

Oscar Alessandro de Matos

**Métodos Estendidos para Problemas de
Valor Inicial com Soluções Oscilantes**



1910001093



**MÉTODOS ESTENDIDOS PARA PROBLEMAS DE
VALOR INICIAL COM SOLUÇÕES OSCILANTES***Oscar Alessandro de Matos*

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada
MAP - 062

**MÉTODOS ESTENDIDOS PARA PROBLEMAS DE
VALOR INICIAL COM SOLUÇÕES OSCILANTES**

Oscar Alessandro de Matos

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada
MAP - 062

Métodos Estendidos para Problemas de Valor Inicial com Soluções Oscilantes

Oscar Alessandro de Matos**

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.

Orientador: Profa. Dra. Heloisa Helena Marino Silva



T 1.093/02

São José do Rio Preto

22 de fevereiro de 2002

**contatos: oscaram77@hotmail.com



± 517.91

M433m

10102043 - Equações diferenciais ordinárias

Matos, Oscar Alessandro de.

Métodos estendidos de passo um para problemas de valor inicial com soluções oscilantes / Oscar Alessandro de Matos. – São José do Rio

Preto : [s.n.], 2002

105 f. : il. ; 30 cm.

Orientador: Heloisa Helena Marino Silva

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas.

1. Métodos numéricos para equações diferenciais ordinárias. 2. Métodos estendidos de passo um. 3. Métodos estendidos de passo um não dissipativo. 4. Métodos estendidos de passo um unicamente implícito. I. Silva, Heloisa Helena Marino. II. Universidade Estadual Paulista. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas. III. Título.

CDU – 517.91



Agradecimentos

Primeiramente, todos os créditos dados a Jesus, o Deus de todos todos. Pois em toda obra do livro "A Minha Vida", os meritos claros que Ele me ajudou. Obrigado Deus !!

Um agradecimento especial a minha orientadora Prof. Dra. Regina H. de M. Maria Silva, pela sempre-dutiva, pela paciência e atenção dada desde a primeira etapa. Muito Obrigada!!!

Gostaria de agradecer também ao Prof. Dr. Marçal Pacheco, ao Prof. Dr. Marçal Bonaventura e ao Prof. Dr. Walter João Cortez Mendes, pela ajuda e atenção em todas as etapas. Obrigado por tudo !!

A Papai, pela sempre firmeza durante esse período. Obrigada !!

A minha mãe, pela incentivo desde o início e pela sempre-dutiva e atenção dada desde o início. Muito Obrigada !!

Aos meus pais e família que sempre me apoiaram. Muito Obrigada !!

Aos meus amigos "El Filantropo": Anderson, Anderson, Milena, Jéssica, Valéria, Dênis, Barbara, Karen e Dênis, pela ajuda. Muito Obrigada !!

E, por fim, ao Deus e ao Espírito Santo, pela sempre-dutiva e atenção dada desde o início. Muito Obrigada !!

Aos amigos e colegas, pela sempre-dutiva e atenção dada desde o início. Muito Obrigada !!

Aos amigos e colegas, pela sempre-dutiva e atenção dada desde o início. Muito Obrigada !!

Aos meus pais, Vanda e Oscar.

Aos meus irmãos, Anderson e Glauciete e,

à minha noiva, Sarah,

Dedico

Agradecimentos

Primeiramente, todos os méritos dados a mim, a Deus darei todos. Pois em cada linha do livro, "A Minha Vida", há marcas claras que Ele me ajudou. Graças Dou !!!

Um agradecimento especial a minha orientadora Prof. Dra. Heloisa Helena Marino Silva, pelo companheirismo, pela paciência e atenção dada desde a iniciação científica. Nós Conseguimos !!!

Gostaria de agradecer também ao Prof. Dr. Masayoshi Tsuchida, ao Prof. Dr. Maurílio Boaventura e, ao Prof. Dr. Walter Júlio Cortez Morales, pela ajuda e atenção sem medida. Obrigado por Tudo !!!

À Fapesp, pelo auxílio financeiro durante esse período. Ganhamos !!!

À minha noiva, pelo incentivo dado a cada dia e, pelo entendimento nos dias que me dediquei inteiramente a esse trabalho. Valeu Demais !!!

Aos meus pais e irmãos que tanto amo. Sou Grato !!!

Aos meus amigos "El Pilantron": Andrea, Junior, Milena, João, Sabrina, Weber, Deise, Barbara, Karen e Fausto, pela ajuda. Só se for agora !!!

Em especial ao Rômulo e Dilene, pelas descontrações nas horas de folga. Curtimos !!!

Aos grupos musicais pelo qual participei: Banda Compromisso, Coral Jovem Novo Canto, Coral Ruth Anderson e, em especial Quarteto Face a Face (Evandro, Alex e Kiko), pela força e intercessão. Que Deus vos abençoe !!!

A todas as pessoas que esqueci de agradecer. Desculpe-me !!!



Resumo

Neste trabalho fazemos uma análise da classe dos métodos estendidos de passo um, que tem sido propostos na literatura, para a resolução de equações diferenciais que apresentam soluções oscilatórias. Problemas desse tipo ocorrem freqüentemente na prática e, em geral, oferecem dificuldades para os códigos existentes. Para um melhor desempenho dos métodos, algumas propriedades de estabilidade são exigidas. Os métodos estudados foram testados computacionalmente em problemas de interesse prático e os resultados comparados com outra classe de métodos proposta para a resolução de problemas com soluções oscilatórias.



Abstract

In this work we analyse the class of extended one-step methods, that has been proposed in the literature, for the numerical integration of differential equations which possess oscillating solutions. Problems of this type frequently occur in practice and, in general, they offer some difficulties for the existing codes. For a better performance of the methods, some stability properties are requested. The studied methods are numerically tested on problems of practical interest and the results compared with another class of methods proposed for the integration of problems with oscillating solutions.

Sumário

Introdução	8
1 Métodos Estendidos de Passo-um	11
1.1 Introdução	11
1.2 Análise da Estabilidade dos Métodos Estendidos de Passo-um . .	13
1.3 Uma Interpretação Geométrica para as Propriedades: Phase-Lag e Não-Dissipatividade	19
2 Métodos Estendidos de Passo-um Não-Dissipativos	22
2.1 Introdução	22
2.2 Métodos de Ordem 2 ($m=2$)	22
2.3 Métodos de Ordem 3 ($m=3$)	23
2.4 Métodos de Ordem 4 ($m=4$)	24
2.5 Métodos de Ordem 5 ($m=5$)	26
2.6 Métodos de Ordem 6 ($m=6$)	27
2.7 Métodos de Ordem 7 ($m=7$)	29
2.8 Experimentos Numéricos	31
3 Métodos Estendidos de Passo-um Unicamente Implícitos	37
3.1 Introdução	37
3.2 Métodos de Passo-um Unicamente Implícitos	38
3.2.1 Estabilidade dos Métodos Estendidos de Passo-um	39

3.2.2	Phase-Lag dos Métodos Estendidos de Passo-um	45
3.3	Métodos Estendidos de Passo-um de Ordem 3	46
3.4	Métodos Estendidos de Passo-um de Ordem 4	51
3.4.1	Métodos P-estáveis de ordem 4 e 2 estágios	53
3.4.2	Métodos P-estáveis de ordem 4 e 3 estágios	55
4	Métodos de Runge-Kutta-Nyström Diagonalmente Implícitos	59
4.1	Introdução	59
4.2	Métodos DIRKN	60
4.3	Estabilidade dos Métodos DIRKN	61
4.4	Construção dos Métodos DIRKN P-estáveis de ordem 2	63
4.4.1	Métodos com 1 estágio	64
4.4.2	Métodos com 2 estágios	65
4.4.3	Métodos com 3 estágios	68
5	Resultados Numéricos	70
5.1	Introdução	70
5.2	Notações para os Métodos	70
5.3	Problemas e Resultados	72
6	Conclusão	88
	Apêndice	91
	Referências Bibliográficas	103

Introdução

Ao tentar modelar um fenômeno ou experimento, principalmente problemas que descrevem fenômenos físicos, químicos e biológicos, nos deparamos frequentemente com as equações diferenciais ordinárias (EDO). Estas equações, quando associadas a uma condição inicial, constituem o que denominamos um problema de valor inicial (PVI).

Em sua grande maioria, as modelagens que resultam num PVI, não possuem solução analítica explicitável. Sendo assim, recorreremos às técnicas numéricas para solucionar esses problemas, uma vez garantida a existência e unicidade da solução do PVI num certo intervalo. Essas técnicas numéricas, também chamadas de métodos numéricos, geram aproximações em diferentes pontos do intervalo de existência da solução. Assim, as pesquisas nesta área são voltadas para a busca de métodos numéricos que geram aproximações com a precisão desejada, e além disso, com o menor esforço computacional possível.

A escolha de um método para resolver numericamente um PVI exige muitas considerações. Em geral, escolhem-se os métodos de passo um, particularmente os pertencentes à classe de Runge-Kutta¹, em virtude de serem auto-iniciáveis, de sua precisão e do fato de serem fáceis de programar. Entretanto, uma séria desvantagem destes métodos é que exigem muitos cálculos da função para cada passo.

¹**Carl C. T. Runge**(1856-1927) Professor alemão de matemática aplicada na Universidade de Göttingen, Runge elaborou esse método numérico por volta de 1895 e M. W. Kutta ampliou-o em 1901. Na matemática, Runge também deu contribuição notável no campo das equações diofantinas. Na física, Runge é lembrado por seu trabalho sobre o efeito de Zeeman.

Martin W. Kutta(1867-1944) Também um matemático aplicado alemão, Kutta deu contribuição significativa no campo da aerodinâmica.



Uma outra classe é a dos métodos lineares de passo múltiplo, a qual não tem a característica de ser auto-iniciável mas, utiliza o cálculo da função em passos anteriores e calcula apenas uma nova função para cada passo, o que pode levar a uma economia no tempo de execução e a um menor esforço computacional.

Entretanto, tanto a classe dos métodos de Runge-Kutta quanto a classe dos métodos lineares de passo múltiplo, não resolvem, em geral, com a precisão desejada os PVI's que possuem soluções oscilatórias. Consideráveis investigações têm sido feitas na busca de propriedades e métodos mais adequados para estes problemas. Brusa e Nigro [1] foram os pioneiros a usar uma propriedade chamada *phase-lag* como uma ferramenta para analisar o comportamento de métodos para a resolução numérica de problemas com solução oscilatória. A partir daí, vários métodos têm sido propostos para a solução de sistemas de equações diferenciais de primeira e segunda ordem, que apresentam soluções oscilatórias. Entre os vários artigos publicados, citamos Lambert [12], Van der Hower e Sommeijer [19], [20], [21], Sideris e Simos [16], Calvo e outros [4].

O objetivo principal desse trabalho é fazer um estudo da estabilidade dos chamados métodos estendidos de passo um, que trazem embutidos à sua construção propriedades que asseguram um melhor desempenho, quando o problema apresenta soluções oscilatórias.

Os métodos estendidos, foram inicialmente propostos em [7] para a resolução de PVI do tipo stiff. Eles são obtidos pelo acoplamento de métodos lineares de passo múltiplo e, apesar de serem implícitos e de passo um, utilizam informações nos pontos imediatamente posteriores ao ponto de integração.

Mais recentemente, em 1998, Chawla e Al-Zanaid [8], analisaram a estabilidade da classe dos métodos estendidos de passo um para a integração numérica de PVI de 1ª ordem com soluções oscilatórias e obtiveram métodos não-dissipativos de ordem 2 a 5, os quais apresentamos em detalhes nos Capítulos 1 e 2. Em [22] e [17], foi mostrado que é possível obter famílias de métodos estendidos de passo-um com ordens 6 e 7, mas mostramos, no capítulo 2, que não existem métodos



não-dissipativos pertencentes a esta família.

Em 1999, Chawla, Al-Zanaid e Al-Ghonaim [5], propuseram uma nova classe de métodos estendidos de passo-um unicamente implícitos, aplicáveis diretamente a PVI's de segunda ordem que possuem soluções oscilatórias. Eles buscavam métodos que satisfizessem à propriedade da P-estabilidade [12], pois isso asseguraria uma melhor performance dos métodos quando aplicados em problemas oscilatórios. Os métodos unicamente implícitos possuem uma característica semelhante aos dos métodos estendidos ditos anteriormente. Eles exigem, além do cálculo do deslocamento, y_{n+1} (parte implícita), o cálculo da velocidade, y'_{n+1} (parte explícita). Nós mostramos, no Capítulo 3, a obtenção desses métodos e analisamos suas propriedades de estabilidade.

Uma outra classe de métodos proposta para a resolução de PVI's de segunda ordem com soluções oscilatórias é a dos métodos de Runge-Kutta-Nyström diagonalmente implícitos (DIRKN). Van der Houwen e Sommeijer [21], em 1989, construíram os métodos DIRKN P-estáveis de ordem 2 com 1, 2 e 3 estágios. Em 1990, Sharp, Fine e Burrage [15], analisaram a estabilidade dos métodos DIRKN de ordem 3 e 4 de 2 e 3 estágios, respectivamente. Eles chegaram à não existência de métodos DIRKN P-estáveis de ordem 3 e 2 estágios mas, conseguiram uma família de métodos DIRKN P-estáveis de ordem 4 e 3 estágios. Entretanto a obtenção desses métodos é bastante complexa. Apresentamos, no Capítulo 4, apenas a construção dos métodos de 1 e 2 estágios, pois nossa intenção é mostrar a dificuldade de obter métodos DIRKN de ordem superior a 2, o que é uma desvantagem em relação aos métodos estendidos unicamente implícitos.

Todos os métodos estudados foram implementados e testados em PVI's oscilatórios encontrados na literatura. No capítulo 5, apresentamos os resultados numéricos obtidos. Analisamos o erro absoluto, diferença em módulo entre solução aproximada e exata, comparando os métodos entre si.

E para finalizar, apresentamos, no Capítulo 6, nossas considerações finais, analisando o trabalho de uma maneira mais ampla.



Capítulo 1

Métodos Estendidos de Passo-um

1.1 Introdução

Estamos interessados na resolução de um PVI de primeira ordem do tipo

$$\begin{cases} y' &= f(t, y) \\ y(t_0) &= \eta \end{cases} \quad (1.1)$$

que possui soluções oscilatórias. Brusa e Nigro [1] foram os primeiros que consideraram aplicações dos métodos de Runge-Kutta (RK) para solução de problemas oscilatórios e introduziram a propriedade *phase-lag* como uma ferramenta para analisar o comportamento dos métodos para esses problemas. Desde então várias classes de métodos de RK tem sido propostas, dentre as quais citamos o trabalho de Van der Houwen e Sommeijer [19], Calvo e outros [4].

Mais recentemente, Chawla e Al-Zanaid [8], analisaram a estabilidade de métodos estendidos de passo um, para problemas oscilatórios. Descrevemos a seguir a forma clássica usada para analisar a estabilidade dos métodos de passo-um.

Seja a malha de pontos $t_n = t_0 + nh$, $n = 0, 1, 2, \dots$, onde h é o comprimento do passo, $y_n \approx y(t_n)$ sendo $y(t_n)$ a solução exata no ponto t_n e y_n a solução aproximada do PVI (1.1) e, $f_n = f(t_n, y_n)$.



Consideremos o método geral de passo-um para o problema (1.1) escrito na forma:

$$y_{n+1} = y_n + h\psi_f(y_{n+1}, y_n, t_n; h) \quad (1.2)$$

Para estudarmos a estabilidade dos métodos numéricos para PVI de primeira ordem com soluções oscilatórias, tomamos a seguinte equação teste

$$y' = i\omega y, \quad \omega \in \mathbb{R}, \quad i = \sqrt{-1}, \quad (1.3)$$

cujas solução exata é $y(t) = y_0 e^{i\omega t}$, onde $y_0 \in \mathbb{R}$.

Quando um método de passo-um (1.2) é aplicado à equação teste (1.3), podemos escrever

$$y_{n+1} = R(i\nu)y_n, \quad \nu = \omega h. \quad (1.4)$$

Vemos então que y_{n+1} em (1.4) depende de uma função $R(i\nu)$. Sobre essa função temos duas definições relacionadas com a estabilidade que serão relevantes para os estudos feitos nas seções posteriores.

Definição 1.1. Um método de passo-um (1.2) é chamado não-dissipativo se

$$|R(i\nu)| = 1 \quad \text{para todo } \nu > 0. \quad (1.5)$$

Definição 1.2. Um método de passo-um (1.2) tem erro de dispersão

$$\phi(\nu) := \nu - \arg(R(i\nu)) = c\nu^{r+1} + O(\nu^{r+2}), \quad (1.6)$$

onde r é a ordem de dispersão, e $\phi_p(\nu) = c\nu^r$ denota o phase-lag do método.

Para a classe dos métodos de Runge-Kutta os conceitos acima foram considerados em [3].

Em seguida, definimos a classe dos métodos estendidos de passo um e analisamos sua estabilidade.



1.2 Análise da Estabilidade dos Métodos Estendidos de Passo-um

A classe dos métodos estendidos de passo um de ordem m , para a integração do PVI (1.1), é definida por Chawla [7] da seguinte forma: para $j=2, \dots, m-1$,

$$\begin{aligned} \hat{y}_{n+j} &= \beta_{j0}y_n + \beta_{j1}y_{n+1} + h[\gamma_{j0}f_n + \gamma_{j1}f_{n+1} + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk}\hat{f}_{n+k}], \\ \hat{f}_{n+j} &= f(t_{n+j}, \hat{y}_{n+j}), \\ y_{n+1} &= y_n + h[\alpha_0f_n + \alpha_1f_{n+1} + \sum_{j=2}^{m-1} \alpha_j\hat{f}_{n+j}] + T_n(h), \end{aligned} \tag{1.7}$$

onde $T_n(h) = O(h^{m+1})$. Um método descrito pelas equações (1.7) (omitindo $T_n(h)$) pode ser representado pela seguinte tabela:

TAB. I - Métodos Estendidos de Passo - Um						
α_0	α_1	α_2	$\dots$	$\dots$	$\dots$	α_{m-1}
β_{20}	β_{21}	γ_{20}	γ_{21}			
β_{30}	β_{31}	γ_{30}	γ_{31}	γ_{32}		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
$\beta_{m-1,0}$	$\beta_{m-1,1}$	$\gamma_{m-1,0}$	$\gamma_{m-1,1}$	$\gamma_{m-1,2}$	$\dots$	$\gamma_{m-1,m-2}$

Nosso objetivo é obter métodos estendidos de passo-um não-dissipativos. Para isso, precisamos fazer a análise da estabilidade destes métodos, considerando a definição 1.1.

Sendo assim, aplicando o método definido em (1.7) à equação teste (1.3), nós obtemos:



$$\hat{y}_{n+j} = \beta_{j0}y_n + \beta_{j1}y_{n+1} + h[\gamma_{j0}i\omega y_n + \gamma_{j1}i\omega y_{n+1} + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk}i\omega \hat{y}_{n+k}],$$

$$j = 2, \dots, m-1,$$

(1.8)

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 i\omega y_n + \alpha_1 i\omega y_{n+1} + \sum_{j=2}^{m-1} \alpha_j i\omega \hat{y}_{n+j}].$$

Denotando, como em (1.4), $\omega h = \nu$ e colocando em evidência os termos em comum, temos:

$$\hat{y}_{n+j} = (\beta_{j0} + i\nu\gamma_{j0})y_n + (\beta_{j1} + i\nu\gamma_{j1})y_{n+1} + i\nu \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk} \hat{y}_{n+k},$$

$$j = 2, \dots, m-1,$$

(1.9)

$$y_{n+1} = (1 + i\nu\alpha_0)y_n + i\nu\alpha_1 y_{n+1} + i\nu \sum_{j=2}^{m-1} \alpha_j \hat{y}_{n+j}.$$

Para expressarmos o método (1.9) na forma (1.4), é conveniente usarmos uma notação matricial, definindo os seguintes vetores no $\mathbb{R}^{m-2}$:

$$\underline{\beta}_i = (\beta_{2,i}, \beta_{3,i}, \dots, \beta_{m-1,i})^t, \quad \underline{\gamma}_i = (\gamma_{2,i}, \gamma_{3,i}, \dots, \gamma_{m-1,i})^t, \quad i = 0, 1,$$

$$\underline{\hat{y}}_n = (\hat{y}_{n+2}, \hat{y}_{n+3}, \dots, \hat{y}_{n+m-1})^t.$$

Ainda, denotamos por $\Gamma \in \mathbb{R}^{m-2} \times \mathbb{R}^{m-2}$ a matriz estritamente triangular inferior

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \gamma_{3,2} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \gamma_{4,2} & \gamma_{4,3} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{m-1,2} & \gamma_{m-1,3} & \dots & \gamma_{m-1,m-2} & 0 \end{bmatrix}.$$

Podemos escrever a primeira equação em (1.9) como:

$$\hat{y}_{n+j} - i\nu \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk} \hat{y}_{n+k} = (\beta_{j0} + i\nu\gamma_{j0})y_n + (\beta_{j1} + i\nu\gamma_{j1})y_{n+1}$$

para $j=2, \dots, m-1$.

Agora, para cada j , temos:

$$\begin{aligned}
 \hat{y}_{n+2} - i\nu \sum_{k=2}^{\overbrace{1}^{=0}} \gamma_{2k} \hat{y}_{n+k} &= (\beta_{20} + i\nu\gamma_{20})y_n + (\beta_{21} + i\nu\gamma_{21})y_{n+1} \\
 \hat{y}_{n+3} - i\nu \sum_{k=2}^{\overbrace{2}^{=\gamma_{32}\hat{y}_{n+2}}} \gamma_{3k} \hat{y}_{n+k} &= (\beta_{30} + i\nu\gamma_{30})y_n + (\beta_{31} + i\nu\gamma_{31})y_{n+1} \\
 &\vdots \\
 \hat{y}_{n+m-1} - i\nu \sum_{k=2}^{\overbrace{m-2}} \gamma_{m-1,k} \hat{y}_{n+k} &= (\beta_{m-1,0} + i\nu\gamma_{m-1,0})y_n + (\beta_{m-1,1} + i\nu\gamma_{m-1,1})y_{n+1} \\
 &= \gamma_{m-1,2}\hat{y}_{n+2} + \gamma_{m-1,3}\hat{y}_{n+3} + \dots + \gamma_{m-1,m-2}\hat{y}_{n+m-1}
 \end{aligned}$$

Então, as $m-2$ primeiras equações em (1.9) podem ser escritas na seguinte forma:

$$(I - i\nu\Gamma)\hat{\underline{y}}_n = (\underline{\beta}_0 + i\nu\underline{\gamma}_0)y_n + (\underline{\beta}_1 + i\nu\underline{\gamma}_1)y_{n+1}, \quad (1.10)$$

onde I denota a matriz identidade.

Agora, denotando por $\underline{\alpha} = (\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_{m-1})^T$ o vetor $\in \mathbb{R}^{m-2}$ e, usando o mesmo raciocínio como anteriormente, a segunda equação em (1.9) pode ser escrita como:

$$y_{n+1} = (1 + i\nu\alpha_0)y_n + i\nu\alpha_1 y_{n+1} + i\nu\underline{\alpha}^T \hat{\underline{y}}_n. \quad (1.11)$$

Pelo fato do determinante da matriz $(I - i\nu\Gamma)$ ser igual a 1, podemos afirmar que sua inversa sempre existe, a qual denotamos por M , e então, substituindo $\hat{\underline{y}}_n$, definido por (1.10), em (1.11), obtemos:

$$y_{n+1} = R(i\nu)y_n, \quad (1.12)$$

onde

$$R(i\nu) = \frac{N(i\nu)}{D(i\nu)},$$

sendo

$$\begin{aligned} N(i\nu) &= 1 + i\nu[\alpha_0 + \underline{\alpha}^T M(\underline{\beta}_0 + i\nu\underline{\gamma}_0)] \quad e \\ D(i\nu) &= 1 - i\nu[\alpha_1 + \underline{\alpha}^T M(\underline{\beta}_1 + i\nu\underline{\gamma}_1)]. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Podemos verificar que para $m \geq 3$, $\Gamma^{m-2} = \underline{0}$.² Desse modo, a matriz M pode ser escrita como uma série finita:

$$M = \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^j \Gamma^j + \underbrace{\sum_{j=m-2}^{\infty} (i\nu)^j \Gamma^j}_{= \underline{0}} \quad (1.14)$$

Substituindo (1.14) em (1.13), obtemos:

$$\begin{aligned} N(i\nu) &= 1 + i\nu[\alpha_0 + \underline{\alpha}^T \underline{\beta}_0 + \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^j (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} \underline{\beta}_0 + \underline{\alpha}^T \Gamma^j \underline{\gamma}_0)], \\ D(i\nu) &= 1 - i\nu[\alpha_1 + \underline{\alpha}^T \underline{\beta}_1 + \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^j (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} \underline{\beta}_1 + \underline{\alpha}^T \Gamma^j \underline{\gamma}_1)]. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Agora, podemos aplicar a definição 1.1, que nos levará a condições para encontrarmos métodos estendidos não-dissipativos.

Observemos que $|R(i\nu)| = 1$, $\forall \nu > 0$ desde que $N(i\nu)$ seja o complexo conjugado de $D(i\nu)$. Com isso, das equações (1.15), nós obtemos:

Teorema 1.1. *Um método definido por (1.7) é não dissipativo se*

$$\alpha_0 - \alpha_1 + \underline{\alpha}^T (\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) = 0 \quad (1.16)$$

e

$$\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} [\underline{\beta}_0 + (-1)^j \underline{\beta}_1] + \underline{\alpha}^T \Gamma^j [\underline{\gamma}_0 + (-1)^j \underline{\gamma}_1] = 0, \quad j = 0, \dots, m-3. \quad (1.17)$$

² denotamos por $\underline{0}$ a matriz nula



Desse modo, podemos escrever

$$N(i\nu) = p(\nu) + iq(\nu) \quad e \quad D(\nu) = p(\nu) - iq(\nu). \quad (1.18)$$

Temos que $N(i\nu) + D(i\nu) = 2p(\nu)$. Desse modo,

$$\begin{aligned} & 1 + i\nu[\alpha_0 + \underline{\alpha}^T \underline{\beta}_0 + \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^{j+1} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} \underline{\beta}_0 + \underline{\alpha}^T \Gamma^j \underline{\gamma}_0)] \\ & + 1 - i\nu[\alpha_1 + \underline{\alpha}^T \underline{\beta}_1 + \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^{j+1} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} \underline{\beta}_1 + \underline{\alpha}^T \Gamma^j \underline{\gamma}_1)] \\ = & 2 + i\nu[\underbrace{(\alpha_0 - \alpha_1) + \underline{\alpha}^T (\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1)}_{= 0 \quad (\text{pelo teorema 1.1})}] \\ & + \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^{j+1} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} (\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^j (\underline{\gamma}_0 - \underline{\gamma}_1)) \\ = & 2 + i\nu \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^{j+1} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} (\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^j (\underline{\gamma}_0 - \underline{\gamma}_1)) \\ = & 2 + \sum_{j=0}^{m-3} i^{j+2} \nu^{j+2} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} (\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^j (\underline{\gamma}_0 - \underline{\gamma}_1)) \\ \text{por (1.17)} \quad = & 2 + \sum_{j=0}^s (-1)^{j+1} \nu^{2j+2} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{2j+1} (\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^{2j} (\underline{\gamma}_0 - \underline{\gamma}_1)) = 2 p(\nu) \end{aligned}$$

ou seja,

$$p(\nu) = 1 + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^s (-1)^{j+1} \nu^{2j+2} \{ \underline{\alpha}^T \Gamma^{2j+1} (\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^{2j} (\underline{\gamma}_0 - \underline{\gamma}_1) \} \quad (1.19)$$

onde s é o maior inteiro em $\frac{(m-3)}{2}$.

