000} - \frac{1135525907 \beta_{61} \gamma_{32} \gamma_{53}}{8001504000} + \frac{409799762 \gamma_{32}^2 \gamma_{53}}{10418625} + \frac{1771831 \gamma_{42} \gamma_{53}}{2116800} + \frac{1771831 \gamma_{43} \gamma_{53}}{156800} - \\
& \frac{1771831 \gamma_{32} \gamma_{43} \gamma_{53}}{352800} - \frac{69169 \gamma_{52} \gamma_{53}}{264600} - \frac{69169 \gamma_{53}^2}{39200} + \frac{69169 \gamma_{32} \gamma_{53}^2}{88200} + \frac{1106594210387 \gamma_{54}}{2667168000} + \\
& \frac{111302499197 \beta_{41} \gamma_{54}}{5334336000} + \frac{11192656427 \beta_{41}^2 \gamma_{54}}{42674688000} - \frac{4489552283 \beta_{51} \gamma_{54}}{666792000} - \frac{451466063 \beta_{41} \beta_{51} \gamma_{54}}{2667168000} + \\
& \frac{18191447 \beta_{51}^2 \gamma_{54}}{666792000} + \frac{14731876883 \beta_{61} \gamma_{54}}{16003008000} + \frac{1481426663 \beta_{41} \beta_{61} \gamma_{54}}{64012032000} - \frac{59692847 \beta_{51} \beta_{61} \gamma_{54}}{8001504000} + \\
& \frac{195874247 \beta_{61}^2 \gamma_{54}}{384072192000} - \frac{5066398073 \gamma_{32} \gamma_{54}}{10418625} - \frac{502964093 \beta_{41} \gamma_{32} \gamma_{54}}{41674500} + \frac{40533034 \beta_{51} \gamma_{32} \gamma_{54}}{10418625} - \\
& \frac{66501917 \beta_{61} \gamma_{32} \gamma_{54}}{125023500} + \frac{1445010368 \gamma_{32}^2 \gamma_{54}}{10418625} + \frac{1827061 \gamma_{42} \gamma_{54}}{529200} + \frac{15522523 \gamma_{43} \gamma_{54}}{1058400} - \frac{1771831 \beta_{41} \gamma_{43} \gamma_{54}}{4233600} + \\
& \frac{69169 \beta_{51} \gamma_{43} \gamma_{54}}{1058400} - \frac{226969 \beta_{61} \gamma_{43} \gamma_{54}}{25401600} - \frac{536783 \gamma_{32} \gamma_{43} \gamma_{54}}{105840} - \frac{69169 \gamma_{52} \gamma_{54}}{66150} - \frac{69169 \gamma_{53} \gamma_{54}}{9800} +
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& \frac{69169 \beta_{41} \gamma_{53} \gamma_{54}}{1058400} + \frac{69169 \gamma_{32} \gamma_{53} \gamma_{54}}{22050} + \frac{69169 \beta_{41} \gamma_{54}^2}{264600} + \frac{311543 \gamma_{62}}{152409600} - \frac{5814031 \gamma_{43} \gamma_{62}}{50803200} + \frac{226969 \gamma_{53} \gamma_{62}}{6350400} + \\
& \frac{226969 \gamma_{54} \gamma_{62}}{1587600} - \frac{4128219027797 \gamma_{63}}{256048128000} - \frac{100600178393 \beta_{41} \gamma_{63}}{128024064000} - \frac{39169126847 \beta_{41}^2 \gamma_{63}}{4096770048000} + \frac{3927244607 \beta_{51} \gamma_{63}}{16003008000} + \\
& \frac{1529090153 \beta_{41} \beta_{51} \gamma_{63}}{256048128000} - \frac{59692847 \beta_{51}^2 \gamma_{63}}{64012032000} - \frac{12886738007 \beta_{61} \gamma_{63}}{384072192000} - \frac{5017508753 \beta_{41} \beta_{61} \gamma_{63}}{6145155072000} + \\
& \frac{195874247 \beta_{51} \beta_{61} \gamma_{63}}{768144384000} - \frac{642735647 \beta_{61}^2 \gamma_{63}}{36870930432000} + \frac{37675531021 \gamma_{32} \gamma_{63}}{2000376000} + \frac{29087597093 \beta_{41} \gamma_{32} \gamma_{63}}{64012032000} - \\
& \frac{1135525907 \beta_{51} \gamma_{32} \gamma_{63}}{8001504000} + \frac{3726079307 \beta_{61} \gamma_{32} \gamma_{63}}{192036096000} - \frac{672352081 \gamma_{32}^2 \gamma_{63}}{125023500} - \frac{5814031 \gamma_{42} \gamma_{63}}{50803200} - \\
& \frac{5814031 \gamma_{43} \gamma_{63}}{3763200} + \frac{5814031 \gamma_{32} \gamma_{43} \gamma_{63}}{8467200} + \frac{226969 \gamma_{52} \gamma_{63}}{6350400} + \frac{226969 \gamma_{53} \gamma_{63}}{470400} - \frac{226969 \gamma_{32} \gamma_{53} \gamma_{63}}{1058400} + \\
& \frac{226969 \gamma_{54} \gamma_{63}}{235200} - \frac{226969 \beta_{41} \gamma_{54} \gamma_{63}}{25401600} - \frac{226969 \gamma_{32} \gamma_{54} \gamma_{63}}{529200} - \frac{744769 \gamma_{62} \gamma_{63}}{152409600} - \frac{744769 \gamma_{63}^2}{22579200} + \frac{744769 \gamma_{32} \gamma_{63}^2}{50803200} - \\
& \frac{3631143739787 \gamma_{64}}{64012032000} - \frac{365224550597 \beta_{41} \gamma_{64}}{128024064000} - \frac{36727233827 \beta_{41}^2 \gamma_{64}}{1024192512000} + \frac{14731876883 \beta_{51} \gamma_{64}}{16003008000} + \\