Por outro lado, temos que, $N(i\nu) - D(i\nu) = 2iq(\nu)$. Além disso, usaremos a condição de consistência [13] que para esses métodos é dada por

$$\alpha_0 + \alpha_1 + \underline{\alpha}^T (\underline{\beta}_0 + \underline{\beta}_1) = 1. \quad (1.20)$$



Desse modo,

$$\begin{aligned}
 & 1 + i\nu[\alpha_0 + \underline{\alpha}^T \underline{\beta}_0 + \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^{j+1} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} \underline{\beta}_0 + \underline{\alpha}^T \Gamma^j \underline{\gamma}_0)] \\
 & - \{1 - i\nu[\alpha_1 + \underline{\alpha}^T \underline{\beta}_1 + \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^{j+1} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} \underline{\beta}_1 + \underline{\alpha}^T \Gamma^j \underline{\gamma}_1)]\} \\
 = & \underbrace{i\nu[(\alpha_0 + \alpha_1) + \underline{\alpha}^T (\underline{\beta}_0 + \underline{\beta}_1)]}_{= 1 \quad (\text{por (1.20)})} \\
 & + \sum_{j=0}^{m-3} (i\nu)^{j+1} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} (\underline{\beta}_0 + \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^j \underline{\gamma}_0 + \underline{\gamma}_1)] \\
 = & i\nu[1 + \sum_{j=0}^{m-3} i^{j+1} \nu^{j+1} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} (\underline{\beta}_0 + \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^j \underline{\gamma}_0 + \underline{\gamma}_1)] \\
 \text{por (1.17)} \quad & i\nu[1 + \sum_{j=0}^s (-1)^{j+1} \nu^{2j+2} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+2} (\underline{\beta}_0 + \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} (\underline{\gamma}_0 + \underline{\gamma}_1))] = 2 i q(\nu)
 \end{aligned}$$

ou seja,

$$q(\nu) = \frac{1}{2} \nu \left[1 + \sum_{j=0}^s (-1)^{j+1} \nu^{2j+2} (\underline{\alpha}^T \Gamma^{j+2} (\underline{\beta}_0 + \underline{\beta}_1) + \underline{\alpha}^T \Gamma^{j+1} (\underline{\gamma}_0 + \underline{\gamma}_1)) \right] \quad (1.21)$$

Novamente, escrevendo $R(i\nu) = \frac{N(i\nu)}{D(i\nu)}$ e usando (1.18), com

$$\begin{aligned}
 p(\nu) &= r \cos \theta(\nu) & e \\
 q(\nu) &= r \sin \theta(\nu)
 \end{aligned} \quad (1.22)$$

temos:

$$\begin{aligned}
 R(i\nu) &= \frac{p(\nu) + iq(\nu)}{p(\nu) - iq(\nu)} = \frac{r(\cos \theta(\nu) + i \sin \theta(\nu))}{r(\cos \theta(\nu) - i \sin \theta(\nu))} \times \frac{(\cos \theta(\nu) + i \sin \theta(\nu))}{(\cos \theta(\nu) + i \sin \theta(\nu))} = \\
 &= \frac{(\cos \theta(\nu))^2 + i \sin \theta(\nu) \cos \theta(\nu) + i \sin \theta(\nu) \cos \theta(\nu) - (\sin \theta(\nu))^2}{\underbrace{(\cos \theta(\nu))^2 + i \sin \theta(\nu) \cos \theta(\nu) - i \sin \theta(\nu) \cos \theta(\nu) + (\sin \theta(\nu))^2}_{=0}} = \\
 &= ((\cos \theta(\nu))^2 - (\sin \theta(\nu))^2) + 2i \sin \theta(\nu) \cos \theta(\nu) \\
 &= \cos 2\theta(\nu) + i \sin 2\theta(\nu) = e^{2\theta(\nu)i} = e^{\sigma(\nu)i},
 \end{aligned} \quad (1.23)$$

sendo $\sigma(\nu) = 2\theta(\nu)$.

Pela equação (1.22), temos:

$$\frac{q(\nu)}{p(\nu)} = \frac{r \operatorname{sen} \theta(\nu)}{r \cos \theta(\nu)} = \tan \theta(\nu) \implies \theta(\nu) = \arctan \frac{q(\nu)}{p(\nu)}.$$

Podemos assim, usar a definição 1.2 para os métodos estendidos de passo-um não-dissipativos, obtendo o seguinte resultado:

Teorema 1.2. *O erro de dispersão do método definido por (1.7) é dado por*

$$\phi(\nu) = \nu - \arg(R(i\nu)) = \nu - \sigma(\nu) = \nu - 2 \arctan \frac{q(\nu)}{p(\nu)}. \quad (1.24)$$

1.3 Uma Interpretação Geométrica para as Propriedades: Phase-Lag e Não-Dissipatividade

Considerando $y(t_n)$ e y_n como vetores do plano complexo, tentaremos interpretar, geometricamente, os dois conceitos definidos na seção 1.2. Começando pela propriedade *phase-lag*, temos que:

$$\begin{aligned} y(t_n) &= y_0 e^{i\omega t_n} = y_0 e^{i\omega(t_0 + nh)} = \\ &= y_0 e^{i\omega t_0} e^{i\omega nh} = y_0 e^{i\omega nh} = y_0 e^{in\nu} \\ &= y_0 (\cos n\nu + i \operatorname{sen} n\nu). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Pela equação (1.12), temos que

$$y_{n+1} = R(i\nu)y_n, \quad n = 0, 1, \dots$$

Assim,

$$\begin{aligned} y_1 &= R(i\nu)y_0 \\ y_2 &= R(i\nu)y_1 = [R(i\nu)]^2 y_0 \\ y_3 &= R(i\nu)y_2 = [R(i\nu)]^3 y_0 \\ &\vdots \\ y_n &= [R(i\nu)]^n y_0. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Usando a equação (1.23), podemos reescrever a equação (1.26) como:

$$y_n = y_0 c^{in\sigma(\nu)}. \quad (1.27)$$

Logo,

$$\arg(y(t_n)) - \arg(y_n) = y_0 [\arg(\cos n\nu + i \sin n\nu) - \arg(e^{in\sigma(\nu)})]$$

Como

$$\arg(\cos n\nu + i \sin n\nu) = n\nu \quad \text{e} \quad \arg(e^{in\sigma(\nu)}) = n\sigma(\nu),$$

e usando a definição 1.2 concluímos que

$$\begin{aligned} \arg(y(t_n)) - \arg(y_n) &= y_0 [n\nu - n\sigma(\nu)] = \\ &= ny_0 [\nu - \sigma(\nu)] = ny_0 [\nu - \arg(R(i\nu))] = \\ &= ny_0 [c\nu^{r+1} + O(\nu^{r+2})] = cny_0 \nu^{r+1} + O(\nu^{r+2}). \end{aligned} \quad (1.28)$$

Isto é, o *phase-lag* ϕ_p do método é proporcional à diferença angular entre o vetor solução exata $y(t_n)$ e o vetor aproximação y_n .



Agora, tentamos mostrar uma idéia da propriedade de não-dissipatividade. Consideramos a definição descrita a seguir.

Definição 1.3. Denomina-se erro de amplificação de um método de passo-um que denotamos por $a(\nu)$ a quantidade:

$$a(\nu) = 1 - |R(i\nu)|. \quad (1.29)$$

Fazendo a diferença de amplitudes entre os vetores $y(t_n)$ e y_n , temos que:

$$\begin{aligned} |y(t_n)| - |y_n| &= |y_0(\cos n\nu + i \operatorname{sen} n\nu)| - |y_0 e^{i n \sigma(\nu)}| = \\ &= |y_0| \{ |\cos n\nu + i \operatorname{sen} n\nu| - |e^{i n \sigma(\nu)}| \} = \\ &= |y_0| \{ 1 - |[R(i\nu)]^n| \} \end{aligned}$$

Isto é, o erro de amplificação é proporcional à diferença de amplitudes entre o vetor solução exata $y(t_n)$ e o vetor aproximação y_n .

Estamos estudando métodos não-dissipativos, por isso consideramos $|R(i\nu)| = 1$, ou seja, a diferença de amplitude entre os dois vetores citados anteriormente é zero.

Capítulo 2

Métodos Estendidos de Passo-um Não-Dissipativos

2.1 Introdução

Apresentamos, neste capítulo, a obtenção dos métodos estendidos de passo-um não-dissipativos de ordem dois a cinco. As condições de ordem para esses métodos podem ser encontradas em Chawla [6] e [7]. Ainda, mostramos que não existem métodos não-dissipativos de ordem 6 e 7, a partir dos métodos estendidos de ordem 6 e 7 propostos respectivamente em [22] e [17].

2.2 Métodos de Ordem 2 ($m=2$)

O único método de passo-um e de segunda ordem é a regra trapezoidal clássica com $\alpha_0 = \alpha_1 = \frac{1}{2}$, sendo assim, olhando-o como um método estendido, podemos verificar se ele é não-dissipativo, aplicando os coeficientes α_0 e α_1 no teorema 1.1.

Vemos que a condição (1.17) não é aplicável, mas a condição (1.16) é trivialmente satisfeita. Dessa maneira a regra trapezoidal clássica é um método não-dissipativo para a integração de problemas oscilatórios.

Nosso próximo passo é calcular o *phase-lag* da regra trapezoidal, para isso,



substituímos os coeficientes do método em (1.19) e (1.21), obtendo assim: $p(\nu) = 1$ e $q(\nu) = \frac{1}{2}\nu$. Substituindo $p(\nu)$ e $q(\nu)$ em (1.24) e expandindo $\phi(\nu)$ em série de Taylor em torno de $\nu = 0$, temos:

$$\phi(\nu) = \nu - \arctan 2\nu = \frac{1}{12}\nu^3 + O(h^4).$$

Portanto, o erro de dispersão da regra trapezoidal clássica tem ordem 2 e seu *phase-lag* é dado por

$$\phi_p(\nu) = \frac{1}{12}\nu^2.$$

Colocando o método na forma da Tab. I, temos:

TAB. II - Regra Trapezoidal Não-dissipativa	
1/2	1/2

2.3 Métodos de Ordem 3 (m=3)

Nesse caso, existe uma família a um parâmetro de métodos estendidos de passo-um de 3ª ordem. Tomando β_{20} como o parâmetro livre, as condições de ordem fornecem

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{5}{12}, & \alpha_1 &= \frac{2}{3}, & \alpha_2 &= -\frac{1}{12} \\ \beta_{21} &= 1 - \beta_{20}, & \gamma_{20} &= -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\beta_{20}, & \gamma_{21} &= \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\beta_{20} \end{aligned}$$

Substituindo esses coeficientes na condição (1.16), temos

$$\begin{aligned} \alpha_0 - \alpha_1 + \underline{\alpha}^T(\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) &= \frac{5}{12} - \frac{2}{3} + \left(-\frac{1}{12}\right)(\beta_{20} - (1 - \beta_{20})) \\ &= -\frac{3}{12} - 2\frac{\beta_{20}}{12} + \frac{1}{12} = -\frac{2}{12} - 2\frac{\beta_{20}}{12} = -\frac{1}{6}(1 + \beta_{20}) = 0 \\ &\Rightarrow \beta_{20} = -1 \end{aligned}$$

Substituindo, agora, os coeficientes do método na condição (1.17) já considerando $\beta_{20} = -1$, temos:

$$\begin{aligned} &\underline{\alpha}^T \Gamma^1[\underline{\beta}_0 + (-1)^0 \underline{\beta}_1] + \underline{\alpha}^T \Gamma^0[\underline{\gamma}_0 + (-1)^0 \underline{\gamma}_1] \\ &= -\frac{1}{12}0[-1 + 2] + \left(-\frac{1}{12}\right)1[-1 + 1] = 0 \end{aligned}$$



Vemos que é fácil verificar que as condições (1.16) e (1.17) são ambas satisfeitas desde que $\beta_{20} = -1$.

Mostramos na Tab. III, o método estendido de passo um não-dissipativo de ordem 3 unicamente determinado.

TAB. III - Método Não-dissipativo de ordem 3			
5/12	2/3	-1/12	
-1	2	-1	1

Substituindo os valores acima na equação (1.19), encontramos que:

$$\begin{aligned} p(\nu) &= 1 - \frac{1}{12}\nu^2 \quad e \\ q(\nu) &= \frac{1}{2}\nu. \end{aligned}$$

Agora, substituindo $p(\nu)$ e $q(\nu)$ em (1.24) e expandindo $\phi(\nu)$ em série de Taylor, temos:

$$\phi(\nu) = \frac{1}{720}\nu^5 + O(\nu^7)$$

Com isso, obtemos o *phase-lag* do método que é dado por

$$\phi_p(\nu) = \frac{1}{720}\nu^4. \quad (2.1)$$

Notemos que embora o método tenha ordem algébrica 3, ele tem ordem de dispersão 4.

2.4 Métodos de Ordem 4 ($m=4$)

As condições de ordem para os métodos estendidos de passo-um de ordem 4 são

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{3}{8}, & \alpha_1 &= \frac{19}{24}, & \underline{\alpha}^T &= \left(-\frac{5}{24}, \frac{1}{24} \right), \\ \underline{\beta}_0^T &= (1 + 2\gamma_{20}, -8 + 2\gamma_{31} + 4\gamma_{32}), & \underline{\beta}_1^T &= (-2\gamma_{20}, 9 - 2\gamma_{31} - 4\gamma_{32}), \\ \underline{\gamma}_0^T &= (\gamma_{20}, -6 + \gamma_{31} + 3\gamma_{32}), & \underline{\gamma}_1^T &= (2\gamma_{20}, \gamma_{31}), \end{aligned}$$

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_{32} & 0 \end{pmatrix}, \text{ onde } \gamma_{31} = 8 + 5\gamma_{20} - 8\gamma_{32}$$

e γ_{20}, γ_{32} são parâmetros livres.

Substituindo os valores acima na condição (1.16), vemos que ela é satisfeita somente para $\gamma_{32} = 0$, enquanto que a condição (1.17) é satisfeita para $j = 0$, e para $j = 1$, usando o fato que $\gamma_{32} = 0$.

Nesse caso, concluímos que existe uma família de métodos estendidos de passo-um de ordem 4 com γ_{20} sendo um parâmetro livre.

Novamente, como feito para $m = 3$, substituindo os valores em (1.19) e (1.21), obtemos:

$$\begin{aligned} p(\nu) &= 1 - \frac{\nu^2}{12}, \\ q(\nu) &= \frac{1}{2}\nu, \end{aligned}$$

Agora, por (1.24) encontramos, como anteriormente, que o *phase-lag* para esses métodos é dado por

$$\phi_p(\nu) = \frac{1}{720}\nu^4. \tag{2.2}$$

Vemos que o *phase-lag* para esses métodos é independente do parâmetro livre γ_{20} . Chawla [6] mostrou que, uma "melhor" escolha para esse parâmetro é $\gamma_{20} = 2$, pois esse valor simplifica o cálculo da constante do erro. O método estendido de passo um não-dissipativo de ordem 4, com $\gamma_{20} = 2$, está exibido na tabela seguinte.

TAB. IV - Método Não-dissipativo de ordem 4				
3/8	19/24	-5/24	1/24	
5	-4	2	4	
28	-27	12	18	0



2.5 Métodos de Ordem 5 ($m=5$)

As condições de ordem para métodos estendidos de passo um de quinta ordem são:

$$\alpha_0 = \frac{251}{720}, \quad \alpha_1 = \frac{323}{360}, \quad \underline{\alpha}^T = \left(-\frac{11}{30}, \frac{53}{360}, -\frac{19}{720} \right),$$

$$\underline{\beta}_0^T = (5, 28 - 12\gamma_{32}, 81 - 12\gamma_{42} - 36\gamma_{43}),$$

$$\underline{\beta}_1^T = (-4, -27 + 12\gamma_{32}, -80 + 12\gamma_{42} + 36\gamma_{43}),$$

$$\underline{\gamma}_0^T = (2, 12 - 5\gamma_{32}, 36 - 5\gamma_{42} - 16\gamma_{43}), \quad \underline{\gamma}_1^T = (4, 18 - 8\gamma_{32}, 48 - 8\gamma_{42} - 21\gamma_{43}),$$

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \gamma_{32} & 0 & 0 \\ \gamma_{42} & \gamma_{43} & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{onde} \quad \gamma_{42} = -\frac{1}{19}(2 - 106\gamma_{32} + 95\gamma_{43})$$

e γ_{32}, γ_{43} são parâmetros livres.

Aplicando o Teorema 1.1, vemos que para (1.16) ser satisfeita, devemos ter

$$\gamma_{43} = -\frac{1}{19}, \quad (2.3)$$

enquanto que para a condição (1.17), temos:

para $j = 0$ chegamos em (2.3);

para $j=1$, obtemos:

$$19\gamma_{43}(3\gamma_{32} + 1) + 1 = 0 \quad (2.4)$$

e para $j=2$, temos que:

$$\gamma_{43}\gamma_{32} = 0 \quad (2.5)$$

Logo, como $\gamma_{43} = -\frac{1}{19}$, então $\gamma_{32} = 0$.

De (2.3) a (2.5) segue que existe um único método estendido de passo um não-dissipativo de ordem 5 correspondente aos valores $\gamma_{32} = 0$ e $\gamma_{43} = -1/19$. O método resultante está mostrado na tabela seguinte.

TAB. V - Método Não-dissipativo de ordem 5

251/720	323/360	-11/30	53/360	-19/720	
5	-4	2	4		
28	-27	12	18	0	
81	-80	685/19	909/19	3/19	-1/19

Para esse método, por (1.19) e (1.21), obtemos

$$p(\nu) = 1 - \frac{1}{10}\nu^2, \quad q(\nu) = \frac{1}{2}\nu \left(1 - \frac{1}{60}\nu^2\right)$$

e, como anteriormente, nós achamos que o *phase-lag* para esse método é dado por

$$\phi_p(\nu) = -\frac{11}{4800}\nu^6. \quad (2.6)$$

Notemos que embora a ordem algébrica do método é 5, ele tem ordem de dispersão 6.

Até então Chawla e Al-Zanaidi estudaram os métodos estendidos de passo-um de ordem 3 a 5. Em 1998, Veríssimo [22] construiu métodos de ordem 6, e em 2000, Souza [17] obteve métodos de ordem 7. Com isso, podemos verificar se nessas duas famílias de métodos de ordem 6 e 7, existem métodos não-dissipativos.

2.6 Métodos de Ordem 6 ($m=6$)

Consideramos as seguintes condições de ordem para os métodos de sexta ordem, encontradas em [22]:

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{95}{288}, & \alpha_1 &= \frac{1427}{1440}, & \underline{\alpha}^T &= \left(-\frac{133}{240}, \frac{241}{720}, -\frac{173}{1440}, \frac{3}{160}\right) \\ \underline{\beta}_0^T &= (5, 28 - 12\gamma_{32}, \beta_{40}, \beta_{50}), & \underline{\beta}_1^T &= (-4, -27 + 12\gamma_{32}, \beta_{41}, \beta_{51}), \\ \underline{\gamma}_0^T &= (2, 12 - 5\gamma_{32}, \gamma_{40}, \gamma_{50}), & \underline{\gamma}_1^T &= (4, 18 - 8\gamma_{32}, \gamma_{41}, \gamma_{51}), \end{aligned}$$



$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_{32} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-18+964\gamma_{32}-865\gamma_{43}}{173} & \gamma_{43} & 0 & 0 \\ \frac{-2412+482\gamma_{32}-865\gamma_{43}}{27} & \frac{964+173\gamma_{43}}{27} & \frac{173}{27} & 0 \end{pmatrix},$$

onde:

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

e γ_{32} , γ_{43} são parâmetros livres.

Como fizemos para os métodos de ordens inferiores, substituímos esses coeficientes nas equações (1.16) e (1.17) e, com a ajuda do software Mathematica, obtemos o seguinte resultado:

$$\alpha_0 - \alpha_1 + \underline{\alpha}^T(\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) = 9$$

$$\underline{\alpha}^T \Gamma^1[\underline{\beta}_0 + (-1)^0 \underline{\beta}_1] + \underline{\alpha}^T \Gamma^0[\underline{\gamma}_0 + (-1)^0 \underline{\gamma}_1] = \frac{9}{2}$$

$$\underline{\alpha}^T \Gamma^2[\underline{\beta}_0 + (-1)^1 \underline{\beta}_1] + \underline{\alpha}^T \Gamma^1[\underline{\gamma}_0 + (-1)^1 \underline{\gamma}_1] = \frac{54 + 173\gamma_{32}\gamma_{43}}{60}$$

$$\underline{\alpha}^T \Gamma^3[\underline{\beta}_0 + (-1)^2 \underline{\beta}_1] + \underline{\alpha}^T \Gamma^2[\underline{\gamma}_0 + (-1)^2 \underline{\gamma}_1] = \frac{9 + 173\gamma_{32}\gamma_{43}}{120}$$

$$\underline{\alpha}^T \Gamma^4[\underline{\beta}_0 + (-1)^3 \underline{\beta}_1] + \underline{\alpha}^T \Gamma^3[\underline{\gamma}_0 + (-1)^3 \underline{\gamma}_1] = \frac{173\gamma_{32}\gamma_{43}}{720}$$

Vemos então, que independentemente dos parâmetros livres a primeira equação já não satisfaz (1.16) e a segunda equação também não satisfaz (1.17), ou seja, não existem métodos estendidos não-dissipativos de ordem 6.

2.7 Métodos de Ordem 7 ($m=7$)

As condições de ordem para os métodos estendidos de ordem 7, encontradas em [17], são:

$$\alpha_0 = \frac{19087}{60480}, \quad \alpha_1 = \frac{2713}{2520}, \quad \underline{\alpha}^T = \left(-\frac{15487}{20160}, \frac{586}{945}, -\frac{6737}{20160}, \frac{263}{2520}, -\frac{863}{60480} \right)$$

$$\underline{\beta}_0^T = (5, 28 - 12\gamma_{32}, \beta_{40}, \beta_{50}, \beta_{60}), \quad \underline{\beta}_1^T = (-4, -27 + 12\gamma_{32}, \beta_{41}, \beta_{51}, \beta_{61}),$$

$$\underline{\gamma}_0^T = (2, 12 - 5\gamma_{32}, \gamma_{40}, \gamma_{50}, \gamma_{60}), \quad \underline{\gamma}_1^T = (4, 18 - 8\gamma_{32}, \gamma_{41}, \gamma_{51}, \gamma_{61}),$$

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_{32} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-18+964\gamma_{32}-865\gamma_{43}}{173} & \gamma_{43} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-2412+482\gamma_{32}-865\gamma_{43}}{27} & \frac{964+173\gamma_{43}}{27} & \frac{173}{27} & 0 & 0 \\ \gamma_{62} & \gamma_{63} & \gamma_{64} & -\frac{6312}{863} & 0 \end{pmatrix},$$

onde:

$$\gamma_{62} = \frac{28990592\gamma_{32}^2 + 144(122101 + 101055\gamma_{43}) - 3\gamma_{32}(33434466 + 26038505\gamma_{43})}{863(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\gamma_{63} = \frac{3(-4(131257 + 242532\gamma_{43}) + \gamma_{32}(2887808 + 5207701\gamma_{43}))}{863(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\gamma_{64} = \frac{40422(-65 + 348\gamma_{32})}{863(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\text{onde } \beta_{40} = \frac{554025 - 450048\gamma_{32} + 161688\gamma_{43}}{6737},$$

$$\beta_{50} = -\frac{2(5951106 - 36025774\gamma_{32} + 21742944\gamma_{32}^2 + 2910384\gamma_{43} - 156263103\gamma_{32}\gamma_{43})}{263(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\beta_{60} = \frac{114572304 - 681252175\gamma_{32} + 347887104\gamma_{32}^2 + 69849216\gamma_{43} - 374954472\gamma_{32}\gamma_{43}}{124272 - 667099\gamma_{32}},$$

$$\beta_{41} = \frac{-547288 + 450048\gamma_{32}}{6737} - 24\gamma_{43},$$

$$\beta_{51} = \frac{11864340 - 71848249\gamma_{32} + 43485888\gamma_{32}^2 + 5820768\gamma_{43} - 31246206\gamma_{32}\gamma_{43}}{263(-144 + 773\gamma_{32})},$$

$$\beta_{61} = \frac{12(28990592\gamma_{32}^2 + 72(132463 + 80844\gamma_{43}) - 3\gamma_{32}(18905141 + 10415402\gamma_{43}))}{863(-144 + 773\gamma_{32})},$$

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

$$\begin{aligned}\gamma_{50} &= \frac{(4505 - 2410\gamma_{32} + 1557\gamma_{43})}{27}, \\ \gamma_{41} &= \frac{328928 - 300032\gamma_{32} + 128003\gamma_{43}}{6737}, \\ \gamma_{51} &= \frac{33744062 - 202953864\gamma_{32} + 115962368\gamma_{32}^2 + 18432432\gamma_{43} - 98946319\gamma_{32}\gamma_{43}}{151488 - 813196\gamma_{32}}, \\ \gamma_{61} &= -\frac{83935668 + 231924736\gamma_{32}^2 + 55297296\gamma_{43} - 3\gamma_{32}(165015100 + 98946319\gamma_{43})}{863(-144 + 773\gamma_{32})},\end{aligned}$$

e γ_{32} , γ_{43} são parâmetros livres.