& \frac{1481426663 \beta_{41} \beta_{51} \gamma_{64}}{64012032000} - \frac{59692847 \beta_{51}^2 \gamma_{64}}{16003008000} - \frac{48340721483 \beta_{61} \gamma_{64}}{384072192000} - \frac{4861107263 \beta_{41} \beta_{61} \gamma_{64}}{1536288768000} + \\
& \frac{195874247 \beta_{51} \beta_{61} \gamma_{64}}{64012032000} - \frac{642735647 \beta_{61}^2 \gamma_{64}}{16003008000} + \frac{16624720673 \gamma_{32} \gamma_{64}}{250047000} + \frac{1650410693 \beta_{41} \gamma_{32} \gamma_{64}}{1000188000} - \\
& \frac{192036096000}{66501917 \beta_{51} \gamma_{32} \gamma_{64}} + \frac{218217317 \beta_{61} \gamma_{32} \gamma_{64}}{125023500} - \frac{592701496 \gamma_{32}^2 \gamma_{64}}{3000564000} - \frac{5995261 \gamma_{42} \gamma_{64}}{31255875} - \frac{50935123 \gamma_{43} \gamma_{64}}{12700800} + \frac{25401600}{5814031 \beta_{41} \gamma_{43} \gamma_{64}} - \\
& \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{43} \gamma_{64}}{101606400} + \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{43} \gamma_{64}}{25401600} + \frac{1761383 \gamma_{32} \gamma_{43} \gamma_{64}}{609638400} + \frac{226969 \gamma_{52} \gamma_{64}}{2540160} + \frac{226969 \gamma_{53} \gamma_{64}}{1587600} - \\
& \frac{226969 \gamma_{53} \gamma_{64}}{235200} - \frac{226969 \beta_{41} \gamma_{53} \gamma_{64}}{25401600} - \frac{226969 \gamma_{32} \gamma_{53} \gamma_{64}}{529200} - \frac{226969 \beta_{41} \gamma_{54} \gamma_{64}}{3175200} - \frac{744769 \gamma_{62} \gamma_{64}}{38102400} - \\
& \frac{744769 \gamma_{63} \gamma_{64}}{5644800} + \frac{744769 \beta_{41} \gamma_{63} \gamma_{64}}{609638400} + \frac{744769 \gamma_{32} \gamma_{63} \gamma_{64}}{12700800} + \frac{744769 \beta_{41} \gamma_{64}^2}{152409600} - \frac{1843072117861 \gamma_{65}}{12802406400} - \\
& \frac{760236879529 \beta_{41} \gamma_{65}}{102419251200} - \frac{39169126847 \beta_{41}^2 \gamma_{65}}{409677004800} + \frac{30892915423 \beta_{51} \gamma_{65}}{12802406400} + \frac{3180274957 \beta_{41} \beta_{51} \gamma_{65}}{51209625600} - \\
& \frac{16114799 \beta_{51}^2 \gamma_{65}}{1600300800} - \frac{97385249671 \beta_{61} \gamma_{65}}{307257753600} - \frac{5017508753 \beta_{41} \beta_{61} \gamma_{65}}{614515507200} + \frac{407388643 \beta_{51} \beta_{61} \gamma_{65}}{153628876800} - \\
& \frac{642735647 \beta_{61}^2 \gamma_{65}}{3687093043200} + \frac{33488393101 \gamma_{32} \gamma_{65}}{200037600} + \frac{1703511083 \beta_{41} \gamma_{32} \gamma_{65}}{400075200} - \frac{138313873 \beta_{51} \gamma_{32} \gamma_{65}}{100018800} + \\
& \frac{218217317 \beta_{61} \gamma_{32} \gamma_{65}}{1200225600} - \frac{296350748 \gamma_{32}^2 \gamma_{65}}{6251175} - \frac{5814031 \gamma_{42} \gamma_{65}}{5080320} - \frac{5814031 \gamma_{43} \gamma_{65}}{752640} + \frac{5814031 \beta_{51} \gamma_{43} \gamma_{65}}{203212800} + \\
& \frac{5814031 \gamma_{32} \gamma_{43} \gamma_{65}}{1693440} + \frac{87163 \gamma_{52} \gamma_{65}}{254016} + \frac{25381693 \gamma_{53} \gamma_{65}}{7257600} + \frac{5814031 \beta_{41} \gamma_{53} \gamma_{65}}{203212800} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{53} \gamma_{65}}{12700800} + \\
& \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{53} \gamma_{65}}{609638400} - \frac{11126659 \gamma_{32} \gamma_{53} \gamma_{65}}{6350400} + \frac{52571371 \gamma_{54} \gamma_{65}}{12700800} + \frac{156203 \beta_{41} \gamma_{54} \gamma_{65}}{7257600} - \frac{226969 \beta_{51} \gamma_{54} \gamma_{65}}{3175200} + \\
& \frac{744769 \beta_{61} \gamma_{54} \gamma_{65}}{152409600} - \frac{252859 \gamma_{32} \gamma_{54} \gamma_{65}}{99225} - \frac{863 \gamma_{43} \gamma_{54} \gamma_{65}}{10080} - \frac{744769 \gamma_{62} \gamma_{65}}{15240960} - \frac{744769 \gamma_{63} \gamma_{65}}{2257920} + \\
& \frac{744769 \beta_{51} \gamma_{63} \gamma_{65}}{609638400} + \frac{744769 \gamma_{32} \gamma_{63} \gamma_{65}}{5080320} + \frac{744769 \beta_{41} \gamma_{64} \gamma_{65}}{60963840} + \frac{744769 \beta_{51} \gamma_{64} \gamma_{65}}{152409600} + \frac{744769 \beta_{51} \gamma_{65}^2}{60963840} = \\
& 6877503990587 \\
& 11379916800
\end{aligned}$$