Substituindo as condições de ordem acima na equação (1.16), temos que:

$$\alpha_0 - \alpha_1 + \underline{\alpha}^T(\underline{\beta}_0 - \underline{\beta}_1) = \frac{-33264 + \gamma_{32}(178563 + 2344000\gamma_{43})}{-3024 + 16233\gamma_{32}} = 0$$

Do mesmo modo, substituindo nas equações (1.17), obtemos:

$$\begin{aligned}\text{para } j = 0 &\Rightarrow \frac{33264 - 178563\gamma_{32} - 4688000\gamma_{32}\gamma_{43}}{6048 - 32466\gamma_{32}} = 0 \\ \text{para } j = 1 &\Rightarrow \frac{5851 - 31081\gamma_{32} - 532223\gamma_{43} + 2863225\gamma_{32}\gamma_{43}}{30240 - 162330\gamma_{32}} = 0 \\ \text{para } j = 2 &\Rightarrow \frac{43738 - 235443\gamma_{32} + 1064446\gamma_{43} - 5726450\gamma_{32}\gamma_{43}}{-120960 + 649320\gamma_{32}} = 0 \\ \text{para } j = 3 &\Rightarrow \frac{27413 - 147482\gamma_{32} + 532223\gamma_{43} - 1266556\gamma_{32}\gamma_{43} - 8589675\gamma_{32}^2\gamma_{43}}{2520(-144 + 773\gamma_{32})} = 0 \\ \text{para } j = 4 &\Rightarrow \frac{-6737\gamma_{32}(-79 + 425\gamma_{32})\gamma_{43}}{1680(-144 + 773\gamma_{32})} = 0\end{aligned}$$

Temos que encontrar solução para o sistema formado pelas seis equações acima apresentadas. Sendo assim, vemos que a equação para $j = 4$ é satisfeita para $\gamma_{32} = 0$, para $\gamma_{32} = 79/425$, ou para $\gamma_{43} = 0$. Fazendo a análise para os três casos, fixando um deles, chegamos que o sistema não-linear não possui solução. Portanto, não existem métodos estendidos não-dissipativos de ordem 7.

2.8 Experimentos Numéricos

Implementamos os métodos descritos anteriormente e testamos em alguns problemas encontrados na literatura. Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos obtidos em três desses problemas, para os quais a solução exata não é conhecida, mas apenas o seu comportamento. Desta forma, para analisar os resultados consideramos como solução "exata", o resultado fornecido por um método de ordem alta com um passo h bem pequeno. Nos referenciamos a cada método estendido de passo um não-dissipativo de ordem k por MEND k , $k = 2, 3, 4, 5$.

1) Pêndulo Simples

Qualquer objeto pendurado em movimento pendular é chamado de pêndulo físico. O pêndulo simples é um caso especial de pêndulo físico e consiste em uma haste com uma massa atada em uma das extremidades. Para descrever o movimento de um pêndulo simples, desprezaremos qualquer força exterior de amortecimento agindo sobre o sistema (tal como a resistência do ar).

Uma massa m de peso W está suspensa por uma haste de comprimento l . Queremos determinar o ângulo θ , medido a partir da linha vertical, como uma função do tempo t (consideramos $\theta > 0$ à direita de OP, e $\theta < 0$ à esquerda de OP). Lembremos que um arco s de um círculo de raio l está relacionado com o ângulo central θ através da fórmula $s = l\theta$. Logo, a aceleração angular é

$$a = \frac{d^2 s}{dt^2} = l \frac{d^2 \theta}{dt^2}.$$

Pela segunda lei de Newton, temos:

$$F = ma = ml \frac{d^2 \theta}{dt^2}.$$



Na figura I, vemos que a componente tangencial da força devida ao peso W é $mg \sin \theta$. Igualando as duas diferentes formulações da força tangencial, obtemos:

$$ml \frac{d^2\theta}{dt^2} = -mg \quad \text{ou} \quad \frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0. \quad (2.7)$$

Pelo fato da presença do $\sin \theta$, a equação diferencial (2.7) é não-linear.

Seja a equação diferencial do pêndulo simples (2.7). Quando fazemos $x = \theta$ e $y = \theta'$, essa equação diferencial de segunda ordem pode ser escrita como o sistema autônomo plano

$$\begin{aligned} x' &= y \\ y' &= -\frac{g}{l} \sin x. \end{aligned}$$

Tomemos $g = 10$ e $l = 10$, e as condições iniciais: $x(0) = 0.52$, $x'(0) = 0.0$ com t no intervalo $[0, 50]$. Consideramos a solução "exata", dada pelo MEND5 com passo 0.0125. Mostramos o erro absoluto calculado em x no ponto $t = 50$ na TAB I.

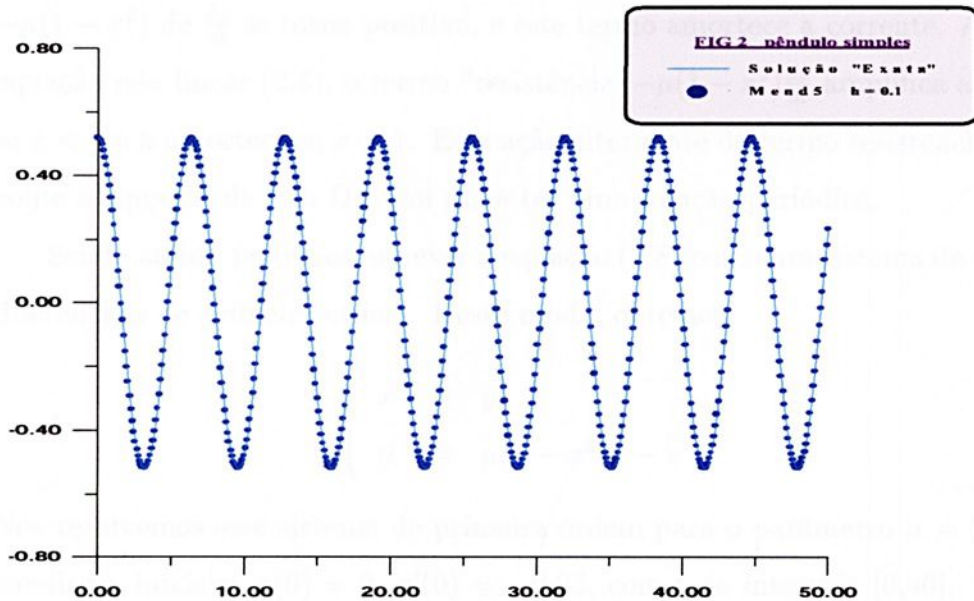
TAB. I - Erros Absolutos no cálculo de x para $t=50$				
h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	1.9(-2)	2.6(-6)	7.9(-7)	9.9(-8)
0.05	4.6(-3)	2.8(-7)	5.2(-8)	3.7(-9)
0.025	1.2(-3)	3.3(-8)	3.4(-9)	2.1(-10)

Podemos notar, pelos resultados dados na TAB.I que os métodos fornecem precisão de acordo com a sua ordem algébrica.

Ilustramos na FIG 2 o gráfico de x versus t obtido pelo MEND5 com $h=0.1$, juntamente com a solução "exata". Vemos que, apesar de tomarmos o passo



$h=0.1$, considerado não tão pequeno, a aproximação dada pelo método acompanha a solução exata, o que, confirma a estabilidade não-dissipativa dos métodos.



2) Equação de Van Der Pol

Essa equação descreve o fluxo de corrente x num oscilador tríodo,

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} + x = 0 \quad (2.8)$$

onde μ é uma constante positiva. Experimentalmente, observa-se que o fluxo de corrente é periódico. Este fluxo periódico só pode ser explicado considerando-se a equação não-linear. Se considerarmos a forma linearizada da Eq. (2.8), obtida desprezando-se o termo $x^2 \frac{dx}{dt}$, temos

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu \frac{dx}{dt} + x = 0 \quad (2.9)$$

Devido ao termo $-\mu \frac{dx}{dt}$, a Eq. (2.9) não tem soluções periódicas. De fato, posto que $\mu > 0$, todas as soluções da Eq. (2.9) crescem com t crescente. Entretanto,

para a equação não-linear (2.8), se x se torna maior que um, então o coeficiente $-\mu(1 - x^2)$ de $\frac{dx}{dt}$ se torna positivo, e este termo amortece a corrente. Assim, na equação não linear (2.8), o termo "resistência" $-\mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt}$ amplifica a corrente se $x < 1$ e a amortece se $x > 1$. Esta ação alternante do termo resistência explica como a equação de Van Der Pol pode ter uma solução periódica.

Sendo assim, podemos escrever a equação (2.8) como um sistema de equações diferenciais de primeira ordem. Desse modo, obtemos:

$$\begin{cases} x' = y \\ y' = \mu(1 - x^2)y - x \end{cases} \quad (2.10)$$

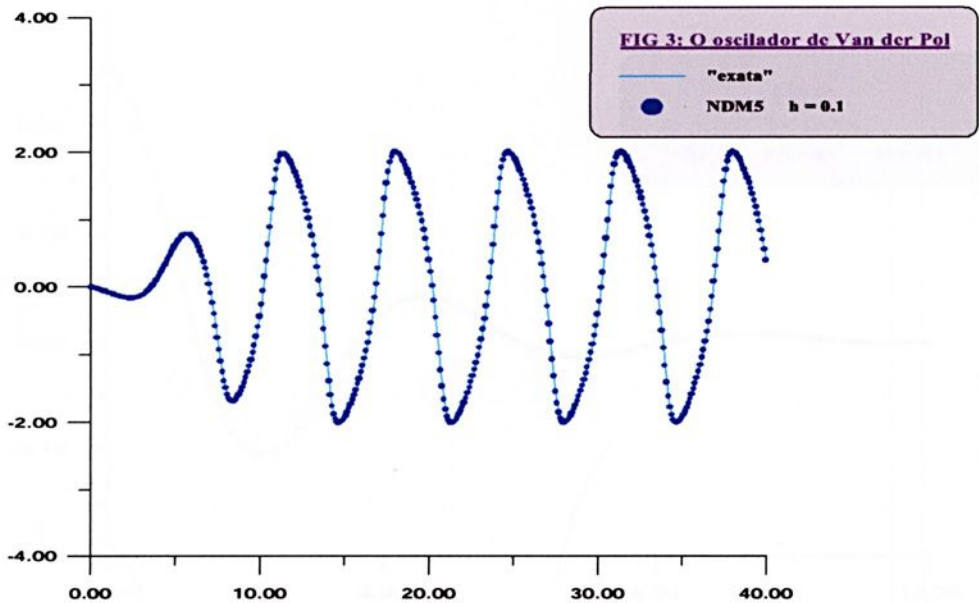
Nós resolvemos esse sistema de primeira ordem para o parâmetro $\mu = 1$ usando condições iniciais: $x(0) = 0$, $x'(0) = -0.05$, com t no intervalo $[0, 40]$. Consideramos também a solução "exata", dada pelo MEND5 com passo 0.0125. Veja na TAB II o erro absoluto calculado em x no ponto $t = 40$.

TAB. II - Erros Absolutos no cálculo de x para $t=40$				
h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	7.3(-2)	9.3(-4)	2.3(-4)	4.4(-4)
0.05	1.9(-2)	4.6(-5)	4.7(-7)	3.2(-6)
0.025	4.7(-3)	1.9(-6)	1.7(-7)	2.0(-8)

É interessante notar que as soluções usando MEND4 para $h=0.1$ e $h=0.05$ possuem melhor precisão mas, quando diminuimos o tamanho do passo é o MEND5 que fornece resultados mais precisos.



Na FIG 3, ilustramos os resultados no gráfico de x versus t obtido pela MEND5 com $h=0.1$, juntamente com a solução "exata".



3) Um outro problema oscilatório não linear como ilustração é dado pela equação:

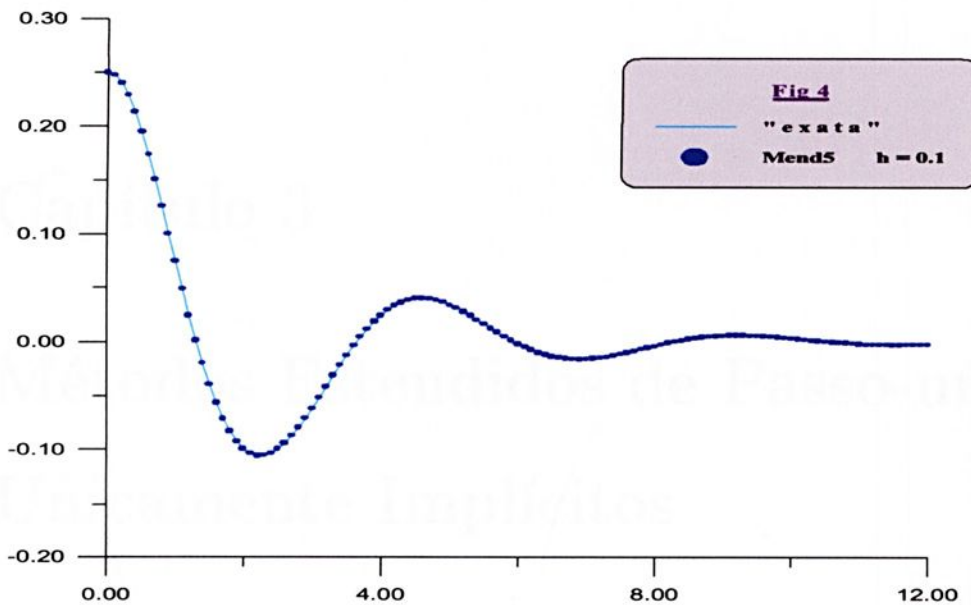
$$x'' + 0.8x' + 2x = x'x$$

Seja as condições iniciais: $x(0) = 0.25$, $x'(0) = 0.0$ com t no intervalo $[0, 12]$. Consideramos a solução "exata", dada pelo MEND5 com passo 0.0125. A TAB III mostra o erro absoluto calculado em x no ponto $t = 12$.

TAB. III - Erros Absolutos no cálculo de x para $t=12$				
h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	5.9(-5)	5.2(-9)	6.8(-9)	4.8(-10)
0.05	5.3(-4)	7.5(-10)	4.4(-10)	5.7(-12)
0.025	3.7(-6)	1.8(-10)	3.8(-11)	5.0(-14)



Na FIG 4, o gráfico de x versus t obtido pela MEND5 com $h = 0.1$, juntamente com a solução "exata".



Vemos que o MEND5 resolve com mais precisão essa classe de problemas e, a solução aproximada realmente acompanha a solução exata.

Capítulo 3

Métodos Estendidos de Passo-um Unicamente Implícitos

3.1 Introdução

Nesse capítulo analisamos uma nova classe de métodos estendidos de passo-um, unicamente implícitos, proposta por Chawla e outros [5], para a integração numérica de problemas de valor inicial (PVI) de segunda ordem, com soluções oscilatórias da forma:

$$y'' = f(t, y), \quad y(t_0) = \eta_0, \quad y'(t_0) = \eta_1. \quad (3.1)$$

Consideramos a mesma malha de pontos como no capítulo 1, $t_n = t_0 + nh$, $n = 0, 1, 2, \dots$, onde h é o comprimento do passo, $y_n \approx y(t_n)$, $f_n = f(t_n, y_n)$.

Um método de passo-um para a resolução de (3.1) é denominado unicamente implícito se para problemas não-lineares somente o cálculo do deslocamento, y_{n+1} , é implícito (I), enquanto o cálculo da velocidade, y'_{n+1} , é explícito (E).

Como exemplo, citamos o conhecido método devido a Newmark (ver em [9])



$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad y_{n+1} &= y_n + hy'_n + \frac{h^2}{4}(f_n + f_{n+1}) \\ \text{(E)} \quad y'_{n+1} &= y'_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

o qual é de segunda ordem e P-estável, uma propriedade de estabilidade para os métodos aplicados a problemas com soluções oscilatórias do tipo (3.1).

Nas seções seguintes, apresentamos a forma geral dos métodos estendidos de passo-um unicamente implícitos e uma análise de suas propriedades de estabilidade.

3.2 Métodos de Passo-um Unicamente Implícitos

Para a integração de problemas de valor inicial da forma (3.1), consideramos o seguinte par de discretizações:

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + h^2 \left[b_0 f_n + b_1 f_{n+1} + \sum_{j=2}^{m-1} b_j f_{n+j} \right] + t_n(h) \quad (3.3)$$

$$y'_{n+1} = y'_n + h \left[c_0 f_n + c_1 f_{n+1} + \sum_{j=2}^{m-1} c_j f_{n+j} \right] + t'_n(h) \quad (3.4)$$

Para tornar os métodos em (3.3) e (3.4) de passo-um, nós introduzimos para $j = 2, \dots, m-1$, as aproximações adicionais:

$$y_{n+j} = \alpha_{j0} y_n + \alpha_{j1} y_{n+1} + \beta_{j0} h y'_n + h^2 \left[\gamma_{j0} f_n + \gamma_{j1} f_{n+1} + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk} f_{n+k} \right] + \tau_{n,j}(h). \quad (3.5)$$

Agora, nós apresentamos a classe de métodos estendidos de passo-um para a integração direta de (3.1), baseada nas aproximações de (3.3) a (3.5). Um método de ordem m é definido da seguinte maneira:



$$(I) \quad \begin{cases} \tilde{y}_{n+j} = \alpha_{j0}y_n + \alpha_{j1}y_{n+1} + \beta_{j0} h y'_n \\ \quad + h^2 \left[\gamma_{j0}f_n + \gamma_{j1}f_{n+1} + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk}\tilde{f}_{n+k} \right], \\ \tilde{f}_{n+j} = f(t_{n+j}, \tilde{y}_{n+j}), \quad \text{para } j = 2, \dots, m-1 \\ y_{n+1} = y_n + hy'_n + h^2 \left[b_0f_n + b_1f_{n+1} + \sum_{j=2}^{m-1} b_j\tilde{f}_{n+j} \right], \end{cases} \quad (3.6)$$

$$(E) \quad y'_{n+1} = y'_n + h \left[c_0f_n + c_1f_{n+1} + \sum_{j=2}^{m-1} c_j\tilde{f}_{n+j} \right],$$

onde o erro de truncamento local para y_{n+1} e y'_{n+1} é $O(h^{m+1})$.

Definimos estágio do método (3.6) à quantidade em y_{n+1} de $\tilde{f}_{n+j}$, se $b_1 = 0$ ou, a quantidade em y_{n+1} de $\tilde{f}_{n+j}$ mais 1, se $b_1 \neq 0$. Podemos notar que um método unicamente implícito (3.6) de ordem m é, em geral, um método com $(m-1)$ estágios.

3.2.1 Estabilidade dos Métodos Estendidos de Passo-um

Para obter a propriedade de P-estabilidade de um método estendido de passo um definido por (3.6), o aplicamos à equação teste:

$$y'' = -\omega^2 y, \quad \omega \in \mathbb{R}. \quad (3.7)$$

Multiplicando a equação (E) que define y'_{n+1} , em (3.6), por h e denotando ωh por H , temos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{y}_{n+j} = \alpha_{j0}y_n + \alpha_{j1}y_{n+1} + \beta_{j0} h y'_n \\ \quad - H^2 \left[\gamma_{j0}y_n + \gamma_{j1}y_{n+1} + \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk}\tilde{y}_{n+k} \right], \\ \tilde{f}_{n+j} = f(t_{n+j}, \tilde{y}_{n+j}) = -\omega^2 \tilde{y}_{n+j}, \text{ para } j = 2, \dots, m-1 \\ y_{n+1} = y_n + h y'_n - H^2 \left[b_0y_n + b_1y_{n+1} + \sum_{j=2}^{m-1} b_j \tilde{y}_{n+j} \right], \end{array} \right. \quad (3.8)$$

$$h y'_{n+1} = h y'_n - H^2 \left[c_0y_n + c_1y_{n+1} + \sum_{j=2}^{m-1} c_j \tilde{y}_{n+j} \right].$$

Colocando em evidência termos em comum na expressão de $\tilde{y}_{n+j}$, obtemos:

$$\tilde{y}_{n+j} + H^2 \sum_{k=2}^{j-1} \gamma_{jk} \tilde{y}_{n+k} = (\alpha_{j0} - H^2 \gamma_{j0})y_n + (\alpha_{j1} - H^2 \gamma_{j1})y_{n+1} + \beta_{j0} h y'_n.$$

Escrevendo essa expressão para $j = 2, \dots, m-1$, temos:

$$\begin{aligned} \tilde{y}_{n+2} + 0 &= (\alpha_{20} - H^2 \gamma_{20})y_n + (\alpha_{21} - H^2 \gamma_{21})y_{n+1} + \beta_{20} h y'_n \\ \tilde{y}_{n+3} + H^2 \gamma_{32} \tilde{y}_{n+2} &= (\alpha_{30} - H^2 \gamma_{30})y_n + (\alpha_{31} - H^2 \gamma_{31})y_{n+1} + \beta_{30} h y'_n \\ \tilde{y}_{n+4} + H^2 (\gamma_{42} \tilde{y}_{n+2} + \gamma_{43} \tilde{y}_{n+3}) &= (\alpha_{40} - H^2 \gamma_{40})y_n + (\alpha_{41} - H^2 \gamma_{41})y_{n+1} + \beta_{40} h y'_n \\ &\vdots \\ \tilde{y}_{n+m-1} + H^2 (\gamma_{m-1,2} \tilde{y}_{n+2} \\ &\quad + \dots + \gamma_{m-1,m-2} \tilde{y}_{n+m-2}) = (\alpha_{m-1,0} - H^2 \gamma_{m-1,0})y_n \\ &\quad + (\alpha_{m-1,1} - H^2 \gamma_{m-1,1})y_{n+1} + \beta_{m-1,0} h y'_n \end{aligned} \quad (3.9)$$

Para escrevermos (3.9) na forma matricial, adotaremos a mesma forma utilizada no capítulo 1.2, introduzindo a notação a seguir.



Consideramos os vetores do $\mathbb{R}^{m-2}$ dados por:

$$\begin{aligned}\underline{\beta}_i &= (\beta_{2,i}, \beta_{3,i}, \dots, \beta_{m-1,i})^t, & \underline{\gamma}_i &= (\gamma_{2,i}, \gamma_{3,i}, \dots, \gamma_{m-1,i})^t, \\ \underline{\alpha}_i &= (\alpha_{2,i}, \alpha_{3,i}, \dots, \alpha_{m-1,i})^t, & \underline{\hat{y}}_n &= (\hat{y}_{n+2}, \hat{y}_{n+3}, \dots, \hat{y}_{n+m-1})^t,\end{aligned}$$

para $i = 0, 1$, e denotamos por $\Gamma \in \mathbb{R}^{m-2} \times \mathbb{R}^{m-2}$ a matriz estritamente triangular inferior:

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \gamma_{3,2} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \gamma_{4,2} & \gamma_{4,3} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{m-1,2} & \gamma_{m-1,3} & \dots & \gamma_{m-1,m-2} & 0 \end{bmatrix}$$

Então, o conjunto de equações (3.9), na forma matricial, é dado por:

$$(I + H^2\Gamma)\underline{\hat{y}}_n = (\underline{\alpha}_0 - H^2\underline{\gamma}_0)y_n + (\underline{\alpha}_1 - H^2\underline{\gamma}_1)y_{n+1} + \underline{\beta}_0 h y'_n, \quad (3.10)$$

onde I denota a matriz identidade.

Seja também $\underline{b} = (b_2, b_3, \dots, b_{m-1})^t$ e $\underline{c} = (c_2, c_3, \dots, c_{m-1})^t$ vetores do $\mathbb{R}^{m-2}$. Reescrevendo as equações para y_{n+1} e hy'_{n+1} de (3.8), obtemos:

$$y_{n+1} = (1 + i\nu\alpha_0)y_n + i\nu\alpha_1 y_{n+1} + i\nu\underline{\alpha}^T \underline{\hat{y}}_n \quad (3.11)$$

$$hy'_{n+1} = hy'_n - H^2 \left[c_0 y_n + c_1 y_{n+1} + \underline{c}^T \underline{\hat{y}}_n \right].$$

Claramente vemos que existe a inversa da matriz $(I + H^2\Gamma)$, em (3.10), pois seu determinante é igual a 1. Denotando por $M = (I + H^2\Gamma)^{-1}$, podemos explicitar

$\hat{y}_n$ em (3.10), ou seja,

$$\hat{y}_n = M(\underline{\alpha}_0 - H^2 \underline{\gamma}_0) y_n + M(\underline{\alpha}_1 - H^2 \underline{\gamma}_1) y_{n+1} + M \underline{\beta}_0 h y'_n, \quad (3.12)$$

Substituindo agora (3.12) em (3.11), e colocando em evidência os termos em comum, obtemos:

$$\begin{aligned} [1 + H^2 \{b_1 + \underline{b}^t M(\underline{\alpha}_1 - H^2 \underline{\gamma}_1)\}] y_{n+1} &= [1 + H^2 \{b_0 + \underline{b}^t M(\underline{\alpha}_0 - H^2 \underline{\gamma}_0)\}] y_n \\ &\quad + (1 - H \underline{b}^t M \underline{\beta}_0) h y'_n \\ h y'_{n+1} + H^2 \{\underline{c}^t M(\underline{\alpha}_1 - H^2 \underline{\gamma}_1) + c_1\} y_{n+1} &= -H^2 \{c_0 + \underline{c}^t M(\underline{\alpha}_0 - H^2 \underline{\gamma}_0)\} y_n \\ &\quad + (1 - H^2 \underline{c}^t M \underline{\beta}_0) h y'_n. \end{aligned}$$

Escrevendo estas duas equações na forma matricial, temos:

$$\begin{aligned} &\overbrace{\begin{bmatrix} 1 + H^2 \{b_1 + \underline{b}^t M(\underline{\alpha}_1 - H^2 \underline{\gamma}_1)\} & 0 \\ H^2 \{\underline{c}^t M(\underline{\alpha}_1 - H^2 \underline{\gamma}_1) + c_1\} & 1 \end{bmatrix}}^{A(H)} \begin{bmatrix} y_{n+1} \\ h y'_{n+1} \end{bmatrix} \\ &= \underbrace{\begin{bmatrix} 1 - H^2 \{b_0 + \underline{b}^t M(\underline{\alpha}_0 - H^2 \underline{\gamma}_0)\} & (1 - H^2 \underline{b}^t M \underline{\beta}_0) \\ -H^2 \{\underline{c}^t M(\underline{\alpha}_0 - H^2 \underline{\gamma}_0) + c_0\} & (1 - H^2 \underline{b}^t M \underline{\beta}_0) \end{bmatrix}}_{B(H)} \begin{bmatrix} y_n \\ h y'_n \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Agora, supomos que $\text{Det}(A(H)) \neq 0$, ou seja, que $1 + H^2 \{b_1 + \underline{b}^t M(\underline{\alpha}_1 - H^2 \underline{\gamma}_1)\} \neq 0$, definimos:

$$R(H) = (A(H))^{-1} B(H). \quad (3.14)$$

a qual é denominada matriz de amplificação do método.

Fornecemos, a seguir a definição de P-estabilidade, segundo Meyer [14].

Definição 3.1. Um método de passo-um é chamado P-estável se para todo $H > 0$ real, os dois autovalores (conjugados complexos) de $R(H)$ estão no círculo unitário no plano complexo.