(A.7)

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{56555783}{92667435} - \frac{13880048024 \gamma_{32}}{4170034575} + \frac{226969 \gamma_{62}}{6366465} + \frac{5220287 \gamma_{63}}{21221550} \right) \gamma_{54} + \\
 & \left(-\frac{185580383}{2224018440} + \frac{5693194603 \gamma_{32}}{12510103725} + \frac{9305729 \gamma_{54}}{10610775} - \frac{744769 \gamma_{62}}{152795160} - \frac{17129687 \gamma_{63}}{509317200} - \frac{30535529 \gamma_{64}}{254658600} \right) \gamma_{64} + \\
 & \left(-\frac{928110761}{1736431200} + \frac{11385143897 \gamma_{32}}{3906970200} + \frac{14526016 \gamma_{54}}{6366465} - \frac{744769 \gamma_{62}}{23859360} - \frac{17129687 \gamma_{63}}{79531200} - \frac{867872612779 \gamma_{64}}{803702541600} - \right. \\
 & \left. \frac{1489538 \gamma_{65}}{745605} \right) \gamma_{65} = \frac{121}{137550} + \frac{481 \gamma_{32}}{206325}
 \end{aligned}$$

(A.8)

$$\begin{aligned}
 & \left(-\frac{1199950842253}{27192332126400} - \frac{143293024937 \gamma_{32}}{728366039100} - \frac{263 \gamma_{43}}{1200} + \frac{263}{840} \gamma_{32} \gamma_{43} + \frac{23222730891 \gamma_{54}}{8092955990} - \frac{7147647784 \gamma_{32} \gamma_{54}}{1734204855} + \right. \\
 & \left. \frac{226969 \gamma_{62}}{50931720} + \frac{5220287 \gamma_{63}}{169772400} \right) \gamma_{54} + \\
 & \left(\frac{3937481280853}{652615971033600} + \frac{470197264337 \gamma_{32}}{17480784938400} + \frac{863 \gamma_{43}}{28800} - \frac{863 \gamma_{32} \gamma_{43}}{20160} - \frac{245834890249 \gamma_{54}}{364183019550} + \right. \\
 & \left. \frac{5863517146 \gamma_{32} \gamma_{54}}{5202614565} - \frac{744769 \gamma_{62}}{1222361280} - \frac{17129687 \gamma_{63}}{4074537600} + \frac{2702679563027 \gamma_{64}}{69923139753600} - \frac{9620181173 \gamma_{32} \gamma_{64}}{124862749560} \right) \gamma_{64} + \\
 & \left(\frac{2232527108239}{57323066774400} + \frac{19700490110803 \gamma_{32}}{114646133548800} + \frac{5814031 \gamma_{32} \gamma_{43}}{42416640} - \frac{44236115334773 \gamma_{54}}{9789239565504} + \right. \\
 & \left. \frac{401957928121 \gamma_{32} \gamma_{54}}{58269283128} - \frac{744769 \gamma_{62}}{190874880} - \frac{9681997 \gamma_{63}}{424166400} - \frac{744769 \gamma_{32} \gamma_{63}}{127249920} + \frac{420704002319320523 \gamma_{64}}{772371001718265600} - \right. \\
 & \left. \frac{199373966430523 \gamma_{32} \gamma_{64}}{204330952835520} + \frac{83917063802779 \gamma_{65}}{45858453419520} - \frac{4562334986191 \gamma_{32} \gamma_{65}}{1528615113984} \right) \gamma_{65} = \\
 & \frac{4135499}{20757945600} - \frac{55463 \gamma_{32}}{18163202400}
 \end{aligned}$$