Considerando, então, a propriedade da P-estabilidade, primeiramente, temos que encontrar os autovalores da matriz ³

$$R = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{bmatrix}. \quad (3.15)$$

Sabemos que os autovalores da matriz R são os valores de λ que satisfazem $\text{Det}(R - \lambda I) = 0$. Mas,

$$\text{Det}(R - \lambda I) = 0 \implies \lambda^2 - \text{Tr}(R)\lambda + \text{Det}(R) = 0.$$

Temos então que os autovalores da matriz R são:

$$\lambda = \frac{\text{Tr}(R) \pm \sqrt{(\text{Tr}(R))^2 - 4 \text{Det}(R)}}{2}.$$

Como queremos que os λ'_s sejam complexos conjugados, seja então:

$$\lambda = a \pm bi, \quad (3.16)$$

onde $a = \frac{\text{Tr}(R)}{2}$ e $b = \frac{\sqrt{4 \text{Det}(R) - (\text{Tr}(R))^2}}{2}$ e consideramos

$$4 \text{Det}(R) - (\text{Tr}(R))^2 > 0. \quad (3.17)$$

Para cumprirmos todas as exigências da propriedade de P estabilidade, buscaremos uma condição para que $|\lambda| = 1$, ou seja: ⁴

$$\begin{aligned} |\lambda| &= \left| \frac{\text{Tr}(R) \pm i\sqrt{4 \text{Det}(R) - (\text{Tr}(R))^2}}{2} \right| = 1 \\ \implies \left(\left(\frac{\text{Tr}(R)}{2} \right)^2 + \left(\frac{\sqrt{4 \text{Det}(R) - (\text{Tr}(R))^2}}{2} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} &= 1 \\ \implies \left(\frac{(\text{Tr}(R))^2 + 4 \text{Det}(R) - (\text{Tr}(R))^2}{4} \right)^{\frac{1}{2}} &= 1 \implies (\text{Det}(R))^{\frac{1}{2}} = 1 \end{aligned}$$

³para simplificar a notação consideremos $R(H) = R$, $\text{Det}(R)$ e $\text{Tr}(R)$ o determinante e o traço, respectivamente, da matriz R .

⁴ $|\cdot|$ denota o módulo de um n^{a} complexo ou real



$$\implies \text{Det}(R) = 1. \quad (3.18)$$

Usando a condição (3.18) em (3.17), obtemos:

$$(\text{Tr}(R))^2 < 4 \implies |\text{Tr}(R)| < 2. \quad (3.19)$$

Resumindo, o método de passo um estendido (3.6) é P-estável, se as duas condições são satisfeitas:

$$\text{Det}(R(H)) = 1 \quad \text{e} \quad |\text{Tr}\{R(H)\}| < 2, \quad \forall H > 0 \quad (3.20)$$

Da primeira condição em (3.20), temos:

$$1 = \text{Det}(R) = \text{Det}(A^{-1}B) = \text{Det}(A^{-1})\text{Det}(B). \quad (3.21)$$

Ainda,

$$1 = \text{Det}(I) = \text{Det}(A^{-1}A) = \text{Det}(A^{-1})\text{Det}(A) \implies \text{Det}(A^{-1}) = \frac{1}{\text{Det}(A)}. \quad (3.22)$$

Substituindo (3.22) em (3.21), vemos que a primeira condição em (3.20) é equivalente à:

$$\text{Det}(A(H)) = \text{Det}(B(H)). \quad (3.23)$$

Denotando

$$C = \text{Det}(A)R, \quad (3.24)$$

da segunda condição em (3.20), obtemos:

$$\begin{aligned} |\text{Tr}(R)| < 2 &\implies \left| \text{Tr} \left(\frac{C}{\text{Det}(A)} \right) \right| < 2 \implies \left| \frac{\text{Tr}(C)}{\text{Det}(A)} \right| < 2 \\ &\implies -2 < \frac{\text{Tr}(C)}{\text{Det}(A)} < 2. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Considerando primeiramente o lado esquerdo da desigualdade em (3.25), temos:

$$-2 < \frac{\text{Tr}(C)}{\text{Det}(A)} \implies -2\text{Det}(A) < \text{Tr}(C) \implies 0 < 2\text{Det}(A) + \text{Tr}(C). \quad (3.26)$$

Analisando agora, o lado direito da desigualdade em (3.25), temos:

$$\frac{\text{Tr}(C)}{\text{Det}(A)} < 2 \implies \text{Tr}(C) < 2\text{Det}(A) \implies 0 < 2\text{Det}(A) - \text{Tr}(C). \quad (3.27)$$



Por (3.26) e (3.27), a segunda condição em (3.20) é equivalente à seguinte condição sobre o polinômio de estabilidade:

$$p^{\pm}(H) = 2 \operatorname{Det}(A(H)) \pm \operatorname{Tr}(C(H)) > 0, \quad \forall H > 0. \quad (3.28)$$

3.2.2 Phase-Lag dos Métodos Estendidos de Passo-um

Definição 3.2. *Seja um método de passo-um (3.6) aplicado à equação teste (3.7) e escrito na forma (3.13). Temos que:*

$$\phi(H) = H - \theta = kH^{m+1} + O(H^{m+3}) \quad (3.29)$$

é o erro de dispersão, onde θ é o argumento do autovalor da matriz $R(H)$ e, $\phi_p = |k|H^m$ é definido como o phase-lag do método.

Representamos $\lambda = a \pm bi$ em (3.16) na forma geométrica para encontrarmos seu argumento. Para isso, consideremos:

$$a = r \cos \theta \quad e \quad b = r \sin \theta.$$

Assim, temos que

$$\lambda = a \pm bi = r(\cos \theta \pm \sin \theta) = re^{\pm i\theta},$$

onde $r = |\lambda| = 1$ e θ é o argumento de λ .

Queremos obter θ explicitamente. Desse modo:

$$\cos \theta = \frac{a}{r} = a \implies \theta = \arccos a. \quad (3.30)$$

Substituindo a dado por (3.16) em (3.30) e usando (3.24), temos:

$$\theta = \arccos \frac{\operatorname{Tr}(R)}{2} = \arccos \frac{\operatorname{Tr}(\frac{C}{\operatorname{Det}(A)})}{2} \implies \theta = \arccos \frac{\operatorname{Tr}(C)}{2\operatorname{Det}(A)}.$$

Substituindo θ em (3.29), temos:

$$\phi(H) = H - \arccos \frac{\operatorname{Tr}(C)}{2\operatorname{Det}(A)}. \quad (3.31)$$

3.3 Métodos Estendidos de Passo-um de Ordem 3

Para construirmos um método de passo-um estendido de ordem 3, definido por (3.6), tomaremos em (3.5), $\tau_{n,2}(h) = O(h^3)$. Para isso, precisamos primeiramente expandir em série de Taylor $y(x_n + h)$, $y(x_n + 2h)$, $y''(x_n + h)$, ou seja:

$$\begin{aligned}y(x_n + h) &= y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2 y''(x_n)}{2!} + O(h^3) \\y(x_n + 2h) &= y(x_n) + 2hy'(x_n) + \frac{(2h)^2 y''(x_n)}{2!} + O(h^3) \\y''(x_n + h) &= y''(x_n) + hy'''(x_n) + \frac{h^2 y^{(iv)}(x_n)}{2!} + O(h^3).\end{aligned}$$

Substituindo as expansões obtidas em (3.5), para $m=3$ e $j=2$, temos:

$$\begin{aligned}\tau_{n,2}(h) &= y(x_n + 2h) - \alpha_{20}y(x_n) - \alpha_{21}y(x_n + h) - \beta_{20}hy'(x_n) \\&\quad - h^2 [\gamma_{20}y''(x_n) + \gamma_{21}y''(x_n + h)] \\&= y(x_n) + 2hy'(x_n) + \frac{(2h)^2 y''(x_n)}{2!} + O(h^3) \\&\quad - \alpha_{20}y(x_n) - \alpha_{21} \left(y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2 y''(x_n)}{2!} + O(h^3) \right) - \beta_{20}hy'(x_n) \\&\quad - h^2 \left[\gamma_{20}y''(x_n) + \gamma_{21} \left(y''(x_n) + hy'''(x_n) + \frac{h^2 y^{(iv)}(x_n)}{2!} + O(h^3) \right) \right] \\&= (1 - \alpha_{20} - \alpha_{21})y(x_n) + (2h - \alpha_{21}h - \beta_{20}h)y'(x_n) \\&\quad + \left(\frac{(2h)^2}{2!} - \frac{\alpha_{21}h^2}{2!} - h^2\gamma_{20} - h^2\gamma_{21} \right) y''(x_n) + O(h^3) \\&= (1 - \alpha_{20} - \alpha_{21})y(x_n) + (2 - \alpha_{21} - \beta_{20})hy'(x_n) \\&\quad + \left(\frac{4}{2!} - \frac{\alpha_{21}}{2!} - \gamma_{20} - \gamma_{21} \right) h^2 y''(x_n) + O(h^3).\end{aligned}$$

Como queremos $\tau_{n,2}(h) = O(h^3)$, então:

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 - \alpha_{20} - \alpha_{21} = 0 \\ 2 - \alpha_{21} - \beta_{20} = 0 \\ \frac{4}{2!} - \frac{\alpha_{21}}{2!} - \gamma_{20} - \gamma_{21} = 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \alpha_{21} = 1 - \alpha_{20} \\ \beta_{20} = 1 + \alpha_{20} \\ \gamma_{21} = \frac{3}{2} + \frac{\alpha_{20}}{2} - \gamma_{20}, \end{array} \right. \quad (3.32)$$

onde α_{20} e γ_{20} são parâmetros livres.

De forma análoga, para $t_n(h)$, $t'_n(h) = O(h^4)$, obtemos:

$$b_1 = \frac{5}{6} - 2b_0, \quad b_2 = -\frac{1}{3} + b_0, \quad (3.33)$$

e

$$c_0 = \frac{5}{12}, \quad c_1 = \frac{2}{3}, \quad c_2 = -\frac{1}{12}, \quad (3.34)$$

onde b_0 é um parâmetro livre. Assim, existe uma família a três parâmetros, de métodos estendidos de passo-um de 3ª ordem e 2 estágios a qual denotamos por $M_3^{[2]}(\alpha_{20}, \gamma_{20}, b_0)$.

Para fazermos o estudo da estabilidade dos métodos de 3ª ordem, $M_3^{[2]}(\alpha_{20}, \gamma_{20}, b_0)$, consideremos as matrizes $A(H)$ e $B(H)$ para $m=3$ em (3.13). Desse modo, temos:

$$A(H) = \begin{bmatrix} 1 + (b_1 + b_2\alpha_{21})H^2 - b_2\gamma_{21}H^4 & 0 \\ (c_1 + c_2\alpha_{21})H^2 - c_2\gamma_{21}H^4 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

e

$$B(H) = \begin{bmatrix} 1 - (b_0 + b_2\alpha_{20})H^2 + b_2\gamma_{20}H^4 & 1 - b_2\beta_{20}H^2 \\ -(c_0 + c_2\alpha_{20})H^2 + c_2\gamma_{20}H^4 & 1 - c_2\beta_{20}H^2 \end{bmatrix}. \quad (3.36)$$

Para que esse método seja P-estável precisamos encontrar condições para que $\text{Det}(A(H))$ seja igual a $\text{Det}(B(H))$. Sendo assim, substituindo os coeficientes (3.32), (3.33) e (3.34), nas matrizes (3.35) e (3.36) e com ajuda do software Mathematica ⁵, obtemos que:

$$\gamma_{20} = \frac{13}{3} + \frac{\alpha_{20}}{3} - 12b_0. \quad (3.37)$$

Consideremos, agora,

$$\alpha = \alpha_{20} \left(\frac{1}{3} - b_0 \right). \quad (3.38)$$

⁵os detalhes das contas feitas pelo software estão demonstrados no apêndice 1.



Então, em termos dos parâmetros α e b_0 , temos que:

$$\begin{aligned} \text{Det}(A(H)) &= 1 - \frac{(-3 - 2\alpha_{20} + 6(1 + \alpha_{20})b_0)}{6} H^2 - \frac{(-1 + 3b_0)(3 + \alpha_{20} - 2\gamma_{20})}{6} H^4 \\ &= 1 + \left(\frac{1}{2} + \alpha - b_0\right) H^2 + \left(-\frac{17}{18} + \frac{\alpha}{6} + \frac{41b_0}{6} - 12b_0^2\right) H^4. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Novamente, com a ajuda do software Mathematica, e utilizando (3.37) e (3.38), obtemos que: ⁶

$$\begin{aligned} \text{Tr}(C(H)) &= 2 + \left(\frac{2\alpha_{20}}{3} - 2b_0 - 2\alpha_{20}b_0\right) H^2 + \left(\frac{2}{9} - \frac{\alpha_{20}}{36} - \frac{7\gamma_{20}}{12} + b_0(-1 + 2\gamma_{20})\right) H^4 \\ &= 2 + 2(\alpha - b_0)H^2 + \left(-\frac{83}{36} - \frac{2\alpha}{3} + \frac{44b_0}{3} - 24b_0^2\right) H^4. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Substituindo (3.39) e (3.40) em (3.28), obtemos os polinômios de estabilidade: ⁷

$$\begin{aligned} p^-(H) &= H^2 + \frac{28 - 72b_0 - \alpha_{20}(-13 + 36b_0) - 3\gamma_{20}}{36} H^4, \\ &= H^2 + \left(\frac{5}{12} + \alpha_{20}\left(\frac{1}{3} - b_0\right) - b_0\right) H^4, \\ &= H^2 + \left(\frac{5}{12} + \alpha - b_0\right) H^4, \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned} p^+(H) &= 4 + \left[1 + \alpha_{20}\left(\frac{4}{3} - 4b_0\right) - 4b_0\right] H^2 \\ &\quad + \left[\frac{11}{9} + \alpha_{20}\left(\frac{11}{36} - b_0\right) + 4b_0(-1 + \gamma_{20}) - \frac{5\gamma_{20}}{4}\right] H^4 \\ &= 4 + \left[1 + \alpha_{20}\left(\frac{4}{3} - 4b_0\right) - 4b_0\right] H^2 \\ &\quad + \frac{1}{36} [-151 + 1020b_0 - 1728b_0^2 + 4a_{20}(-1 + 3b_0)] H^4 \\ &= 4 + (1 + 4\alpha - 4b_0)H^2 + \left(-\frac{151}{36} - \frac{\alpha}{3} + \frac{85b_0}{3} - 48b_0^2\right) H^4. \end{aligned} \quad (3.42)$$

⁶os detalhes das contas feitas pelo software estão demonstrados no apêndice 2.

⁷ver detalhes no apêndice 3.



Por (3.28), as condições necessárias para P-estabilidade são $p^\pm(H) > 0$, $\forall H > 0$. Sendo assim, segue de (3.41) que:

$$\frac{5}{12} + \alpha - b_0 \geq 0 \implies b_0 \leq \frac{5}{12} + \alpha, \quad (3.43)$$

e de (3.42) que:

$$-\frac{151}{36} - \frac{\alpha}{3} + \frac{85b_0}{3} - 48b_0^2 > 0 \implies \alpha < -\frac{151}{12} + 85b_0 - 144b_0^2. \quad (3.44)$$

Consideremos, na equação (3.42),

$$p_2^+ = 1 + 4\alpha - 4b_0 \quad (3.45)$$

e, com a ajuda de (3.44), temos:

$$\begin{aligned} p_2^+ = 1 + 4\alpha - 4b_0 &< 1 + 4 \left(-\frac{151}{12} + 85b_0 - 144b_0^2 \right) - 4b_0 \\ &= -\frac{148}{3} + 336b_0 - 576b_0^2 = -576 \left(b_0^2 - \frac{336}{576}b_0 + \frac{148}{1728} \right) \\ &= -576 \left[\left(b_0 - \frac{7}{24} \right)^2 + \frac{1}{1728} \right] \end{aligned} \quad (3.46)$$

Por outro lado, usando (3.43)

$$p_2^+ = 1 + 4\alpha - 4b_0 \geq 1 + 4\alpha - 4 \left(\frac{5}{12} + \alpha \right) = 1 - \frac{20}{12} = -\frac{2}{3}. \quad (3.47)$$

Por (3.46) e (3.47), nós obtemos:

$$-\frac{2}{3} \leq p_2^+ < -576 \left[\left(b_0 - \frac{7}{24} \right)^2 + \frac{1}{1728} \right], \quad (3.48)$$

o qual mostra que, $p_2^+(H)$, o coeficiente de H^2 em $p^+(H)$, é negativo. Se $p_2^+(H)$ fosse positivo, poderíamos afirmar que $p^+(H)$ seria positivo, pois consideramos em (3.44) que o coeficiente de H^4 é positivo. Como isso não ocorreu, faremos o

estudo de $p^+(H)$ calculando o discriminante⁸ da sua forma quadrática:

$$\begin{aligned} D &= (1 + 4\alpha - 4b_0)^2 - 4 \left(-\frac{151}{36} - \frac{\alpha}{3} + \frac{85b_0}{3} - 48b_0^2 \right) 4 \\ &= \underbrace{(p_2^+)^2 + \frac{16\alpha}{3} - \frac{16b_0}{3} + \frac{16}{9}}_{\left(p_2^+ + \frac{2}{3}\right)^2} + \underbrace{\frac{2352}{36} - \frac{1344}{3}b_0 + 768b_0^2}_{768\left(b_0 - \frac{7}{24}\right)^2} \end{aligned} \quad (3.49)$$

Como D não pode ser negativo, tomamos $D=0$, o que por (3.49), implica em $p_2^+ = -2/3$ e $b_0 = 7/24$. Com esses valores, obtemos, de (3.45) que $\alpha = -1/8$ e, portanto, voltando às equações (3.41) e (3.42), obtemos:

$$p^-(H) = H^2, \quad p^+(H) = 4 - \frac{2H^2}{3} + \frac{H^4}{36} = 4 \left(1 - \frac{H^2}{12} \right)^2.$$

Segue que $p^-(H) > 0, \forall H > 0$ e, $p^+(H) > 0$ exceto para $H^2 = 12$.

Substituindo $\alpha = -1/8$ e $b_0 = 7/24$ em (3.38), temos que $\alpha_{20} = -3$. Voltando esses valores em (3.37) encontramos $\gamma_{20} = -1/6$. Com esse resultado obtemos um único método de passo-um estendido de 3ª ordem, com 2 estágios "quase"⁹ P-estável, $M_3^{[2]}(-3, -1/6, 7/24)$, descrito como:

$$(I) \quad \begin{cases} \tilde{y}_{n+2} = -3y_n + 4y_{n+1} - 2h y'_n + \frac{h^2}{6} [-f_n + f_{n+1}] \\ y_{n+1} = y_n + h y'_n + \frac{h^2}{24} [7f_n + 6f_{n+1} - \tilde{f}_{n+2}] \end{cases} \quad (3.50)$$

$$(E) \quad y'_{n+1} = y'_n + \frac{h}{12} [5f_n + 8f_{n+1} - \tilde{f}_{n+2}].$$

Agora, substituindo (3.39) e (3.40) em (3.31) e, usando o software Mathematica, temos que o erro de dispersão do método obtido é dado por:¹⁰

$$\phi(H) = H - \arccos \frac{144 - 60H^2 + H^4}{144 + 12H^2 + H^4} \quad (3.51)$$

Expandindo $\phi(H)$ em série de Taylor, obtemos o seu *phase-lag*, dado por $\phi_p(H) = (1/720)H^4$.

⁸o discriminante D é o Δ usado na fórmula de Bhaskara

⁹ "quase", porque para $H^2 = 12$ o método não é P-estável.

¹⁰ ver detalhes no apêndice 4.



3.4 Métodos Estendidos de Passo-um de Ordem 4

Da mesma forma como para os métodos de ordem 3, vamos aqui buscar condições para que $\tau_{n,2}(h)$ e $\tau_{n,3}(h)$ sejam de ordem 4. Desse modo, temos:

$$\alpha_{21} = 1 - \alpha_{20}, \quad \beta_{20} = 1 + \alpha_{20}, \quad \gamma_{20} = \frac{1}{3} + \frac{\alpha_{20}}{3}, \quad \gamma_{21} = \frac{7}{6} + \frac{\alpha_{20}}{6}, \quad (3.52)$$

e

$$\alpha_{31} = 1 - \alpha_{30}, \quad \beta_{30} = 2 + \alpha_{30}, \quad \gamma_{31} = \frac{11}{3} + \frac{5}{6}\alpha_{30} - 2\gamma_{30}, \quad \gamma_{32} = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\alpha_{30} + \gamma_{30}, \quad (3.53)$$

onde α_{20} , α_{30} , e γ_{30} são parâmetros livres.

Agora, tomando $t_n(h)$, $t'_n(h) = O(h^5)$, obtemos:

$$b_1 = \frac{9}{8} - 3b_0, \quad b_2 = -\frac{11}{12} + 3b_0, \quad b_3 = \frac{7}{24} - b_0, \quad (3.54)$$

e

$$c_0 = \frac{3}{8}, \quad c_1 = \frac{19}{24}, \quad c_2 = -\frac{5}{24}, \quad c_3 = \frac{1}{24}, \quad (3.55)$$

onde b_0 é um parâmetro livre. Assim, existe uma família de métodos de 4ª ordem e 3 estágios com 4 parâmetros livres que denotamos por $M_4^{[3]}(\alpha_{20}, \alpha_{30}, \gamma_{30}, b_0)$.

Para um método de 4ª ordem, tomemos $m = 4$ em (3.13), obtendo assim as matrizes:

$$A(H) = \begin{bmatrix} a_{11}(H) & 0 \\ a_{21}(H) & 1 \end{bmatrix} \quad e \quad B(H) = \begin{bmatrix} b_{11}(H) & b_{12}(H) \\ b_{21}(H) & b_{22}(H) \end{bmatrix},$$

onde

$$a_{11}(H) = 1 + (b_1 + b_2\alpha_{21} + b_3\alpha_{31})H^2 - (b_2\gamma_{21} + b_3\gamma_{31} + b_3\gamma_{32}\alpha_{21})H^4 + b_3\gamma_{32}\gamma_{21}H^6,$$

$$a_{21}(H) = (c_1 + c_2\alpha_{21} + c_3\alpha_{31})H^2 - (c_2\gamma_{21} + c_3\gamma_{31} + c_3\gamma_{32}\alpha_{21})H^4 + c_3\gamma_{32}\gamma_{21}H^6,$$

$$b_{11}(H) = 1 - (b_0 + b_2\alpha_{20} + b_3\alpha_{30})H^2 + (b_2\gamma_{20} + b_3\gamma_{30} + b_3\gamma_{32}\alpha_{20})H^4 - b_3\gamma_{32}\gamma_{20}H^6,$$

$$b_{12}(H) = 1 - (b_2\alpha_{20} + b_3\alpha_{30})H^2 + (b_3\gamma_{32}\beta_{20})H^4,$$

$$b_{21}(H) = -(c_0 + c_2\alpha_{20} + c_3\alpha_{30})H^2 + (c_2\gamma_{20} + c_3\gamma_{30} + c_3\gamma_{32}\alpha_{20})H^4 - c_3\gamma_{32}\gamma_{20}H^6,$$

$$b_{22}(H) = 1 - (c_2\alpha_{20} + c_3\alpha_{30})H^2 + (c_3\gamma_{32}\beta_{20})H^4.$$



Segue que,

$$Det(A(H)) = 1 + (b_1 + b_2\alpha_{21} + b_3\alpha_{31})H^2 - (b_2\gamma_{21} + b_3\gamma_{31} + b_3\gamma_{32}\alpha_{21})H^4 + b_3\gamma_{32}\gamma_{21}H^6. \quad (3.56)$$

Procuraremos, então, condições para que $Det(A(H)) = Det(B(H))$. Utilizando o auxílio do software Mathematica, encontramos que: ¹¹

$$(\beta_{20}\gamma_{30} - \beta_{30}\gamma_{20})(c_2b_3 - c_3b_2) + \gamma_{32}[b_3(\gamma_{20} + \gamma_{21}) + \beta_{20}(b_0c_3 - b_3c_0) - c_3\gamma_{20}] = 0. \quad (3.57)$$

Encontramos, também, que: ⁹

$$Tr(C(H)) = 2 + t_2H^2 + t_4H^4 + t_6H^6, \quad (3.58)$$

onde

$$\begin{aligned} t_2 &= -b_0 + b_1 + b_2(\alpha_{21} - \alpha_{20}) + b_3(\alpha_{31} - \alpha_{30}) - c_1 - c_2(\alpha_{21} + \beta_{20}) - c_3(\alpha_{31} + \beta_{30}), \\ t_4 &= \gamma_{32}[b_3(\alpha_{20} - \alpha_{21}) + c_3(\alpha_{21} + \beta_{20})] + b_3(\gamma_{30} - \gamma_{31} + c_1\beta_{30}) + b_2(\gamma_{20} - \gamma_{21} + c_1\beta_{20}) \\ &\quad + c_2(\gamma_{21} - b_1\beta_{20}) + c_3(\gamma_{31} - b_1\beta_{30}) + (\beta_{20}\alpha_{31} - \beta_{30}\alpha_{21})(b_2c_3 - b_3c_2), \\ t_6 &= \gamma_{32}[b_3(\gamma_{21} - \gamma_{20} - c_1\beta_{20}) + c_3(b_1\beta_{20} + \gamma_{21})] + (\beta_{30}\gamma_{21} - \beta_{20}\gamma_{31})(b_2c_3 - b_3c_2). \end{aligned}$$

Definimos, agora, os polinômios de estabilidade: ⁹

$$p_{\pm}(H) = 2 Det(A(H)) \pm Tr(C(H)) = p_0^{\pm} + p_2^{\pm}H^2 + p_4^{\pm}H^4 + p_6^{\pm}H^6, \quad (3.59)$$

e com a ajuda das equações (3.56) e (3.58), obtemos:

$$\begin{aligned} p_0^- &= 0, \\ p_0^+ &= 4, \\ p_2^- &= 1, \\ p_2^+ &= -b_0 + 3b_1 + b_2(3\alpha_{21} - \alpha_{20}) + b_3(3\alpha_{31} - \alpha_{30}) - c_1 - c_2(\alpha_{21} + \beta_{20}) - c_3(\alpha_{31} + \beta_{30}), \\ p_4^- &= -\gamma_{32}[b_3(\alpha_{20} + \alpha_{21}) + c_3(\alpha_{21} + \beta_{20})] - b_3(\gamma_{30} + \gamma_{31} - c_1\beta_{30}) - b_2(\gamma_{20} + \gamma_{21} + c_1\beta_{20}) \\ &\quad - c_2(\gamma_{21} - b_1\beta_{20}) - c_3(\gamma_{31} - b_1\beta_{30}) - (\beta_{20}\alpha_{31} - \beta_{30}\alpha_{21})(b_2c_3 - b_3c_2), \\ p_4^+ &= \gamma_{32}[b_3(\alpha_{20} - 3\alpha_{21}) + c_3(\alpha_{21} + \beta_{20})] + b_3(\gamma_{30} - 3\gamma_{31} + c_1\beta_{30}) + b_2(\gamma_{20} - 3\gamma_{21} + c_1\beta_{20}) \\ &\quad + c_2(\gamma_{21} - b_1\beta_{20}) + c_3(\gamma_{31} - b_1\beta_{30}) + (\beta_{20}\alpha_{31} - \beta_{30}\alpha_{21})(b_2c_3 - b_3c_2), \\ p_6^- &= \gamma_{32}[b_3(\gamma_{20} + \gamma_{21} + c_1\beta_{20}) + c_3(\gamma_{21} - b_1\beta_{20})] + (\beta_{20}\alpha_{31} - \beta_{30}\alpha_{21})(b_2c_3 - b_3c_2), \\ p_6^+ &= \gamma_{32}[b_3(3\gamma_{21} - \gamma_{20} - c_1\beta_{20}) + c_3(b_1\beta_{20} - \gamma_{21})] + (\beta_{30}\gamma_{21} - \beta_{20}\gamma_{31})(b_2c_3 - b_3c_2). \end{aligned}$$

¹¹ ver detalhes no apêndice 5.



Antes de determinarmos os métodos P-estáveis de 4ª ordem, substituímos (3.52), (3.53), (3.54) e (3.55) na condição (3.57) colocando-a, desse modo, em termos dos parâmetros livres, ou seja:

$$\frac{1}{12}(1 + \alpha_{20}) \left(\frac{13}{48} - b_0 \right) + \gamma_{32} \left(\frac{7}{24} - b_0 \right) = 0 \quad (3.60)$$

3.4.1 Métodos P-estáveis de ordem 4 e 2 estágios

Por (3.6) os métodos de ordem 4 ($m=4$) terão 2 estágios, se um dos dois casos ocorrerem:

(i) $b_3 = 0$, ou

(ii) $b_2 = 0$ e $\gamma_{32} = 0$.

Faremos os estudos desse dois casos separadamente.

Caso (i)

De (3.54), temos que $b_3 = \frac{7}{24} - b_0$. Logo, para $b_3 = 0$, encontramos $b_0 = \frac{7}{24}$, que substituído em (3.60) nos fornece $\alpha_{20} = -1$.

Substituindo, agora, estes valores de b_3 , b_0 e α_{20} em (3.59), usando as condições (3.52) a (3.55), obtemos:

$$\begin{aligned} p^+(H) &= 4 - \frac{1}{3}H^2 + \frac{1}{12}H^4 + \frac{1}{576}(-10 + 7\alpha_{30} - 24\gamma_{30})H^6, \\ p^-(H) &= H^2 + \frac{1}{12}H^4 + \frac{1}{576}(10 - 7\alpha_{30} + 24\gamma_{30})H^6. \end{aligned}$$

Neste caso, para $p \pm(H) > 0$ devemos ter:

$$\begin{aligned} p_6^\pm = \mp \frac{1}{576}(10 - 7\alpha_{30} + 24\gamma_{30}) &= \mp \frac{1}{24} \left(\frac{5}{12} - \frac{7}{24}\alpha_{30} + \gamma_{30} \right) = 0 \\ \iff \gamma_{30} &= \frac{7}{24}\alpha_{30} - \frac{5}{12} \end{aligned}$$

Logo, os polinômios de estabilidade são:

$$p^+(H) = 4 - \frac{1}{3}H^2 + \frac{1}{12}H^4, \quad p^-(H) = H^2 + \frac{1}{12}H^4.$$



Agora, podemos facilmente verificar que $p^\pm(H) > 0$, $\forall H > 0$ e, então, segue que existe uma família de métodos P-estáveis de ordem 4 e 2 estágios com um parâmetro livre, $M_4^{[2]}(\alpha_{30}) = M_4^{[2]}(-1, \alpha_{30}, (7/24)\alpha_{30} - (5/12), 7/24)$, descrita como:

$$(I) \quad \begin{cases} \tilde{y}_{n+2} = -y_n + 2y_{n+1} + h^2 f_{n+1}, \\ y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{24}(7f_n + 6f_{n+1} - \tilde{f}_{n+2}), \end{cases}$$

$$(E) \quad \begin{cases} \tilde{y}_{n+3} = \alpha_{30}y_n + (1 - \alpha_{30})y_{n+1} + (2 + \alpha_{30})hy'_n \\ \quad + h^2 \left[\frac{1}{24}(7\alpha_{30} - 10)f_n + \frac{1}{4}(18 + \alpha_{30})f_{n+1} - \frac{1}{24}(2 + \alpha_{30})\tilde{f}_{n+2} \right], \\ y'_{n+1} = y'_n + \frac{h}{24}(9f_n + 19f_{n+1} - 5\tilde{f}_{n+2} + \tilde{f}_{n+3}). \end{cases}$$

Podemos, então, encontrar o *phase-lag* dos métodos do mesmo modo como em (3.51). Dessa forma, obtemos que para todos os métodos desse caso, com o parâmetro livre α_{30} , o *phase-lag* é $\phi_p(H) = (11/720)H^4$. Um método particular interessante, pela sua simplicidade, é o obtido tomando-se $\alpha_{30} = -2$, dado pelas equações:

$$(I) \quad \begin{cases} \tilde{y}_{n+2} = -y_n + 2y_{n+1} + h^2 f_{n+1}, \\ y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{24}(7f_n + 6f_{n+1} - \tilde{f}_{n+2}), \end{cases} \quad (3.61)$$

$$(E) \quad \begin{cases} \tilde{y}_{n+3} = -2y_n + 3y_{n+1} + h^2(-f_n + 4f_{n+1}), \\ y'_{n+1} = y'_n + \frac{h}{24}(9f_n + 19f_{n+1} - 5\tilde{f}_{n+2} + \tilde{f}_{n+3}). \end{cases}$$

Caso (ii)

Com $\gamma_{32} = 0$ e $b_2 = 0$ em (3.53) e (3.54) obtemos, respectivamente:

$$\gamma_{32} = \frac{1}{3} - \frac{1}{3} \alpha_{30} + \gamma_{30} = 0 \implies \gamma_{30} = \frac{1}{3} \alpha_{30} - \frac{1}{3},$$

$$b_2 = -\frac{11}{12} + 3b_0 = 0 \implies b_0 = \frac{11}{36}.$$

Substituindo γ_{32} e b_0 em (3.60), temos:

$$\frac{1}{12}(1 + \alpha_{20}) \left(\frac{13}{48} - \frac{11}{36} \right) = 0 \implies \alpha_{20} = -1.$$



Agora, substituindo todos esses valores em (3.59), determinamos os polinômios de estabilidade:

$$p^+(H) = 4 + \frac{1}{72}(-10 + 7\alpha_{30} - 3\beta_{30})H^2 + \frac{1}{216}(34 + 2\alpha_{30} - 3\beta_{30})H^4 - \frac{5\beta_{30}}{1728}H^6, \quad (3.62)$$

$$p^-(H) = \frac{1}{1728}(1584 - 72\alpha_{30} + 72\beta_{30})H^2 + \frac{1}{1728}(144 + 24\beta_{30})H^4 + \frac{5\beta_{30}}{1728}H^6.$$

Novamente, para obtermos a P-estabilidade devemos considerar:

$$p_6^\pm = \mp \frac{5\beta_{30}}{1728} = 0 \implies \beta_{30} = 0.$$

Substituindo β_{30} em (3.53), encontramos $\alpha_{30} = -2$. Desse modo, voltando em (3.62), temos os seguintes polinômios de estabilidade:

$$p^+(H) = 4 - \frac{1}{3}H^2 + \frac{5}{36}H^4, \quad p^-(H) = H^2 + \frac{1}{12}H^4.$$

Temos que $p^\pm(H) > 0, \forall H > 0$. Sendo assim, existe um único método P-estável de 4ª ordem e 2 estágios, denotado por $M_4^{[2]} = M_4^{[2]}(-1, -2, -1, 11/36)$ e, descrito como:

$$\begin{aligned} (I) \quad & \begin{cases} \tilde{y}_{n+3} = -2y_n + 3y_{n+1} + h^2(-f_n + 4f_{n+1}), \\ y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{72}(22f_n + 15f_{n+1} - \tilde{f}_{n+3}), \end{cases} \\ (E) \quad & \begin{cases} \tilde{y}_{n+2} = -y_n + 2y_{n+1} + h^2f_{n+1}, \\ y'_{n+1} = y'_n + \frac{h}{24}(9f_n + 19f_{n+1} - 5\tilde{f}_{n+2} + \tilde{f}_{n+3}). \end{cases} \end{aligned} \quad (3.63)$$

Da mesma forma que calculamos para métodos anteriores, encontramos que o *phase-lag* desse método é $\phi_p(H) = (1/45)H^4$.

3.4.2 Métodos P-estáveis de ordem 4 e 3 estágios

Obter famílias gerais de métodos P-estáveis de ordem 4 e 3 estágios é um processo complexo. Mas, podemos notar que a condição essencial a ser satisfeita é a (3.60). Então, se partirmos desta condição, escolhendo valores para as variáveis envolvidas, em busca de métodos com 3 estágios, encontraremos 2 casos:



Caso (1) $\gamma_{32} = 0$ e $b_0 = \frac{13}{48}$

Tomando $\gamma_{32} = 0$ e $b_0 = \frac{13}{48}$ em (3.53) e (3.54), obtemos respectivamente:

$$\gamma_{30} = \frac{(\alpha_{30} - 1)}{3}, \gamma_{31} = \frac{(26 + \alpha_{30})}{6}, \beta_1 = \frac{5}{16}, \beta_2 = -\frac{5}{48} \text{ e } \beta_3 = \frac{1}{48}.$$

Para esse caso temos também $p_6^\pm = 0$ e, considerando

$$\alpha = 5\alpha_{20} - \alpha_{30}, \quad (3.64)$$

obtemos os seguintes polinômios de estabilidade:

$$\begin{aligned} p^+(H) &= 4 - \frac{1}{144}(48 - 12(3 + 5\alpha_{20} - \alpha_{30}))H^2 - \frac{1}{144}(3 + 5\alpha_{20} - \alpha_{30})H^4 \\ &= 4 - \frac{1}{144}(48 - 12(3 + \alpha))H^2 - \frac{1}{144}(3 + \alpha)H^4 \\ &= \left[2 + \frac{1}{48}(\alpha - 1)H^2\right]^2 - \left[\frac{1}{48}(\alpha + 7)H^2\right]^2 \\ p^-(H) &= H^2 + \frac{1}{48}(7 + 5\alpha_{20} - \alpha_{30})H^4 \\ &= H^2 + \frac{1}{48}(7 + \alpha)H^4 \end{aligned}$$

Escolhendo $\alpha = -7$, $p^\pm(H) > 0$, $\forall H > 0$ exceto para $H^2 = 12$, por (3.64) temos $\alpha_{30} = 5\alpha_{20} + 7$. Portanto, todos os métodos da família $M_4^{[3]}(\alpha_{20}) = M_4^{[3]}(\alpha_{20}, 5\alpha_{20} + 7, (5/3)\alpha_{20} + 2, (13/48))$, com o parâmetro α_{20} livre, são "quase" P-estáveis. Esses métodos são descritos a seguir:

$$(I) \quad \begin{cases} \tilde{y}_{n+2} = \alpha_{20}y_n + (1 - \alpha_{20})y_{n+1} + (1 + \alpha_{20})hy'_n \\ \quad + h^2 \left[\frac{1}{3}(1 + \alpha_{20})f_n + \frac{1}{6}(7 + \alpha_{20})f_{n+1} \right], \\ \tilde{y}_{n+3} = (5\alpha_{20} + 7)y_n - (5\alpha_{20} + 6)y_{n+1} + (5\alpha_{20} + 9)hy'_n \\ \quad + h^2 \left[\left(\frac{5}{3}\alpha_{20} + 2\right)f_n + \left(\frac{5}{6}\alpha_{20} + \frac{11}{2}\right)f_{n+1} \right], \\ y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{48}(13f_n + 15f_{n+1} - 5\tilde{f}_{n+2} + \tilde{f}_{n+3}), \end{cases} \quad (3.65)$$

$$(E) \quad y'_{n+1} = y'_n + \frac{h}{24}(9f_n + 19f_{n+1} - 5\tilde{f}_{n+2} + \tilde{f}_{n+3}).$$

Nesse caso, para qualquer α_{20} , temos que o *phase-lag* dos métodos é $\phi_p(H) = (1/720)H^4$.

Caso (2) $\gamma_{32} = 0$ e $\alpha_{20} = -1$

Substituindo $\gamma_{32} = 0$ e α_{20} , em (3.53) e (3.52), obtemos:

$$\gamma_{30} = \frac{(\alpha_{30} - 1)}{3}, \quad \gamma_{31} = \frac{(26 + \alpha_{30})}{6}, \quad \alpha_{21} = 2, \quad \beta_{20} = 0, \quad \gamma_{20} = 0 \quad e \quad \gamma_{21} = 1.$$

Levando esses parâmetros em (3.59), temos os seguintes polinômios de estabilidade em função de α_{30} , β_{30} e b_0 :

$$\begin{aligned} p^+(H) &= 4 + \frac{1}{24}(-62 + 192b_0 + 3\alpha_{30}(-9 + 32b_0) - \beta_{30})H^2 \\ &\quad + \frac{1}{72}(-84 + 312b_0 + 3\alpha_{30}(-1 + 4b_0) + 10\beta_{30} - 36b_0\beta_{30})H^4 \\ &\quad + \frac{1}{576}(13 - 48b_0)\beta_{30}H^6 \\ p^-(H) &= \frac{1}{576}(528 - 24\alpha_{30} + 24\beta_{30})H^2 \\ &\quad + \frac{1}{576}(64(-2 + 9b_0) + 8\alpha_{30}(-11 + 36b_0) + 16(-5 + 18b_0)\beta_{30})H^4 \\ &\quad + \frac{1}{576}(-13 + 48b_0)\beta_{30}H^6 \end{aligned}$$

Como na seção anterior, para que os polinômios sejam estritamente positivos, devemos ter:

$$p_6^\pm = \pm \frac{1}{24}\beta_{30} \left(\frac{13}{24} - 2b_0 \right) = 0 \implies b_0 = \frac{13}{48} \quad \text{ou} \quad \beta_{30} = 0.$$

Para $b_0 = \frac{13}{48}$, obtemos o método "quase" P-estável $M_4^{[3]}(-1)$ como um caso especial para $\alpha_{20} = -1$ dos métodos obtidos no Caso (1).

Para $\beta_{30} = 0$, se substituirmos este valor em (3.53), encontramos $\alpha_{30} = -2$, e obtemos os seguintes polinômios de estabilidade:

$$p^+(H) = 4 - \frac{1}{3}H^2 + \left(4b_0 - \frac{13}{12}\right)H^4, \quad p^-(H) = H^2 + \frac{1}{12}H^4.$$

Para obtermos $p^+(H) > 0$, assumimos que $(4b_0 - \frac{13}{12}) > 0 \implies b_0 > \frac{13}{48} \approx 0.27083$. Desse modo, gostaríamos de encontrar condições para que as raízes de $p^+(H)$

fossem complexas, sendo assim, tiraremos condições sobre b_0 exigindo que o discriminante D de $p^+(H)$ seja menor que zero, ou seja:

$$\begin{aligned} D &= \left(\frac{1}{3}\right)^2 - 4\left(4b_0 - \frac{13}{12}\right)4 < 0 \\ \Rightarrow 16\left(4b_0 - \frac{13}{12}\right) &> \frac{1}{9} \\ \Rightarrow b_0 &> \frac{157}{576} \approx 0.2725 \end{aligned}$$

Concluimos que os métodos da família $M_4^{[3]}(b_0) = M_4^{[3]}(-1, -2, -1, b_0)$ são P-estáveis para todo $b_0 > \frac{157}{576}$. Descrevemos os métodos dessa família a seguir:

$$(I) \quad \begin{cases} \tilde{y}_{n+2} = -y_n + 2y_{n+1} + h^2 f_{n+1}, \\ \tilde{y}_{n+3} = -2y_n + 3y_{n+1} + h^2(-f_n + 4f_{n+1}) \\ y_{n+1} = y_n + hy'_n + h^2 \left[b_0 f_n + \left(\frac{9}{8} - 3b_0\right) f_{n+1} \right. \\ \quad \left. + \left(-\frac{11}{12} + 3b_0\right) \tilde{f}_{n+2} + \left(\frac{7}{24} - b_0\right) \tilde{f}_{n+3} \right], \end{cases} \quad (3.66)$$

$$(E) \quad y'_{n+1} = y'_n + \frac{h}{24} (9f_n + 19f_{n+1} - 5\tilde{f}_{n+2} + \tilde{f}_{n+3}).$$

Para esse caso, o *phase-lag* dos métodos é $\phi_p(H) = ((b_0/2) - (47/360))H^4$, possuindo um parâmetro livre, que será determinado conforme o método.

Capítulo 4

Métodos de Runge-Kutta-Nyström Diagonalmente Implícitos

4.1 Introdução

Para a integração de problemas de valor inicial com soluções oscilatórias, uma outra classe de métodos que tem sido investigada é a dos métodos de Runge-Kutta-Nyström (RKN):

$$f_j = f(t_n + c_j h, y_n + c_j h y'_n + h^2 \sum_{k=1}^s a_{jk} f_k), \quad j = 1, \dots, s$$

$$y_{n+1} = y_n + h y'_n + h^2 \sum_{j=1}^s b_j f_j$$

$$y'_{n+1} = y'_n + h \sum_{j=1}^s b'_j f_j$$

Em [10] foram obtidos métodos "quase" P-estáveis com s -estágios e ordem $2s$ baseados em pontos de Gauss. Entretanto estes métodos são totalmente implícitos. Podemos notar, olhando para o exemplo (3.2) que, ao contrário dos métodos de Newmark [9], os métodos de RKN são duplamente implícitos uma vez que tanto o cálculo do deslocamento quanto o da velocidade são implícitos.



Isso significa que se o método iterativo de Newton for usado para a solução das equações implícitas y_{n+1} e y'_{n+1} , o jacobiano será duas vezes maior que no caso de um método unicamente-implícito.

Devido à complexidade computacional desses métodos totalmente implícitos, atenção tem sido dada aos métodos de Runge-Kutta-Nyström diagonalmente implícitos (DIRKN), onde $a_{jk} = 0$ para $k > j$ e a_{jj} são todos iguais. Van der Houwen e Sommeijer [21], construíram métodos DIRKN P-estáveis de ordem 2 com 1, 2 e 3 estágios. Nós mostramos detalhes dessa obtenção apenas para os métodos de 1 e 2 estágios pois, a idéia é que o leitor perceba que a obtenção de métodos com número de estágios e ordem superior a 2, é bastante complexa. Isso é o que procuramos mostrar nas seções seguintes.

4.2 Métodos DIRKN

Trataremos aqui, dos métodos propostos para integração de um problema de valor inicial do tipo

$$y'' = f(t, y), \quad y(0) = y_0, \quad y'(0) = y'_0, \quad (4.1)$$

cujas solução é oscilatória.

Um método geral de RKN de m-estágios para a integração do PVI (4.1) é dado por:

$$\begin{aligned} Y_{nj} &= y_n + c_j h y'_n + h^2 \sum_{k=1}^m a_{jk} f(t_n + c_k h, Y_{nk}), \quad \text{para } j = 1, \dots, m, \\ y_{n+1} &= y_n + h y'_n + h^2 \sum_{j=1}^m b_j f(t_n + c_j h, Y_{nj}), \\ y'_{n+1} &= y'_n + h \sum_{j=1}^m b'_j f(t_n + c_j h, Y_{nj}), \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde os parâmetros a_{jk} , b_j , b'_j e c_j são reais.



Definindo

$$A = (a_{jk}) \in \mathbb{R}^{m \times m} \quad e, \quad b = (b_j), \quad b' = (b'_j), \quad c = (c_j) \in \mathbb{R}^m, \quad (4.3)$$

o método RKN pode ser representado pela matriz de Butcher:

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^t \\ & b'^t \end{array}$$

Se tomarmos a_{jj} todos iguais e $a_{jk} = 0$ para $k > j$, temos os métodos DIRKN.

4.3 Estabilidade dos Métodos DIRKN

Para estudar a estabilidade dos métodos DIRKN, quando empregados para encontrar a solução de um PVI da forma (4.1), aplicamos a forma geral (4.2) à equação teste (3.7), obtendo:

$$\begin{aligned} Y_{nj} &= y_n + c_j h y'_n - (\omega h)^2 \sum_{k=1}^m a_{jk} Y_{nk}, \quad \text{para } j = 1, \dots, m, \\ y_{n+1} &= y_n + h y'_n - (\omega h)^2 \sum_{j=1}^m b_j Y_{nj}, \\ h y'_{n+1} &= h y'_n - (\omega h)^2 \sum_{j=1}^m b'_j Y_{nj}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

Considerando $H^2 = (\omega h)^2$, os vetores e a matriz em (4.3) e os vetores do $\mathbb{R}^m$:

$$Y_n^t = (Y_{n1}, Y_{n2}, \dots, Y_{nm}), \quad e = (1, 1, \dots, 1)^t,$$

podemos reescrever o método (4.4) como:

$$Y_n = N^{-1} (y_n e + h y'_n c), \quad (4.5)$$

$$y_{n+1} = y_n + h y'_n - H^2 b^t Y_n, \quad (4.6)$$

$$h y'_{n+1} = h y'_n - H^2 b'^t Y_n, \quad (4.7)$$

onde $N = (I + H^2 A)$.



Substituindo Y_n da equação (4.5) em (4.6) e (4.7) e, colocando em evidência as partes em comum, temos:

$$\begin{pmatrix} y_{n+1} \\ hy'_{n+1} \end{pmatrix} = M(H) \begin{pmatrix} y_n \\ hy'_n \end{pmatrix}, \quad \text{onde} \quad (4.8)$$

$$M(H) = \begin{pmatrix} 1 - H^2 b^t N^{-1} e & 1 - H^2 b^t N^{-1} c \\ -H^2 b^t N^{-1} e & 1 - H^2 b^t N^{-1} c \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Consideramos aqui o erro de dispersão para os métodos RKN da mesma forma como para os métodos estendidos unicamente implícitos, dado pela definição 3.2. Desse modo, temos que:

$$\phi(H) = H - \arccos \frac{\text{Tr}(M)}{2\sqrt{\text{Det}(M)}}. \quad (4.10)$$

Definição 4.1 (Erro de Truncamento Local). Para definirmos o erro de truncamento local do método de RKN para a equação teste (3.7), precisamos eliminar y'_n de (4.8). Para isso, reescrevemos (4.8) como:

$$y_{n+1} = m_{11}y_n + m_{12}hy'_n \quad (4.11)$$

$$hy'_{n+1} = m_{21}y_n + m_{22}hy'_n. \quad (4.12)$$

Em seguida, trocamos n por $n - 1$ em (4.12), ou seja,

$$hy'_n = m_{21}y_{n-1} + m_{22}hy'_{n-1}. \quad (4.13)$$

Substituindo hy'_n de (4.13) em (4.11), temos:

$$y_{n+1} = m_{11}y_n + m_{12}m_{21}y_{n-1} + m_{12}m_{22}hy'_{n-1}. \quad (4.14)$$

Agora, fazemos $n = n - 1$ em (4.11), o que nos dá:

$$\begin{aligned} y_n &= m_{11}y_{n-1} + m_{12}hy'_{n-1} \\ \Rightarrow hy'_{n-1} &= \frac{y_n - m_{11}y_{n-1}}{m_{12}}. \end{aligned} \quad (4.15)$$



Substituindo hy'_{n-1} de (4.15) em (4.14), obtemos:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= m_{11}y_n + m_{12}m_{21}y_{n-1} + m_{12}m_{22}\left(\frac{y_n - m_{11}y_{n-1}}{m_{12}}\right) \\ y_{n+1} &= (m_{11} + m_{22})y_n + (m_{12}m_{21} - m_{22}m_{11})y_{n-1} \\ \Rightarrow y_{n+1} - \text{Tr}(M)y_n + \text{Det}(M)y_{n-1} &= 0. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Assim, se fizermos $n = n + 1$ em (4.16), obtemos:

$$y_{n+2} - \text{Tr}(M)y_{n+1} + \text{Det}(M)y_n = 0 \quad (4.17)$$

Portanto, o erro de truncamento local $\tau(H)$ desse método linear de passo dois é definido, substituindo a solução exata de (3.7) em (4.17). Desse modo, obtemos:

$$\tau(H) = e^{2iH} - \text{Tr}(M)e^{iH} + \text{Det}(M). \quad (4.18)$$

Se o método de RKN tem ordem (algébrica) p então:

$$\tau(H) = O(H^{p+2}). \quad (4.19)$$

Temos que (4.19) é somente uma condição necessária para que a ordem algébrica seja p .

Para todos os estudos apresentados nesse capítulo, utilizamos a definição dos métodos RKN, pois temos que os métodos DIRKN são um caso especial dos métodos RKN.

4.4 Construção dos Métodos DIRKN P-estáveis de ordem 2

Antes dos estudos realizados por Sharp [15] na obtenção de métodos DIRKN de terceira e quarta ordem, com 2 e 3 estágios, Van Der Houwen e Sommeijer [21], construíram métodos DIRKN P-estáveis de segunda ordem com 1, 2, e 3 estágios, os quais apresentamos agora. Nesta seção, além de mostrarmos os resultados



dessas investigações, gostaríamos de deixar claro o quanto torna-se complexa a construção desses métodos se aumentarmos o número de estágios e desejarmos ordem mais alta.

4.4.1 Métodos com 1 estágio

Consideremos a família de métodos DIRKN de segunda ordem com um parâmetro livre, obtida por Van Der Houwen e Sommeijer [21], dada pela matriz de Butcher:

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & a \\ \hline & \frac{1}{2} \\ & 1 \end{array} \quad (4.20)$$

De (4.9), podemos obter a matriz M , e com a ajuda do software Mathematica, encontramos que:¹²

$$Tr(M) = \frac{2 + (2a - 1)H^2}{1 + aH^2} \quad e, \quad Det(M) = 1.$$

Vemos então, que a ordem de dispersão desses métodos é 2, pois:

$$\begin{aligned} \phi(H) &= H - \arccos \frac{Tr(M)}{2\sqrt{Det(M)}} \\ &= \left(-\frac{1}{24} + \frac{a}{2}\right) H^3 + O(H^4), \end{aligned}$$

e o *phase-lag* é dado por $\phi_p(H) = \left(-\frac{1}{24} + \frac{a}{2}\right) H^2$, onde temos o parâmetro a livre, ou seja, para cada método temos um *phase-lag*.