(A.9)

Referências Bibliográficas

- [1] BROWN, P.N., HINDMARSH, A.C. & BYRNE, G.D., *VODE: A variable coefficient ODE solver*, disponível via WWW em URL <http://www.netlib.org/ode/vode.f>.
- [2] BUTCHER, J.C., *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*, J. Wiley, Chichester, 1987.
- [3] CASH, J.R. & SINGHAL, A., Mono-implicit Runge-Kutta formulae for the numerical integration of stiff differential equations, *IMA J. Num. Anal.*, v.2, p.211-227, 1982.
- [4] CHAWLA, M.M., AL-ZANAIDI, M.A. & AL-SAHAR, 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-SAHAR, M.S., A class of stabilized extended one-step methods for the numerical solution of ODEs, *Computers Math. Applic.*, v.29, p.79-84, 1995.
- [6] DAHLQUIST, G., A special stability problem for linear multistep methods, *BIT*, v.3, p.27-43, 1963.
- [7] DORMAND, J.R. & PRINCE, P.J., A family of embedded Runge-Kutta formulae, *J. Comp. and Appl. Math.*, v.6, p.19-26, 1980.
- [8] HAIRER, E. & WANNER, G., *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [9] ISERLES, A. & NORSETT, S.P., *Order stars*, Chapman & Hall, London, 1991.
- [10] 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.
- [11] LAMBERT, J.D., *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*, John Wiley, London, 1973.
- [12] LAMBERT, J.D., *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems, The initial value problem*, John Wiley & Sons, London, 1991.
- [13] LINIGER, W. & WILLOUGHBY, R.A., Efficient integration methods for stiff systems of ordinary differential equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, v.7, p.47-66, 1970.



- [14] SCHAFER, E., A new approach to explain the high irradiance responses of photomorphogenesis on the basis of phytochrome, *J. of Math. Biology.*, v.2, p.41-56, 1975.
- [15] SHAMPINE, L.F. & WATTS, H.A., The art of writing a Runge-Kutta code, Part I, *Mathematical Software III*, Academic Press, p.257-275, 1977.
- [16] SHAMPINE, L.F. & WATTS, H.A., The art of writing a Runge-Kutta code, Part II, *Applied Mathematics and Computation*, v.5, n°93, p.93-121, 1979.
- [17] S. WOLFRAM, *Mathematica: A system for doing mathematics by computer*, Addison Wesley Publishing Company, Inc., second edition, 1991.
- [18] USMANI, R.S. & AGARWAL, R.P., An A-stable extended trapezoidal rule for the numerical integration of ordinary differential equations, *Computers Math. Applic.*, v.11, p.1183-1191, 1985.
- [19] VAN BOKHOVEN, W.M.G., Efficient higher order implicit one-step methods for the integration of stiff differential equations, *BIT*, v.20, p.34-43, 1980.
- [20] 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.
- [21] VAN DAELE, M., VAN HECKE, T., VANDEN BERGHE, G., & DE MEYER, H., Deferred correction with mono-implicit Runge - Kutta methods for first-order IVPs, *J. Comp. and Appl. Math.*, v.111, p.37-47, 1999.
- [22] VAN DER HOUWEN, P.J., HOFFMANN, W., SOMMEIJER, B.P., LIOEN, W.M., VAN DER VEEN, W.A., & DE SWART, J.J.B., *Test Set for IVP Solvers*, CWI publication, disponível via WWW em URL <http://www.cwi.nl/cwi/projects/IVPtestset/>.
- [23] 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.
- [24] VERISSIMO, F.A. & SILVA, H.H.M., Métodos estendidos de passo um para solução numérica de equações diferenciais ordinárias, *Resumos do XXI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional*, Caxambu/M.G., 1998.
- [25] VERWER, J.G., Gauss-Seidel iteration for stiff ODEs from chemical kinetics, *SIAM J. Sci. Comput.*, v.15, p.1243-1259, 1994.