As condições para obtermos métodos P-estáveis são dadas por (3.20) e portanto, a primeira delas já é satisfeita, ou seja, $Det(M) = 1$. Falta, então, determinarmos valores para a , tal que,

$$\begin{aligned} |Tr(M)| &< 2 \\ \Rightarrow \quad -2 &< \frac{2 + (2a - 1)H^2}{1 + aH^2} < 2 \end{aligned} \quad (4.21)$$

¹²ver detalhes no apêndice 6



Adicionando 2 em (4.21), temos:

$$0 < 2 + \frac{2 + (2a - 1)H^2}{1 + aH^2} < 4 \quad (4.22)$$

Multiplicando $(1 + aH^2)$ em (4.22), obtemos:

$$\begin{aligned} 0 < 2 + 2aH^2 + (2 + (2a - 1)H^2) < 4 + 4aH^2 \\ \implies 0 < 4 + (4a - 1)H^2 < 4 + 4aH^2 \\ \implies 4a - 1 \geq 0 \implies 4a \geq 1 \implies a \geq \frac{1}{4} \end{aligned}$$

Obtemos assim, uma família de métodos DIRKN de segunda ordem, 1 estágio e, P-estáveis, representada pela matriz de Butcher:

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & a \geq \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} \\ & 1 \end{array} \quad (4.23)$$

4.4.2 Métodos com 2 estágios

Consideramos a família de métodos DIRKN com 2 estágios e três parâmetros livres:

$$\begin{array}{c|cc} c_1 & a & \\ \hline \frac{1}{2} & a_1 & a \\ \hline & 0 & \frac{1}{2} \\ & 0 & 1 \end{array} \quad (4.24)$$

Do mesmo modo como fizemos para os métodos com 1 estágio, com a ajuda do software Mathematica, calculamos¹³ a matriz M (4.9), utilizando os valores dados pela matriz (4.24). A partir daí calculamos:

$$Tr(M) = \frac{2 + (4a - 1)H^2 + (2a^2 - a + a_1/2 + c_1a_1)H^4}{(1 + aH^2)^2}$$

¹³ver detalhes no apêndice 7



$$Det(M) = \frac{1 + 2aH^2 + (a^2 - a_1/2 + c_1a_1)H^4}{(1 + aH^2)^2}$$

Agora, calculando o erro de dispersão desses métodos, obtemos:

$$\begin{aligned}\phi(H) &= H - \arccos \frac{Tr(M)}{2\sqrt{Det(M)}} \\ &= \left(-\frac{1}{24} + \frac{a}{2} + \frac{a_1}{2} \right) H^3 + O(H^4)\end{aligned}$$

Queremos que a ordem de dispersão desses métodos seja igual a 3, para isso, consideramos:

$$a_1 = \frac{1}{12} - a.$$

Além disso, como estamos interessados em métodos P-estáveis, para a primeira propriedade ser satisfeita, basta tomarmos $c_1 = 1/2$ para que $Det(M) = 1$ independente de a .

Para termos a segunda propriedade da P-estabilidade satisfeita devemos encontrar valores para a tal que $|Tr(M)| < 2$, ou seja,

$$\begin{aligned}-2 &< Tr(M) < 2 \\ \Rightarrow -2 &< \frac{2 + (-1 + 4a)H^2 + (\frac{1}{12} + 2a^2 - 2a)H^4}{(1 + aH^2)^2} < 2\end{aligned}\quad (4.25)$$

Somando-se 2 em (4.25), temos:

$$\Rightarrow 0 < 2 + \frac{2 + (-1 + 4a)H^2 + (\frac{1}{12} + 2a^2 - 2a)H^4}{(1 + aH^2)^2} < 4\quad (4.26)$$

Multiplicando $(1 + aH^2)^2$ em (4.26), obtemos:

$$\begin{aligned}0 &< 2(1 + aH^2)^2 + 2 + (4a - 1)H^2 + (\frac{1}{12} - 2a + 2a^2)H^4 < 4(1 + aH^2)^2 \\ \Rightarrow 0 &< 2(1 + 2aH^2 + a^2H^4) + 2 + (4a - 1)H^2 + (\frac{1}{12} - 2a + 2a^2)H^4 < 4(1 + 2aH^2 + a^2H^4) \\ \Rightarrow 0 &< \underbrace{4 + (8a - 1)H^2 + (\frac{1}{12} - 2a + 4a^2)H^4}_{g(H)} < \underbrace{4 + 8aH^2 + 4a^2H^4}_{x(H)}\end{aligned}$$

Devemos encontrar valores de a tal que $g(H) > 0$. Tomando $H^2 = z$, torna-se mais fácil o estudo pois, basta apenas obtermos a tal que as raízes z_1 e z_2 de



$g(z)$ sejam negativas. Desse modo, ao obtermos as quatro raízes da função $g(H)$, teremos quatro raízes complexas.

Primeiramente, encontramos as raízes da função $g(z)$, ou seja:

$$z_1 = -\frac{2(-3 + 24a + \sqrt{-3 + 144a})}{1 - 24a + 48a^2} \quad e$$

$$z_2 = \frac{2(3 - 24a + \sqrt{-3 + 144a})}{1 - 24a + 48a^2},$$

que podem ser simplificadas na forma:

$$z_1 = \frac{24}{3 - 24a + \sqrt{-3 + 144a}} \quad e$$

$$z_2 = -\frac{24}{-3 + 24a + \sqrt{-3 + 144a}}.$$

Vemos que z_1 e z_2 tem descontinuidade quando $a = (1/4) + (\sqrt{6}/12)$ e $a = (1/4) - (\sqrt{6}/12)$, respectivamente.

Fazendo um estudo em busca de valores de a tal que $z_1 < 0$ e $z_2 < 0$, encontramos que devemos tomar $a > (1/4) + (\sqrt{6}/12)$ e $a > (1/4) - (\sqrt{6}/12)$, respectivamente.

Sendo assim, tomando $a > (1/4) + (\sqrt{6}/12)$ temos que $g(z)$ é côncava para cima e as raízes de $g(H)$ são todas complexas, ou seja,

$$0 < g(H) < x(H) \quad \text{para } a > \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{6}}{12}.$$

Portanto, encontramos uma família de métodos DIRKN de segunda ordem, 2 estágios e P-estáveis, representada pela matriz de Butcher:

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} & a > \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{6}}{12} & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{12} - a & a > \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{6}}{12} \\ \hline & 0 & \frac{1}{2} \\ & 0 & 1 \end{array} \quad (4.27)$$

4.4.3 Métodos com 3 estágios

Consideramos a família de métodos com 3 estágios

$$\begin{array}{c|ccc}
 c_1 & a & & \\
 c_1 & a_1 & a & \\
 \frac{1}{2} & a_2 & a_3 & a \\
 \hline
 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\
 & 0 & 0 & 1
 \end{array} \quad (4.28)$$

Pela análise feita na seção anterior, podemos perceber que ao aumentarmos um estágio na fórmula de um método DIRKN de segunda ordem os cálculos para a obtenção de métodos P-estáveis se tornam mais elaborados. Lembramos que estamos apenas aumentando o número de estágios e não a ordem dos métodos. Podemos então imaginar o quão complexo será para obtermos métodos com ordem superior a 2. Não é nosso objetivo a busca de métodos DIRKN P-estáveis, mas sim mostrarmos a complexidade de obtenção desses métodos.

Assim, apenas fornecemos a família de métodos DIRKN P-estáveis de segunda ordem e 3 estágios, cuja obtenção pode ser encontrada em [21], que é dada pela matriz de Butcher:

$$\begin{array}{c|ccc}
 \frac{1}{2} & a > 0.656... & & \\
 \frac{1}{2} & a_1 & a & \\
 \frac{1}{2} & a_2 & a_3 & a \\
 \hline
 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\
 & 0 & 0 & 1
 \end{array} \quad (4.29)$$

onde $a_1 = \frac{a^2 - \frac{1}{6}a + \frac{1}{360}}{a_3}$ e $a_2 = -a + \frac{1}{12} - a_3$. O erro de dispersão desse método é dado por $\phi_p(H) = -((1/40320) + a/240 - a^2/8 + a^3/2)H^6$.

Sharp, Fine e Burrage [15] investigaram a existência de métodos DIRKN P-estáveis, com dois estágios e ordem 3 e três estágios com ordem 4. No resultado dessa investigação eles obtiveram que não existem métodos DIRKN P-estáveis com dois estágios e ordem 3, mas conseguiram obter um método DIRKN



P-estável com três estágios e ordem 4, dado pela seguinte matriz de Butcher:

$$\begin{array}{c|ccc}
 \frac{2}{3} & & & \\
 \frac{2}{9} & & & \\
 \frac{109+\alpha}{168} & \frac{(\alpha+221)(\alpha-3)}{56448} & \frac{2}{9} & \\
 \frac{28}{109+\alpha} & \frac{-2(67+\alpha)\lambda}{9(109+\alpha)^3(\alpha-3)} & \frac{-196(67+\alpha)\beta}{9(109+\alpha)^3(\alpha-3)} & \frac{2}{9} \\
 \hline
 & \frac{\alpha^2+50\alpha-1727}{4(\alpha-3)(67+\alpha)} & \frac{-784(\alpha-59)}{(\alpha-3)\beta} & \frac{(81+\alpha)(109+\alpha)^2}{4(67+\alpha)\beta} \\
 & \frac{3(\alpha^2+50\alpha-1727)}{4(\alpha-3)(67+\alpha)} & \frac{131712}{(\alpha-3)\beta} & \frac{(109+\alpha)^3}{4(67+\alpha)\beta}
 \end{array} \quad (4.30)$$

onde $\alpha = 2473^{\frac{1}{2}}$, $\beta = \alpha^2 + 218\alpha + 7177$ e $\lambda = \alpha^3 + 159\alpha^2 - 5685\alpha - 752723$. O erro de dispersão para esse método é dado por $\phi_p(H) = ((1/45) + (\sqrt{2473}/10368))H^4$.

Finalizamos este capítulo, enfatizando que a obtenção de métodos DIRKN P-estáveis é bem mais difícil do que a dos métodos estendidos.

Capítulo 5

Resultados Numéricos

5.1 Introdução

Para completar nossos estudos, implementamos todos os métodos e mostramos, nesse capítulo, alguns resultados numéricos, obtidos em problemas encontrados na literatura, por exemplo em [2]. Para os problemas cuja solução exata é conhecida, analisamos o erro absoluto e comparamos os métodos entre si. Para os demais problemas, os quais não conhecemos a solução exata, mas sabemos sobre o seu comportamento através de estudos apresentados na literatura, nós analisamos também o "erro absoluto", considerando como solução "exata" para esses problemas, o resultado fornecido por um método de ordem alta com um passo h bem pequeno.

5.2 Notações para os Métodos

Nas tabelas de resultados, apresentamos o erro absoluto fornecido por cada método, para diferentes tamanhos do passo h . É importante registrarmos que em nossas avaliações consideramos o tamanho do passo h fixo durante todo o intervalo



de integração. Representaremos os métodos nas tabelas de resultados por:

- MENDk, para $k = 2, 3, 4$ e 5 : Os métodos estendidos de passo-um não-dissipativos de ordem k , dados pelas tabelas II, III, IV e V, encontradas nas páginas 15, 16, 17 e 19, cujos *phase-lag* são dados por $\phi_p = (1/12)\nu^2$, $(1/720)\nu^4$, $(1/720)\nu^4$, $(-11/4800)\nu^6$, respectivamente;
- $M_3^{[2]}$: O método estendido unicamente implícito de passo-um P-estável, com 2 estágios e ordem 3, $M_3^{[2]}(-3, -1/6, 7/24)$, fornecido pelas equações (3.50), cujo *phase-lag* é dado por $\phi_p = (1/720)H^4$;
- $M_4^{[2]}(-2)$: O método estendido unicamente implícito de passo-um P-estável, com 2 estágios e ordem 4, $M_4^{[2]}(-1, -2, -1, 7/24)$, fornecido pelas equações (3.61), cujo *phase-lag* é dado por $\phi_p = (11/720)H^4$;
- $M_4^{[2]}$: O método estendido unicamente implícito de passo-um P-estável, com 2 estágios e ordem 4, $M_4^{[2]}(-1, -2, -1, 11/36)$, fornecido pelas equações (3.63), cujo *phase-lag* é dado por $\phi_p = (1/45)H^4$;
- $M_4^{[3]}(10)$: O método estendido unicamente implícito de passo-um P-estável, com 3 estágios e ordem 4, $M_4^{[3]}(10, 57, 56/3, 13/48)$, quando escolhemos $\alpha_{20} = 10$ em (3.65) e, cujo *phase-lag* é $\phi_p = (1/720)H^4$;
- $M_4^{[3]}(55/144)$: O método estendido unicamente implícito de passo-um P-estável, com 3 estágios e ordem 4, $M_4^{[3]}(-1, -2, -1, 55/144)$, quando escolhemos $b_0 = 55/144$ em (3.66) e, cujo *phase-lag* é $\phi_p = (29/480)H^4$;
- DIRKN21: O método de Runge-Kutta diagonalmente implícito com 1 estágio e ordem 2, tomando $a = 1/2$ em (4.23), cujo *phase-lag* é $\phi_p = (5/24)H^2$;
- DIRKN22: O método de Runge-Kutta diagonalmente implícito com 2 estágios e ordem 2, tomando $a = 1/2$ em (4.27), cujo *phase-lag* é $\phi_p = (61/720)H^4$;



- DIRKN23: O método de Runge-Kutta diagonalmente implícito com 3 estágios e ordem 6, tomando $a = 2/3$ e $a_3 = (1/12) - a$ em (4.29), cujo *phase-lag* é $\phi_p = (56951/40320)H^6$;
- DIRKN43: O método de Runge-Kutta diagonalmente implícito com 3 estágios e ordem 4, representado pela matriz de Butcher (4.30), cujo *phase-lag* é $\phi_p = ((1/45) + (\sqrt{2473}/10368))H^4$;

5.3 Problemas e Resultados

Todos os PVI's descritos a seguir, são de segunda ordem e possuem soluções oscilatórias. Antes de aplicarmos os métodos estendidos não-dissipativos, apresentados no capítulo 2, primeiramente transformamos o problema de segunda ordem num sistema de duas equações diferenciais de primeira ordem. Os demais métodos são aplicados diretamente nos PVI's de segunda ordem. Os problemas 1 a 6 são todos lineares, enquanto que os problemas 7 e 8 são não-lineares.

PROBLEMA 1

Esse PVI é a equação teste (3.7), usada para analisar a estabilidade, com $\omega = 5.0$. Transformando-a num sistema de primeira ordem, temos:

$$\begin{cases} y' = z & y(0) = 1, \quad z(0) = 0, \\ z' = -25y & 0 < t < 40, \end{cases} \quad (5.1)$$

cuja solução exata é $y(t) = \cos 5t$. Segue na TAB.P1 os resultados obtidos:¹⁴

¹⁴Logo a frente, tentamos explicar graficamente com os resultados dados pelo MEND2, o porque de estarmos expressando por ***** na TAB.P1.



TAB.P1 - Erros Absolutos no cálculo de y para $t = 40$

h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	*****	1.50(-2)	1.50(-2)	2.68(-5)
0.05	*****	9.44(-4)	9.44(-4)	4.22(-7)
0.025	2.41(-1)	5.92(-5)	5.92(-5)	6.61(-9)

h	DIRKN21	DIRKN22	DIRKN23	DIRKN43
0.1	*****	8.23(-1)	1.74(-1)	2.80(-1)
0.05	1.38(0)	5.41(-2)	2.19(-3)	1.80(-2)
0.025	6.26(-1)	4.13(-3)	6.75(-4)	1.14(-3)

h	$M_3^{[2]}$	$M_4^{[2]}(-2)$	$M_4^{[2]}$	$M_4^{[3]}(10)$	$M_4^{[3]}(55/144)$
0.1	1.50(-2)	1.70(-1)	2.51(-1)	1.50(-2)	7.12(-1)
0.05	9.44(-4)	1.04(-2)	1.51(-2)	9.44(-4)	4.15(-2)
0.025	5.92(-5)	6.51(-4)	9.46(-4)	5.92(-5)	2.57(-4)

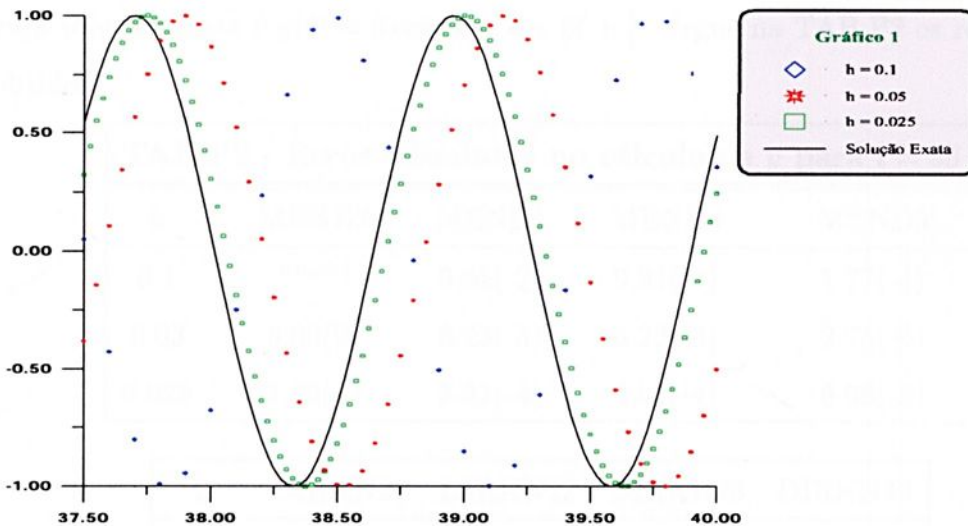
Ao analisarmos os resultados, temos que:

1. Na classe dos MEND o MEND3 e o MEND4, forneceram resultados iguais, e suas ordens são diferentes, mas possuem o mesmo *phase-lag*.
2. Na classe dos DIRKN, temos que os métodos DIRKN21, DIRKN22 e DIRKN23, são de ordem 2, mas possuem ordens de dispersão diferentes. Vemos que o método DIRKN23, para esse problema, nos fornece melhores aproximações, e sua ordem de dispersão é também a maior, dentre os outros métodos dessa classe.
3. Agora, na classe dos $M_m^{[s]}$, acontece o contrário do ocorrido na classe dos DIRKN. Todos os métodos possuem ordem de dispersão iguais, mas a ordem e o n^2 de estágios são diferentes. Por isso, apesar de $M_3^{[2]}$ e $M_4^{[3]}(10)$ nos fornecer erros absolutos iguais, vale ressaltar que $M_3^{[2]}$ possui apenas 2 estágios, ou seja, o custo computacional com esse método é menor.



4. Com o MEND5 obtivemos uma ótima precisão e sua ordem de dispersão é superior à dos demais. Os métodos MEND3, MEND4, $M_3^{[2]}$ e $M_4^{[3]}$ (10) nos fornecem erros absolutos iguais e, eles possuem o mesmo *phase-lag*, ϕ_p . Podemos concluir que se aplicarmos esses métodos nesse tipo de problemas, o erro de dispersão é mais relevante que o erro de truncamento local.

Como ilustração, mostramos no Gráfico 1 a solução exata $y(t)$, representada pela linha contínua e as aproximações y_n , em cada ponto t_n , representadas por pontos coloridos, obtidas utilizando o método MEND2, para $h = 0.1$, $h = 0.05$ e $h = 0.025$ e t no intervalo $[0,40]$.



Nós percebemos que o erro absoluto nem sempre é eficiente para analisarmos o comportamento dos métodos pois, se olharmos no Gráfico 1 apenas para os pontos de $t=40$, temos que, o ponto azul está bem mais perto da solução exata do que os pontos vermelho e verde, de onde poderíamos tirar conclusões erradas. Portanto, cada vez que diminuimos o passo h , cada vez mais a solução numérica se aproximará da solução exata.

Apresentamos a seguir sete problemas. Os problemas 2 a 6 são modificações da equação teste (3.7) com comportamento variado das soluções e, os problemas 7 e 8 são não-lineares.

PROBLEMA 2

Seja

$$y'' = -25y + 5t, \quad y(0) = 5, \quad y'(0) = -24/5, \quad 0 < t < 50. \quad (5.2)$$

Transformando (5.2) para um sistema, obtemos:

$$\begin{cases} y' = z & y(0) = 5, \quad z(0) = -24/5, \\ z' = -25y + 5t & 0 < t < 50, \end{cases} \quad (5.3)$$

cuja solução exata é $y(t) = 5 \cos 5t - \sin 5t + \frac{t}{5}$. Segue na TAB.P2 os resultados obtidos:

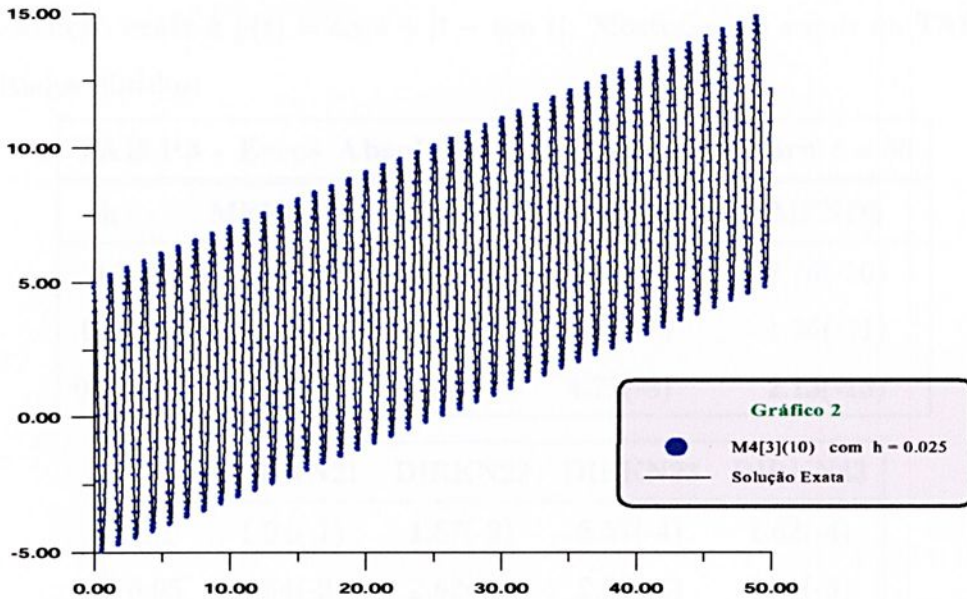
TAB.P2 - Erros Absolutos no cálculo de y para $t = 50$				
h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	*****	9.91(-2)	9.91(-2)	1.77(-4)
0.05	6.00(0)	6.23(-3)	6.23(-3)	2.75(-6)
0.025	1.59(0)	3.91(-4)	3.91(-4)	6.58(-9)

h	DIRKN21	DIRKN22	DIRKN23	DIRKN43
0.1	*****	5.16(0)	1.17(0)	1.84(0)
0.05	4.13(0)	3.71(-1)	2.89(-2)	1.19(-1)
0.025	4.01(0)	2.48(-2)	1.68(-3)	7.56(-3)

h	$M_3^{[2]}$	$M_4^{[2]}(-2)$	$M_4^{[2]}$	$M_4^{[3]}(10)$	$M_4^{[3]}(55/144)$
0.1	9.91(-2)	1.12(0)	1.66(0)	9.91(-2)	4.52(0)
0.05	6.23(-3)	6.86(-2)	1.00(0)	6.23(-3)	2.74(0)
0.025	3.91(-4)	4.30(-3)	6.25(-3)	3.91(-4)	1.70(-2)

Utilizamos a solução exata e o resultado obtido por $M_4^{[3]}(10)$ com $h = 0.025$, para mostrarmos no Gráfico 2 o comportamento da solução aproximada e exata.





Analisando os resultados, vemos que são semelhantes aos resultados obtidos no Problema 1, precisão menor. Queremos apenas ressaltar que:

1. O método MEND2, não resolve bem esse tipo de problema, talvez por possuir ordem algébrica e ordem *phase-lag* baixas.
2. Gostaríamos de comentar sobre a classe dos métodos DIRKN pois, percebemos que com o passo $h=0.1$, o método também não resolve bem esse tipo de problema, isto é, para obtermos um resultado com precisão elevada, teríamos que diminuir bastante o tamanho do passo h , com isso, o custo computacional aumentaria bastante.

PROBLEMA 3

Seja

$$y'' = -y + |t| \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 0, \quad 0 < t < 80. \quad (5.4)$$

Transformando (5.4) para um sistema, obtemos:

$$\begin{cases} y' = z & y(0) = 1, \quad z(0) = 0, \\ z' = -y + |t| & 0 < t < 80, \end{cases} \quad (5.5)$$

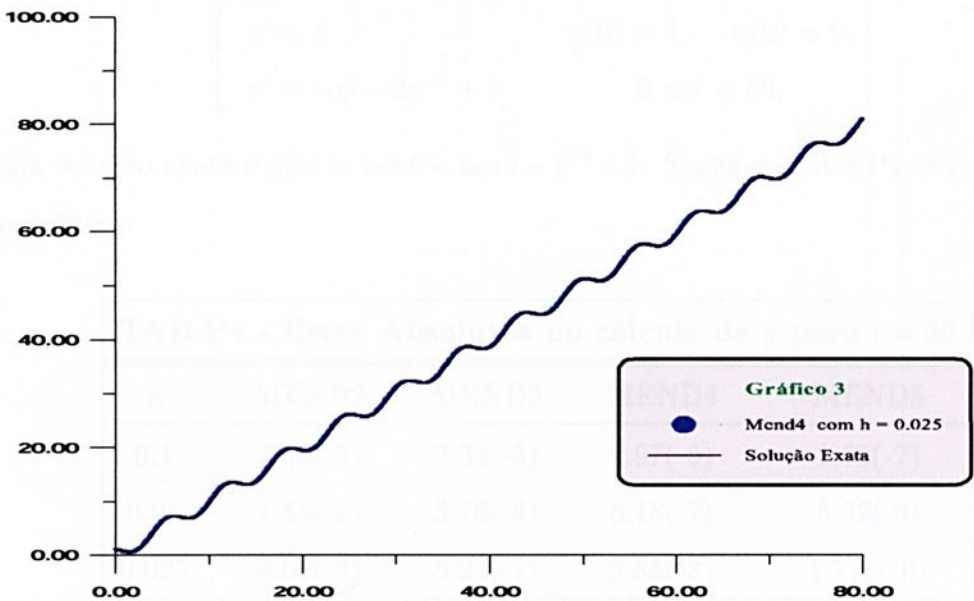
cuja solução exata é $y(t) = \cos t + |t - \sin t|$. Mostramos a seguir na TAB.3 os resultados obtidos:

TAB.P3 - Erros Absolutos no cálculo de y para $t = 80$				
h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	7.54(-2)	1.23(-5)	1.23(-5)	8.76(-10)
0.05	1.85(-2)	7.67(-7)	7.67(-7)	1.36(-11)
0.025	4.61(-3)	4.79(-8)	4.79(-8)	2.13(-13)

h	DIRKN21	DIRKN22	DIRKN23	DIRKN43
0.1	1.94(-1)	1.57(-3)	8.57(-4)	1.62(-4)
0.05	4.64(-2)	2.62(-4)	2.08(-4)	5.11(-5)
0.025	1.15(-2)	1.40(-4)	9.38(-5)	4.14(-4)

h	$M_3^{[2]}$	$M_4^{[2]}(-2)$	$M_4^{[2]}$	$M_4^{[3]}(10)$	$M_4^{[3]}(55/144)$
0.1	1.23(-5)	1.36(-4)	1.98(-4)	1.23(-5)	5.38(-4)
0.05	7.67(-7)	8.48(-6)	1.24(-5)	7.67(-7)	3.36(-5)
0.025	4.79(-8)	5.30(-7)	7.72(-7)	4.79(-8)	2.08(-6)

Para termos a ilustração completa do problema, plotamos a solução exata juntamente com o resultado obtido pelo MEND4 com $h=0.025$.



Ao analisarmos os resultados fornecidos na TAB.P3, vemos que:

1. O resultado fornecido pelo método DIRKN43, com $h=0.05$, é mais preciso do que para $h=0.025$. Isso ocorreu porque, no ponto $t = 80$, a solução está na curva do topo dessa oscilação. Esse fenômeno aconteceu com o método DIRKN43 mas, poderia ter ocorrido com qualquer um dos outros métodos.
2. Esse problema apesar de ser oscilatório possui curvas suaves, enquanto os problemas 1 e 2, não. Isso leva-nos a refletir, pois até agora os métodos MEND2 e DIRKN21, não apresentavam resultados que valessem ser usados, e para esse problema, resolveu com precisão esperada.

PROBLEMA 4

Seja

$$y'' = -y - 2e^{-t} + 1 \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 0, \quad 0 < t < 80. \quad (5.6)$$

Transformando (5.6) em um sistema, obtemos:

$$\begin{cases} y' = z & y(0) = 1, \quad z(0) = 0, \\ z' = -y - 2e^{-t} + 1 & 0 < t < 80, \end{cases} \quad (5.7)$$

cuja solução exata é $y(t) = \cos t - \sin t - e^{-t} + 1$. Segue na TAB.P4 os resultados numéricos:

TAB.P4 - Erros Absolutos no cálculo de y para $t = 80$

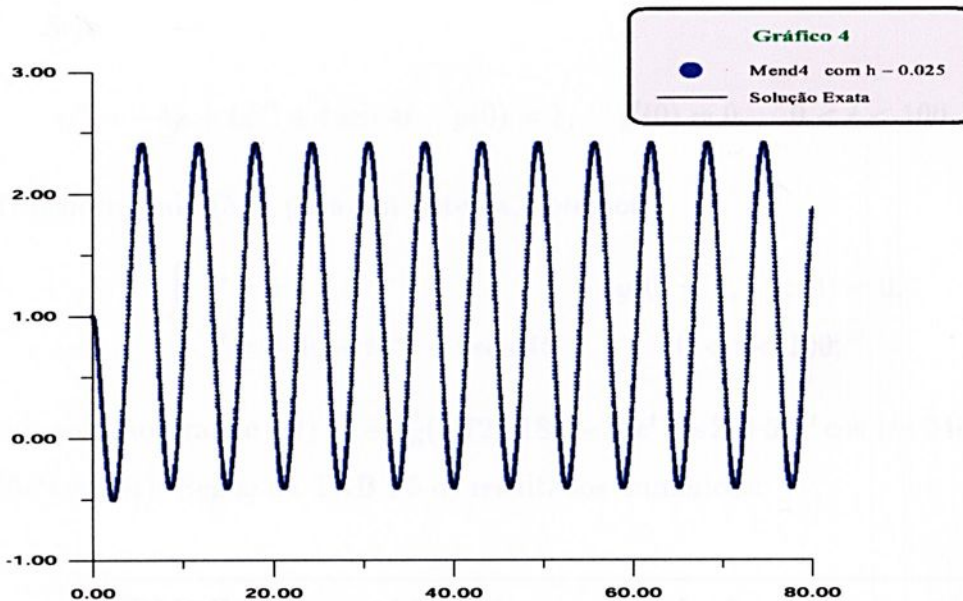
h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	7.56(-2)	2.33(-5)	9.97(-6)	1.60(-7)
0.05	1.85(-2)	3.76(-6)	6.18(-7)	5.32(-9)
0.025	4.61(-3)	5.23(-7)	3.85(-8)	1.71(-10)



h	DIRKN21	DIRKN22	DIRKN23	DIRKN43
0.1	1.96(-1)	2.03(-3)	1.30(-3)	2.41(-4)
0.05	4.70(-2)	3.72(-4)	3.25(-4)	2.10(-5)
0.025	1.16(-2)	8.13(-5)	8.21(-5)	2.38(-6)

h	$M_3^{[2]}$	$M_4^{[2]}(-2)$	$M_4^{[2]}$	$M_4^{[3]}(10)$	$M_4^{[3]}(55/144)$
0.1	2.33(-5)	1.32(-4)	1.93(-4)	9.97(-6)	5.31(-4)
0.05	3.76(-6)	8.24(-6)	1.21(-5)	6.18(-7)	3.31(-5)
0.025	5.23(-7)	5.15(-7)	7.54(-7)	3.85(-8)	2.04(-6)

Mostramos no Gráfico 4 o comportamento da solução numérica por MEND4 com passo $h = 0.025$ e a solução exata.



Fazendo uma análise dos resultados percebemos que:

1. Esse problema, apesar de ser uma alteração pequena da equação teste, já causa uma grande modificação nos resultados numéricos pois, o comportamento da solução aproximada nos mostra que não existe mais ligação com

os métodos de *phase-lag* comum. Por exemplo, os métodos MEND3 e $M_3^{[2]}$ e, MEND4 e $M_4^{[3]}(10)$ estão dando os mesmos resultados. Lembramos que analisamos a estabilidade para esses métodos usando a equação teste.

2. Aconteceu também que DIRKN43 está resolvendo melhor com uma casa decimal de precisão que o DIRKN23. Enquanto DIRKN22 e DIRKN23 fornecem resultados semelhantes.
3. Para esse problema e os anteriores, com MEND2 obtivemos melhores precisões do que com o método DIRKN21, ambos métodos de ordem 2.

PROBLEMA 5

Seja

$$y'' = -4y + te^{-t} + t \sen 4t \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 0, \quad 0 < t < 100. \quad (5.8)$$

Transformando (5.8) para um sistema, obtemos:

$$\begin{cases} y' = z \\ z' = -4y + te^{-t} + t \sen 4t \end{cases} \quad \begin{matrix} y(0) = 1, & z(0) = 0, \\ 0 < t < 100, \end{matrix} \quad (5.9)$$

cuja solução exata é $y(t) = -\frac{e^{-t}}{900}(-72 - 180t - 78e^t \cos 2t + 50e^t \cos 4t + 54e^t \sen 2t + 75e^t t \sen 4t)$. Segue na TAB.P5 os resultados numéricos:

TAB.P5 - Erros Absolutos no cálculo de y para $t = 80$

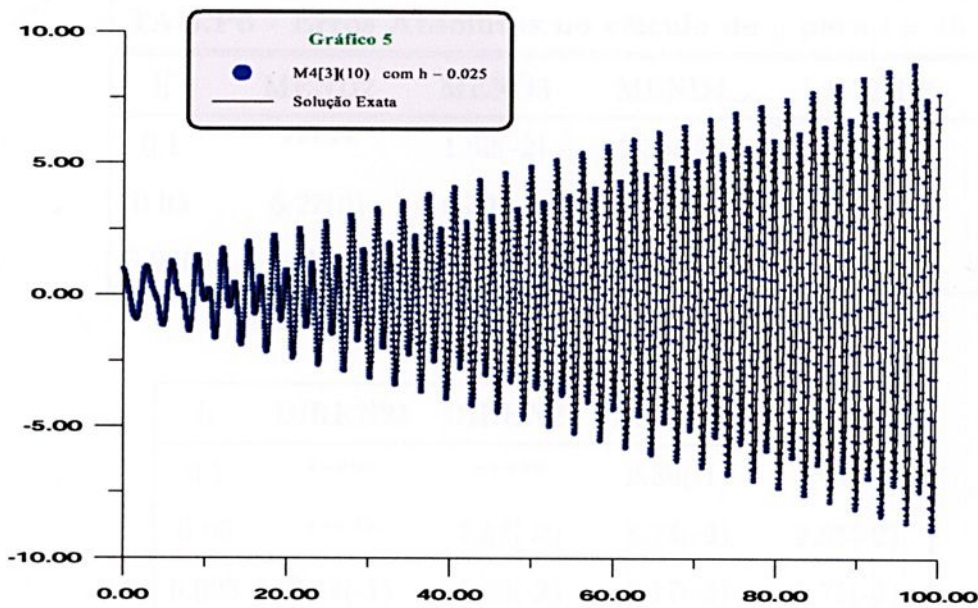
h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	8.67(-1)	7.78(-3)	4.53(-3)	4.70(-5)
0.05	2.07(-1)	1.22(-3)	2.72(-4)	1.30(-5)
0.025	5.05(-2)	1.67(-4)	1.67(-5)	5.81(-6)



h	DIRKN21	DIRKN22	DIRKN23	DIRKN43
0.1	1.59(0)	7.22(-2)	4.91(-2)	1.02(-2)
0.05	4.28(-1)	1.34(-2)	1.19(-2)	6.67(-4)
0.025	1.01(-1)	3.07(-3)	2.96(-3)	3.95(-5)

h	$M_3^{[2]}$	$M_4^{[2]}(-2)$	$M_4^{[2]}$	$M_4^{[3]}(10)$	$M_4^{[3]}(55/144)$
0.1	7.78(-3)	5.12(-3)	1.07(-2)	4.53(-3)	4.12(-2)
0.05	1.22(-3)	3.20(-4)	6.60(-4)	2.72(-4)	2.53(-3)
0.025	1.67(-4)	2.00(-5)	4.08(-5)	1.64(-5)	1.55(-4)

Como ilustração dos resultados obtidos, segue no Gráfico 5 o comportamento da solução exata juntamente com a solução aproximada por $M_4^3(10)$ com $h=0.025$.



Consideramos aqui os mesmos comentários feitos para o problema 4.



PROBLEMA 6

Tomando ω não constante, em (3.7), vemos que o PVI não possui solução analítica.

Seja

$$y'' = -(1+t)y \quad y(0) = 0, \quad y'(0) = 1, \quad 0 < t < 60. \quad (5.10)$$

Transformando (5.10) para um sistema, obtemos:

$$\begin{cases} y' = z & y(0) = 0, \quad z(0) = 1, \\ z' = -(1+t)y & 0 < t < 60. \end{cases} \quad (5.11)$$

Expressamos o erro absoluto em TAB.P6, considerando, a solução "exata" desse problema o resultado fornecido pelo método $M_4^{[3]}(10)$ no ponto $t=40$, com $h=0.0001$.

TAB.P6 - Erros Absolutos no cálculo de y para $t = 40$

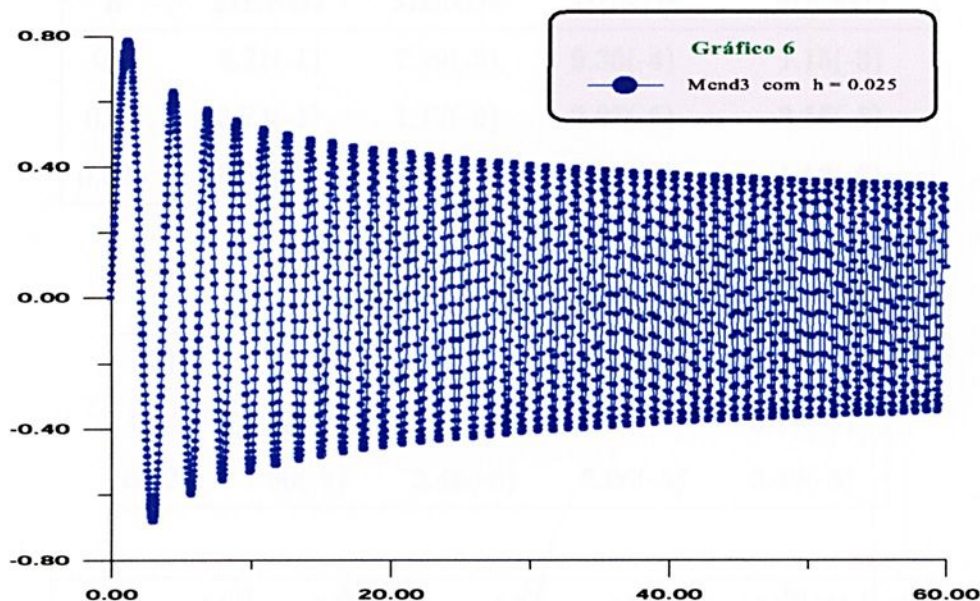
h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	*****	1.62(-2)	2.35(-2)	1.19(-4)
0.05	6.22(0)	6.30(-4)	1.51(-3)	5.02(-6)
0.025	1.71(-1)	1.18(-5)	9.47(-5)	1.79(-7)

h	DIRKN21	DIRKN22	DIRKN23	DIRKN43
0.1	*****	*****	2.30(-1)	2.44(-1)
0.05	*****	7.57(-2)	8.75(-3)	2.65(-2)
0.025	2.44(-1)	5.26(-3)	2.17(-5)	1.75(-3)

h	$M_3^{[2]}$	$M_4^{[2]}(-2)$	$M_4^{[2]}$	$M_4^{[3]}(10)$	$M_4^{[3]}(55/144)$
0.1	1.62(-2)	1.99(-1)	2.41(-1)	2.15(-2)	*****
0.05	6.30(-4)	1.58(-2)	2.29(-2)	1.445(-3)	6.07(-2)
0.025	1.18(-5)	1.00(-3)	1.46(-3)	9.25(-5)	3.95(-3)



Ilustramos apenas o comportamento da solução numérica por MEND3 com $h = 0.025$ no Gráfico 6.



O que temos a comentar desse problema é quase semelhante ao anterior. Vemos apenas uma mudança onde DIRKN23 apresenta precisões melhores que DIRKN43.

PROBLEMA 7

Para ilustrarmos o comportamento da solução numérica quando aplicamos os métodos num modelo não linear (isto é, um problema que não é da forma (3.7)), seja

$$y'' = -y^3 \quad y(0) = 0, \quad y'(0) = 1, \quad 0 < t < 40. \quad (5.12)$$

Transformando (5.12) para um sistema, obtemos:

$$\begin{cases} y' = z & y(0) = 0, \quad z(0) = 1, \\ z' = -y^3 & 0 < t < 40. \end{cases} \quad (5.13)$$

Consideramos solução "exata" desse problema, o resultado dado pelo método MEND5 no ponto $t=40$, com $h=0.0001$. Segue na TAB.P7 os resultados numéricos obtidos:

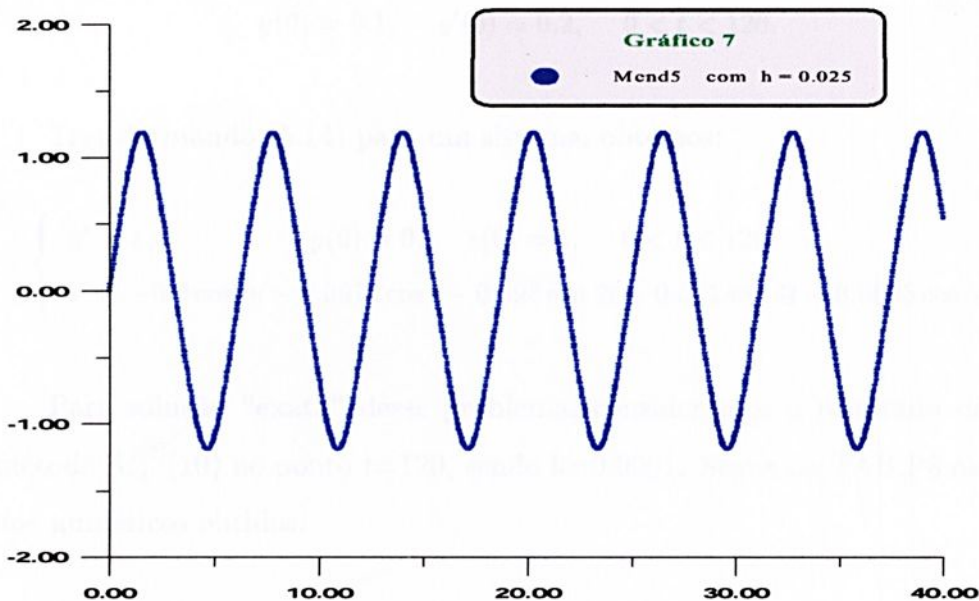
TAB.P7 - Erros Absolutos no cálculo de y para $t = 40$

h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	4.21(-1)	7.29(-5)	9.36(-4)	1.15(-3)
0.05	3.74(-1)	1.17(-5)	2.07(-5)	3.56(-5)
0.025	3.62(-1)	7.41(-7)	1.03(-7)	1.12(-6)

h	DIRKN21	DIRKN22	DIRKN23	DIRKN43
0.1	1.57(-1)	2.37(-3)	5.21(-5)	5.46(-4)
0.05	3.99(-2)	1.22(-4)	3.71(-5)	5.17(-5)
0.025	1.00(-2)	3.46(-6)	2.06(-5)	3.49(-5)

h	$M_3^{[2]}$	$M_4^{[2]}(-2)$	$M_4^{[2]}$	$M_4^{[3]}(10)$	$M_4^{[3]}(55/144)$
0.1	1.50(-3)	6.77(-4)	6.31(-4)	1.42(-1)	3.76(-4)
0.05	5.65(-5)	2.45(-5)	2.95(-5)	5.75(-3)	5.65(-5)
0.025	2.14(-6)	8.93(-7)	1.39(-6)	1.90(-4)	3.90(-5)

Ilustramos no Gráfico 7 apenas, o comportamento da solução numérica dada por MEND5 com $h = 0.025$.



Analisando os resultados numéricos vemos que:

1. Dentro da classe MEND o método MEND5 fornece resultados com precisão mais baixa que o MEND3 e o MEND4. Vemos também que o MEND3 com passo $h=0.1$ e 0.05 resolve melhor que os demais mas, para o passo $h=0.025$ MEND4 é melhor.
2. O que observamos no item 1, também acontece na classe dos DIRKN. Enquanto DIRKN23 e DIRKN43 resolvem melhor com passo $h=0.1$ e 0.05 , com passo $h=0.025$, DIRKN22 é melhor.
3. Já na classe dos $M_m^{[s]}$ o $M_4^{[3]}(55/144)$ resolve melhor que o $M_4^{[3]}(10)$ mas, $M_4^{[2]}(-2)$, é ainda melhor.

PROBLEMA 8

Apresentamos um outro problema não-linear de segunda ordem:

$$\begin{aligned} y'' &= -0.2 \cos ty - 0.0975 \cos t - 0.398 \sin 2t + 0.001 \sin 4t - 0.0005 \cos 5t \\ y(0) &= 0.1, \quad y'(0) = 0.2, \quad 0 < t < 120. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Transformando (5.14) para um sistema, obtemos:

$$\begin{cases} y' = z, & y(0) = 0, \quad z(0) = 1, \quad 0 < t < 120, \\ z' = -0.2 \cos ty - 0.0975 \cos t - 0.398 \sin 2t + 0.001 \sin 4t - 0.0005 \cos 5t \end{cases} \quad (5.15)$$

Para solução "exata" desse problema, consideramos o resultado dado pelo método $M_4^{[3]}(10)$ no ponto $t=120$, sendo $h=0.0001$. Segue na TAB.P8 os resultados numéricos obtidos:

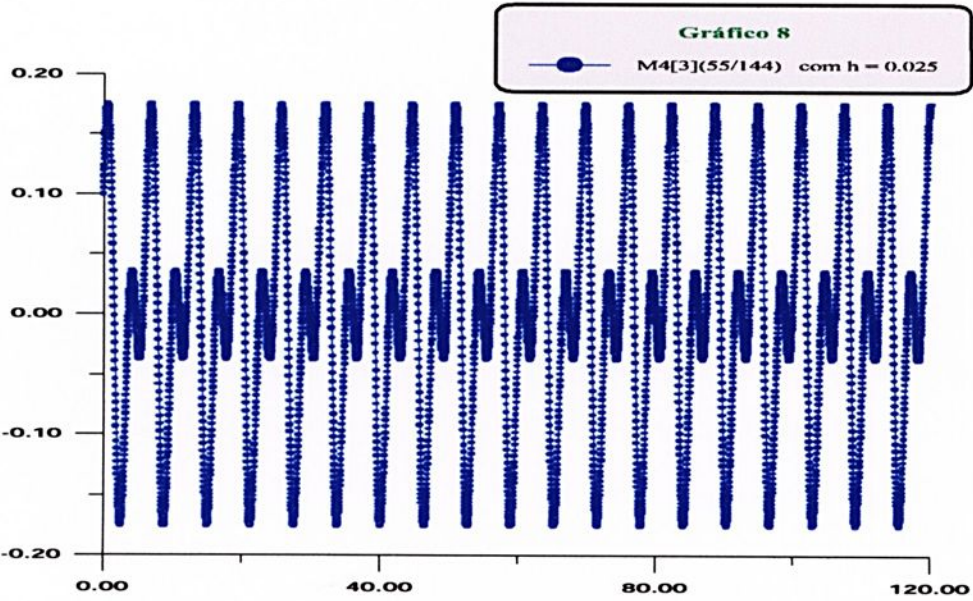
TAB.P8 - Erros Absolutos no cálculo de y para $t = 120$

h	MEND2	MEND3	MEND4	MEND5
0.1	5.55(-3)	5.86(-5)	6.09(-5)	3.53(-6)
0.05	1.39(-3)	4.99(-6)	3.09(-6)	8.00(-8)
0.025	3.47(-4)	4.80(-7)	2.44(-7)	4.95(-10)

h	DIRKN21	DIRKN22	DIRKN23	DIRKN43
0.1	1.91(-3)	2.16(-3)	2.16(-3)	5.35(-6)
0.05	4.78(-4)	5.40(-4)	5.41(-4)	2.98(-6)
0.025	1.20(-4)	1.33(-4)	1.33(-4)	3.16(-6)

h	$M_3^{[2]}$	$M_4^{[2]}(-2)$	$M_4^{[2]}$	$M_4^{[3]}(10)$	$M_4^{[3]}(55/144)$
0.1	5.87(-5)	5.73(-5)	5.49(-5)	6.46(-5)	4.21(-5)
0.05	4.99(-6)	3.66(-6)	3.51(-6)	3.99(-6)	2.68(-6)
0.025	4.80(-7)	2.30(-7)	2.20(-7)	2.47(-7)	1.67(-7)

Ilustramos o comportamento da solução dada por $M_4^3(55/144)$ com $h = 0.025$.



Analisando os resultados obtidos, temos que:

1. O método MEND5 predominou resolvendo com melhor precisão esse problema, independente do tamanho do passo $h=0.1, 0.05$ e 0.025 .
2. Os métodos DIRKN22 e o DIRKN23 nos fornecem resultados iguais e, semelhantes aos obtidos pelo método DIRKN21. Entretanto nesta classe a melhor precisão é obtida com o método DIRKN43.
3. Vemos também que há uma grande semelhança nos resultados fornecidos pela classe dos métodos $M_m^{[s]}$, juntamente com os resultados dados por MEND3 e MEND4.

Capítulo 6

Conclusão

Nesta dissertação, consideramos a classe dos métodos estendidos de passo-um proposta em Chawla e outros [8], e a classe dos métodos estendidos de passo-um unicamente implícitos, proposta em [5], para a integração numérica de problemas de valor inicial de primeira e segunda ordem, respectivamente, que possuem soluções oscilatórias.

Para analisar o comportamento de um método para a resolução numérica destes problemas, algumas propriedades de estabilidade têm sido consideradas na literatura, como as propriedades *phase-lag* e a não-dissipatividade, as quais introduzimos no capítulo 1.

Para obter métodos estendidos de passo-um não-dissipativos, Chawla e Al-Zanaid [8] consideraram duas condições sobre os coeficientes dos métodos, (1.16) e (1.17), e forneceram métodos não-dissipativos de ordem 2 a 5, o que apresentamos em detalhes no capítulo 2. Além disso, mostramos que não existem métodos não-dissipativos de ordens 6 e 7, aplicando as condições (1.16) e (1.17) sobre os métodos estendidos obtidos em [22] e [17]. No final deste capítulo, fornecemos alguns resultados numéricos onde pudemos observar a eficiência dos métodos não-dissipativos obtidos na resolução de problemas com soluções oscilatórias.

No capítulo 3, analisamos a estabilidade da classe dos métodos estendidos unicamente implícitos, proposta em [5], aplicáveis diretamente a problemas de valor inicial de segunda ordem, do tipo (3.1), que possuem soluções oscilatórias.



Através das condições dadas por (3.20), mostramos que existe um único método de ordem 3, com dois estágios, "quase" P-estável e famílias de métodos de ordem 4 com 2 e 3 estágios.

Uma outra classe de métodos proposta para a resolução de problemas do tipo (3.1) que possuem soluções oscilatórias é a dos métodos DIRKN. No entanto, procuramos mostrar no capítulo 4, que a obtenção destes métodos com ordem *phase-lag* e/ou ordem algébrica maior que 2 é bastante complexa.

Para cada método obtido, calculamos o correspondente *phase-lag* e observamos que a ordem de dispersão nem sempre coincide com a ordem algébrica do método. Além disso, através dos resultados numéricos, apresentados no capítulo 5, constatamos que, em geral, a ordem de dispersão é mais relevante que a ordem algébrica, na resolução de problemas oscilatórios. Também observamos que para a maioria dos problemas testados é o MEND5, que possui ordem algébrica 5 e ordem de dispersão 6, que fornece resultados mais precisos.

Ao compararmos a classe dos métodos estendidos de passo-um com a classe dos métodos DIRKN, concluímos que:

- ✓ algebricamente, a obtenção de métodos DIRKN P-estáveis com ordem de dispersão maior que 2 é muito mais complicada do que a dos métodos estendidos unicamente implícitos.
- ✓ os métodos DIRKN, por sua vez, possuem uma estrutura mais fácil de ser implementada, permitindo-nos fazer um programa geral onde apenas escolhemos o método que queremos utilizar, nos dados de entrada. Já, para os métodos estendidos não conseguimos o mesmo tipo de generalização, isto é, para cada método temos um programa diferente. Além disso, cada programa resolve sistemas de equações diferenciais de dimensão no máximo dois.
- ✓ numericamente, observamos que, para a maioria dos problemas, os métodos estendidos têm um comportamento melhor que os métodos DIRKN.



Das observações feitas anteriormente consideramos os métodos estendidos de passo-um adequados e promissores para a resolução numérica de equações diferenciais que possuem soluções oscilatórias.

Finalizando esse trabalho, mostramos alguns caminhos de eventuais possibilidades para continuidade das investigações dessa classe de métodos:

- ▶ Tentar obter classes de métodos estendidos de passo variável, através da estratégia usada para encontrar os métodos de Fehlberg [2]. Um exemplo é o par embutido RKF45, que possui a vantagem de ter um custo computacional baixo e, de ser encontrado em softwares matemáticos como *Mathematica*, *Matlab* e *Maple*. O código RKF45 é muito usado na prática por engenheiros e físicos, para resolução de PVI com soluções oscilatórias.
- ▶ Tentar generalizar a implementação para a classe dos métodos estendidos, como fizemos nesse trabalho para a classe dos métodos DIRKN.
- ▶ Mostrar uma outra forma para análise de comparação entre métodos aplicados a PVI's que possuem soluções oscilatórias. Através do Problema 1, no capítulo 5, vimos que utilizando o "erro absoluto", podemos tirar conclusões erradas sobre os métodos.
- ▶ Mostrar se há uma relação, dentro da classe dos métodos estendidos, entre métodos A, L, e P-estáveis.



Apêndice

Contas usando o software *Mathematica*

APÊNDICE 1. Como obtivemos a equação (3.37)

☐ Consideremos primeiramente as Matrizes $A(H)$ e $B(H)$:

```
A = {{1 + (b1 + b2 a21) H^2 - b2 L21 H^4, 0}, {(c1 + c2 a21) H^2 - c2 L21 H^4, 1}};  
MatrixForm[A]
```

$$\begin{pmatrix} 1 + (b_1 + a_{21} b_2) H^2 - b_2 H^4 L_{21} & 0 \\ (c_1 + a_{21} c_2) H^2 - c_2 H^4 L_{21} & 1 \end{pmatrix}$$

```
B = {{1 - (b0 + b2 a20) H^2 + b2 L20 H^4, 1 - b2 b20 H^2},  
      {-(c0 + c2 a20) H^2 + c2 L20 H^4, 1 - c2 b20 H^2}}; MatrixForm[B]
```

$$\begin{pmatrix} 1 - (b_0 + a_{20} b_2) H^2 + b_2 H^4 L_{20} & 1 - b_2 b_{20} H^2 \\ (-c_0 - a_{20} c_2) H^2 + c_2 H^4 L_{20} & 1 - b_{20} c_2 H^2 \end{pmatrix}$$

Substitua nas matrizes $A(H)$ e $B(H)$ as permutações (3.24), (3.25) e (3.26):

Calculemos as matrizes que o Determinante de $A(H)$ e $B(H)$

Contas usando o software *Mathematica*

Aqui temos que para o Determinante de A em H usando Determinante de A , quanto deve ser o valor de $L21$

APÊNDICE 1. Como obtivemos a equação (3.37)

☐ Consideremos primeiramente as Matrizes $A(H)$ e $B(H)$:

```
A = {{(1 + (b1 + b2 a21) H^2 - b2 L21 H^4, 0}, {(c1 + c2 a21) H^2 - c2 L21 H^4, 1}};
MatrixForm[A]
```

$$\begin{pmatrix} 1 + (b1 + a21 b2) H^2 - b2 H^4 L21 & 0 \\ (c1 + a21 c2) H^2 - c2 H^4 L21 & 1 \end{pmatrix}$$

```
B = {{(1 - (b0 + b2 a20) H^2 + b2 L20 H^4, 1 - b2 b20 H^2},
      {-(c0 + c2 a20) H^2 + c2 L20 H^4, 1 - c2 b20 H^2}}; MatrixForm[B]
```

$$\begin{pmatrix} 1 - (b0 + a20 b2) H^2 + b2 H^4 L20 & 1 - b2 b20 H^2 \\ -(c0 - a20 c2) H^2 + c2 H^4 L20 & 1 - b20 c2 H^2 \end{pmatrix}$$

☐ Substituímos nas matrizes $A(H)$ e $B(H)$ os parâmetros (3.32), (3.33) e (3.34):

$$a_{21} = 1 - a_{20}; \quad b_{20} = 1 + a_{20}; \quad L_{21} = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} a_{20} - L_{20};$$

$$b_1 = \frac{5}{6} - 2 b_0; \quad b_2 = \frac{-1}{3} + b_0; \quad c_0 = \frac{5}{12}; \quad c_1 = \frac{2}{3}; \quad c_2 = \frac{-1}{12};$$

☐ Gostaríamos de mostrar quem é o Determinante de $A(H)$ e $B(H)$:

```
FullSimplify[Collect[Det[A], H]]
```

$$1 - \frac{1}{6} (-3 - 2 a_{20} + 6 (1 + a_{20}) b_0) H^2 - \frac{1}{6} (-1 + 3 b_0) H^4 (3 + a_{20} - 2 L_{20})$$

```
FullSimplify[Collect[Det[B], H]]
```

$$1 - \frac{1}{6} (-3 - 2 a_{20} + 6 (1 + a_{20}) b_0) H^2 +$$

$$\frac{1}{36} H^4 (- (1 + a_{20}) (-5 + 18 b_0) + 9 (-1 + 4 b_0) L_{20})$$

☐ Aqui temos que para que Determinante de A seja igual ao Determinante de B, quanto deve ser o valor de L_{20}

```
Solve[Det[A] == Det[B], L20]
```

$$\left\{ \left\{ L_{20} \rightarrow \frac{1}{3} (13 + a_{20} - 36 b_0) \right\} \right\}$$

APENDICE 2.

Como obtivemos a equação (3.40)

☐ Para calcularmos o Traço de $C(H)$, precisaremos da matriz $R(H) = A^{-1}(H) B(H)$, pois $C(H) = \text{Det}(A) R$. Desse modo:

```
R = Inverse[A].B;
```


R[[1, 1]]

$$\frac{1 - (a20 \left(-\frac{1}{3} + b0\right) + b0) H^2 + \left(-\frac{1}{3} + b0\right) H^4 L20}{1 + \left(\frac{5}{6} + (1 - a20) \left(-\frac{1}{3} + b0\right) - 2 b0\right) H^2 - \left(-\frac{1}{3} + b0\right) H^4 \left(\frac{3}{2} + \frac{a20}{2} - L20\right)}$$

R[[1, 2]]

$$\frac{1 - (1 + a20) \left(-\frac{1}{3} + b0\right) H^2}{1 + \left(\frac{5}{6} + (1 - a20) \left(-\frac{1}{3} + b0\right) - 2 b0\right) H^2 - \left(-\frac{1}{3} + b0\right) H^4 \left(\frac{3}{2} + \frac{a20}{2} - L20\right)}$$

R[[2, 1]]

$$\frac{\left(-\frac{5}{12} + \frac{a20}{12}\right) H^2 - \frac{H^4 L20}{12} + \left(\left(-\left(\frac{2}{3} + \frac{1}{12} (-1 + a20)\right) H^2 - \frac{1}{12} H^4 \left(\frac{3}{2} + \frac{a20}{2} - L20\right)\right) \left(1 - \left(a20 \left(-\frac{1}{3} + b0\right) + b0\right) H^2 + \left(-\frac{1}{3} + b0\right) H^4 L20\right)\right)}{\left(1 + \left(\frac{5}{6} + (1 - a20) \left(-\frac{1}{3} + b0\right) - 2 b0\right) H^2 - \left(-\frac{1}{3} + b0\right) H^4 \left(\frac{3}{2} + \frac{a20}{2} - L20\right)\right)}$$

R[[2, 2]]

$$\frac{1 + \frac{1}{12} (1 + a20) H^2 + \frac{(1 - (1 + a20) \left(-\frac{1}{3} + b0\right) H^2) \left(-\left(\frac{2}{3} + \frac{1}{12} (-1 + a20)\right) H^2 - \frac{1}{12} H^4 \left(\frac{3}{2} + \frac{a20}{2} - L20\right)\right)}{1 + \left(\frac{5}{6} + (1 - a20) \left(-\frac{1}{3} + b0\right) - 2 b0\right) H^2 - \left(-\frac{1}{3} + b0\right) H^4 \left(\frac{3}{2} + \frac{a20}{2} - L20\right)}}$$

☐ Calculando agora a matriz C(H), obtemos:

CH = Simplify[Det[A] * R];

CH[[1, 1]]

$$\frac{1}{3} (3 + a20 (1 - 3 b0) H^2 - H^4 L20 + 3 b0 H^2 (-1 + H^2 L20))$$

CH[[2, 2]]

$$1 + \frac{2 H^4}{9} - \frac{1}{36} a20 H^2 (-12 + 36 b0 + H^2) + b0 H^2 (-1 + H^2 (-1 + L20)) - \frac{H^4 L20}{4}$$

☐ Enfim calcularemos o Traço da matriz $C(H)$:

```
TraçoCH = Collect[Simplify[Tr[CH]], H]
```

$$2 + \left(\frac{2 a_{20}}{3} - 2 b_0 - 2 a_{20} b_0 \right) H^2 + H^4 \left(\frac{2}{9} - \frac{a_{20}}{36} - \frac{7 L_{20}}{12} + b_0 (-1 + 2 L_{20}) \right)$$

☐ Se substituirmos a equação 3.37

$$L_{20} = \frac{13}{3} + \frac{a_{20}}{3} - 12 b_0;$$

☐ no TraçoCH, obtemos:

```
TraçoCH = Collect[Simplify[Tr[CH]], H]
```

$$2 + \left(-2 b_0 - \frac{2}{3} a_{20} (-1 + 3 b_0) \right) H^2 + \left(-\frac{83}{36} + \frac{44 b_0}{3} - 24 b_0^2 + \frac{2}{9} a_{20} (-1 + 3 b_0) \right) H^4$$

APENDICE 3. Como chegamos nas equações (3.41) e (3.42)

☐ Substituindo (3.39), (3.40) em (3.28), e tomando $L_{20} = (13 / 3) + (a_{20} / 3) - 12 b_0$, obtemos os polinômios de estabilidade:

```
pmais = Collect[Simplify[2 Det[A] + Tr[CH]], H]
```

$$4 + \left(1 + a_{20} \left(\frac{4}{3} - 4 b_0 \right) - 4 b_0 \right) H^2 + \frac{1}{36} (-151 + 1020 b_0 - 1728 b_0^2 + 4 a_{20} (-1 + 3 b_0)) H^4$$

```
pmenos = Collect[Simplify[2 Det[A] - Tr[CH]], H]
```

$$H^2 + \left(\frac{5}{12} + a_{20} \left(\frac{1}{3} - b_0 \right) - b_0 \right) H^4$$

APENDICE 4. Como chegamos na equação (3.51)

☐ Já sabemos os valores de b_0 e a_0 , sendo assim declaramos:

$$b_0 = \frac{7}{24}; a_{20} = -3; L_{20} = -\frac{1}{6};$$

☐ Substituindo (3.39), (3.40) em (3.31), obtemos que o erro de dispersão é:

$$\phi_H = \text{Collect}\left[\text{Simplify}\left[H - \text{ArcCos}\left[\frac{\text{Tr}[CH]}{2 \text{Det}[A]}\right]\right], H\right]$$

$$H - \text{ArcCos}\left[\frac{144 - 60 H^2 + H^4}{144 + 12 H^2 + H^4}\right]$$

☐ basta apenas expandirmos $O(H)$ em série de Taylor em torno do ponto 0:

$$\text{Series}[\phi_H, \{H, 0, 5\}]$$

$$\frac{H^5}{720} + O[H]^6$$

$$\text{Clear}[A, B, R, CH, pmais, pmenos, TraçoCH, \\ a_{20}, a_{21}, b_0, b_1, b_2, c_0, c_1, c_2, L_{20}, L_{21}, \phi_H]$$

APENDICE 5.

□ Consideremos primeiramente as Matrizes $A(H)$ e $B(H)$:

$A =$

```
{{1 + (b1 + b2 a21 + b3 a31) H^2 - (b2 L21 + b3 L31 + b3 L32 a21) H^4 + b3 L32 L21 H^6,
0}, {(c1 + c2 a21 + c3 a31) H^2 - (c2 L21 + c3 L31 + c3 L32 a21) H^4 +
c3 L32 L21 H^6, 1}}; MatrixForm[A]
```

$$\begin{pmatrix} 1 + (b1 + a21 b2 + a31 b3) H^2 + b3 H^6 L21 L32 - H^4 (b2 L21 + b3 L31 + a21 b3 L32) & 0 \\ (c1 + a21 c2 + a31 c3) H^2 + c3 H^6 L21 L32 - H^4 (c2 L21 + c3 L31 + a21 c3 L32) & 1 \end{pmatrix}$$

```
B = {{1 - (b0 + b2 a20 + b3 a30) H^2 + (b2 L20 + b3 L30 + b3 L32 a20) H^4 -
b3 L32 L20 H^6, 1 - (b2 b20 + b3 b30) H^2 + b3 L32 b20 H^4},
{-(c0 + c2 a20 + c3 a30) H^2 + (c2 L20 + c3 L30 + c3 L32 a20) H^4 -
c3 L32 L20 H^6, 1 - (c2 b20 + c3 b30) H^2 + c3 L32 b20 H^4}};
```

$B[[1, 1]]$

$$1 - (b0 + a20 b2 + a30 b3) H^2 - b3 H^6 L20 L32 + H^4 (b2 L20 + b3 L30 + a20 b3 L32)$$

$B[[1, 2]]$

$$1 - ((1 + a20) b2 + b3 b30) H^2 + (1 + a20) b3 H^4 L32$$

$B[[2, 1]]$

$$(-c0 - a20 c2 - a30 c3) H^2 - c3 H^6 L20 L32 + H^4 (c2 L20 + c3 L30 + a20 c3 L32)$$

$B[[2, 2]]$

$$1 - ((1 + a20) c2 + b30 c3) H^2 + (1 + a20) c3 H^4 L32$$

- ☐ Calculemos aqui os $\text{Det}(A)$ e $\text{Det}(B)$ de forma genérica, ou seja, sem substituir as condições de ordem do método

```
FullSimplify[Collect[Det[A], H]]
```

```
1 + (b1 + a21 b2 + a31 b3) H^2 + b3 H^6 L21 L32 - H^4 (b2 L21 + b3 (L31 + a21 L32))
```

```
FullSimplify[Collect[Det[B], H]]
```

```
1 - (b0 + a20 b2 + a30 b3 - c0 + c2 - a30 c3 + b30 c3) H^2 +
H^6 ((b3 c2 - b2 c3) (b30 L20 - (1 + a20) L30) +
((1 + a20) (b3 c0 - b0 c3) + (-b3 + c3) L20) L32) +
H^4 ((1 + a20) b0 c2 - b2 ((1 + a20) c0 + (a30 + a20 a30 - a20 b30) c3 - L20) -
c2 L20 + c3 (b0 b30 - L30 + L32) +
b3 ((1 + a20) a30 c2 - b30 (c0 + a20 c2) + L30 + a20 L32))
```

- ☐ Para calcularmos o $\text{Traço}(CH)$ precisamos primeiramente da matriz $R(H) = A^{-1}(H) B(H)$, pois $CH = \text{Det}(A(H)) R(H)$

```
R = Inverse[A].B; CH = Det[A] * R;
```

- ☐ Agora sim encontramos o $\text{Traço}(CH)$

```
Collect[FullSimplify[Tr[CH]], H]
```

```
2 + (-b0 + b1 - a20 b2 + a21 b2 - a30 b3 +
a31 b3 - c1 - c2 - a20 c2 - a21 c2 - a31 c3 - b30 c3) H^2 +
H^4 ((b2 + a20 b2 + b3 b30) (c1 + a21 c2 + a31 c3) + (-b1 - a21 b2 - a31 b3)
(c2 + a20 c2 + b30 c3) + b2 L20 - b2 L21 + c2 L21 + (1 + a20) c3 L32 +
b3 (L30 + a20 L32) - b3 (L31 + a21 L32) + c3 (L31 + a21 L32)) +
H^6 ((1 + a20) (b1 + a21 b2 + a31 b3) c3 L32 +
(-1 - a20) b3 (c1 + a21 c2 + a31 c3) L32 - b3 L20 L32 + b3 L21 L32 -
c3 L21 L32 + (c2 + a20 c2 + b30 c3) (b2 L21 + b3 (L31 + a21 L32)) +
(-b2 - a20 b2 - b3 b30) (c2 L21 + c3 (L31 + a21 L32))) +
H^8 ((b2 + a20 b2 + b3 b30) c3 L21 L32 - b3 (c2 + a20 c2 + b30 c3) L21 L32 +
(-1 - a20) c3 L32 (b2 L21 + b3 (L31 + a21 L32)) +
(1 + a20) b3 L32 (c2 L21 + c3 (L31 + a21 L32)))
```


□ De forma genérica para $m=4$, encontramos também os 2 polinômios de estabilidade $p(H)$ e $p(H)$:

```
pmais = Collect[FullSimplify[2 Det[A] + Tr[CH]], H]
```

$$4 + (-b_0 + 3 b_1 - a_{20} b_2 + 3 a_{21} b_2 - a_{30} b_3 + 3 a_{31} b_3 - c_1 - c_2 - a_{20} c_2 - a_{21} c_2 + (-a_{31} - b_{30}) c_3) H^2 +$$

$$H^4 ((b_2 + a_{20} b_2 + b_3 b_{30}) c_1 + a_{21} b_3 b_{30} c_2 - a_{21} b_2 b_{30} c_3 + (1 + a_{20}) a_{31} (-b_3 c_2 + b_2 c_3) - b_1 (c_2 + a_{20} c_2 + b_{30} c_3) + b_2 L_{20} - 3 b_2 L_{21} + c_2 L_{21} + b_3 L_{30} - 3 b_3 L_{31} + c_3 L_{31} - a_{21} (3 b_3 - c_3) L_{32} + c_3 L_{32} + a_{20} (b_3 + c_3) L_{32}) +$$

$$H^6 (-b_3 b_{30} c_2 L_{21} + b_2 b_{30} c_3 L_{21} + (1 + a_{20}) (b_3 c_2 - b_2 c_3) L_{31} - a_{20} (b_3 c_1 - b_1 c_3) L_{32} + (-b_3 (c_1 + L_{20} - 3 L_{21}) - c_3 (-b_1 + L_{21})) L_{32})$$

```
pmenos = Collect[FullSimplify[2 Det[A] - Tr[CH]], H]
```

$$(b_0 + b_1 + (a_{30} + a_{31}) b_3 + c_1 + c_2 + (a_{20} + a_{21}) (b_2 + c_2) + (a_{31} + b_{30}) c_3) H^2 +$$

$$H^4 ((-b_2 - a_{20} b_2 - b_3 b_{30}) c_1 + b_1 c_2 + a_{20} b_1 c_2 + b_1 b_{30} c_3 - a_{21} b_{30} (b_3 c_2 - b_2 c_3) + (-1 - a_{20}) a_{31} (-b_3 c_2 + b_2 c_3) - b_2 L_{20} - b_2 L_{21} - c_2 L_{21} - b_3 L_{30} - b_3 L_{31} - c_3 L_{31} - c_3 L_{32} - a_{20} (b_3 + c_3) L_{32} - a_{21} (b_3 + c_3) L_{32}) +$$

$$H^6 (b_3 b_{30} c_2 L_{21} - b_2 b_{30} c_3 L_{21} + (-1 - a_{20}) (b_3 c_2 - b_2 c_3) L_{31} + a_{20} b_3 c_1 L_{32} + (-1 - a_{20}) b_1 c_3 L_{32} + (c_3 L_{21} + b_3 (c_1 + L_{20} + L_{21})) L_{32})$$

□ Consideremos agora as condições de ordem dos métodos estendidos de 4ª ordem

$$a_{21} = 1 - a_{20}; \quad b_{20} = 1 + a_{20}; \quad L_{20} = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} a_{20}; \quad L_{21} = \frac{7}{6} + \frac{1}{6} a_{20}; \quad a_{31} = 1 - a_{30};$$

$$b_{30} = 2 + a_{30}; \quad L_{31} = \frac{11}{3} + \frac{5}{6} a_{30} - 2 L_{30}; \quad L_{32} = \frac{1}{3} - \frac{1}{3} a_{30} + L_{30};$$

$$b_1 = \frac{9}{8} - 3 b_0; \quad b_2 = -\frac{11}{12} + 3 b_0; \quad b_3 = \frac{7}{24} - b_0;$$

$$c_0 = \frac{3}{8}; \quad c_1 = \frac{19}{24}; \quad c_2 = -\frac{5}{24}; \quad c_3 = \frac{1}{24};$$

□ Como chegamos na equação (3.57)

Calculamos o $\text{Det}(A)$ e o $\text{Det}(B)$ separadamente, considerando as condições de ordem acima, e comparamos:

```
Simplify[Collect[Det[A], H]]
```

$$1 + \left(\frac{1}{2} + a_{20} \left(\frac{11}{12} - 3 b_0 \right) + a_{30} \left(-\frac{7}{24} + b_0 \right) - b_0 \right) H^2 +$$

$$\frac{1}{432} (7 + a_{20}) (-7 + 24 b_0) H^6 (-1 + a_{30} - 3 L_{30}) +$$

$$\frac{1}{144} H^4 (-14 + 72 b_0 + 3 a_{30} (-7 + 24 b_0) + 42 L_{30} - 144 b_0 L_{30} +$$

$$2 a_{20} (a_{30} (-7 + 24 b_0) + 3 (6 + 7 L_{30} - 4 b_0 (5 + 6 L_{30})))$$

```
Simplify[Collect[Det[B], H]]
```

$$1 + \left(\frac{1}{2} + a_{20} \left(\frac{11}{12} - 3 b_0 \right) + a_{30} \left(-\frac{7}{24} + b_0 \right) - b_0 \right) H^2 +$$

$$\frac{(1 + a_{20}) H^6 (-11 + 4 a_{30} (-7 + 24 b_0) + 84 L_{30} - 48 b_0 (-1 + 6 L_{30}))}{1728} +$$

$$\frac{1}{144} H^4 (-14 + 72 b_0 + 3 a_{30} (-7 + 24 b_0) + 42 L_{30} - 144 b_0 L_{30} +$$

$$2 a_{20} (a_{30} (-7 + 24 b_0) + 3 (6 + 7 L_{30} - 4 b_0 (5 + 6 L_{30})))$$

```
Clear[a21, a31, b20, b30, b1, b2, b3, c0, c1, c2, c3, L20, L21, L31, L32]
```

□ Para que $\text{Det}(A)$ seja igual a $\text{Det}(B)$, basta considerarmos iguais os coeficientes de H^6 .

Vamos então calcular de forma genérica, tomando a igualdade dos coeficientes de H^6 , do $\text{Det}(A)$ e $\text{Det}(B)$ calculados sem a consideração das condições de ordem do método.

```
FullSimplify[Collect[Det[A], H]]
```

$$1 + (b_1 + a_{21} b_2 + a_{31} b_3) H^2 + b_3 H^6 L_{21} L_{32} - H^4 (b_2 L_{21} + b_3 (L_{31} + a_{21} L_{32}))$$

```
FullSimplify[Collect[Det[B], H]]
```

$$1 - (b_0 + a_{20} b_2 + a_{30} b_3 - c_0 + c_2 - a_{30} c_3 + b_{30} c_3) H^2 +$$

$$H^6 ((b_3 c_2 - b_2 c_3) (b_{30} L_{20} - (1 + a_{20}) L_{30}) +$$

$$((1 + a_{20}) (b_3 c_0 - b_0 c_3) + (-b_3 + c_3) L_{20}) L_{32}) +$$

$$H^4 ((1 + a_{20}) b_0 c_2 - b_2 ((1 + a_{20}) c_0 + (a_{30} + a_{20} a_{30} - a_{20} b_{30}) c_3 - L_{20}) -$$

$$c_2 L_{20} + c_3 (b_0 b_{30} - L_{30} + L_{32}) +$$

$$b_3 ((1 + a_{20}) a_{30} c_2 - b_{30} (c_0 + a_{20} c_2) + L_{30} + a_{20} L_{32}))$$

- ☐ ou seja, ao simplificarmos $(b_3 L_{21} L_{32}) - ((b_3 c_2 - b_2 c_3) (b_{30} L_{20} - b_{20} L_{30}) + (b_{20} b_3 c_0 - b_0 b_{20} c_3 - b_3 L_{20} + c_3 L_{20}) L_{32}) = 0$, obtemos a equação (3.57)

```
Simplify[Collect[b3 L21 L32 - ((b3 c2 - b2 c3) (b30 L20 - b20 L30) +
(b20 b3 c0 - b0 b20 c3 - b3 L20 + c3 L20) L32), L32]]
```

```
- (b3 c2 - b2 c3) (b30 L20 - b20 L30) +
(b20 (-b3 c0 + b0 c3) - c3 L20 + b3 (L20 + L21)) L32
```

- ☐ Para chegarmos na equação (3.60), apenas consideramos as condições de ordem do método com exceção de L_{32} , em (3.57)

```
a21 = 1 - a20; b20 = 1 + a20; L20 = 1/3 + 1/3 a20; L21 = 7/6 + 1/6 a20;
a31 = 1 - a30; b30 = 2 + a30; L31 = 11/3 + 5/6 a30 - 2 L30;
b1 = 9/8 - 3 b0; b2 = -11/12 + 3 b0; b3 = 7/24 - b0;
c0 = 3/8; c1 = 19/24; c2 = -5/24; c3 = 1/24;
```

```
Collect[FullSimplify[- (b3 c2 - b2 c3) (b30 L20 - b20 L30) +
(b20 (-b3 c0 + b0 c3) - c3 L20 + b3 (L20 + L21)) L32], L32]
```

```
- (1 + a20) (-13 + 48 b0) (2 + a30 - 3 L30) -
1/576 (-181 - 13 a20 + 48 (13 + a20) b0) L32
```

```
Clear[c1, b1, b11, A, b, bd, e, c, Na, M];
```

APENDICE 7.

APENDICE 6.

- ☐ Declaramos primeiramente os parâmetros do método:

```
c1 = 1/2; b1 = 1/2; b11 = 1;
```

```
A = {a};
b = {b1}; bd = {b11}; e = {1}; c = {c1}; Na = IdentityMatrix[1] + H^2 * A;
M = {{1 - H^2 * b.Inverse[Na].e, 1 - H^2 * b.Inverse[Na].c},
      {-H^2 * bd.Inverse[Na].e, 1 - H^2 * bd.Inverse[Na].c}};
```

☐ Aqui calculamos o Traço e o Determinante da matriz M

```
Tr[M]
```

$$2 - \frac{H^2}{1 + a H^2}$$

```
Det[M]
```

```
1
```

☐ E aqui calculamos o erro de dispensão do métodos

```
phi = H - ArcCos[Tr[M] / (2 * Sqrt[Det[M]])]; Simplify[Series[phi, {H, 0, 3}]]
```

$$\left(-\frac{1}{24} + \frac{a}{2}\right) H^3 + O[H]^4$$

```
Clear[c1, b1, b11, A, b, bd, e, c, Na, M];
```

APENDICE 7.

☐ Declaramos primeiramente os parâmetros do método:

```
b1 = b11 = 0; b2 = 1 / 2; b22 = 1; c2 = 1 / 2;
```



```

A = {{a, 0}, {a1, a}};
b = {b1, b2}; bd = {b11, b22}; e = {1, 1};
c = {c1, c2}; Na = IdentityMatrix[2] + H^2 * A;
M = {{1 - H^2 * b.Inverse[Na].e, 1 - H^2 * b.Inverse[Na].c},
     {-H^2 * bd.Inverse[Na].e, 1 - H^2 * bd.Inverse[Na].c}};
MatrixForm[
  M]

```

$$\begin{pmatrix} 1 - H^2 \left(-\frac{a1 H^2}{2 (1+a H^2)^2} + \frac{1}{2 (1+a H^2)} \right) & 1 - H^2 \left(-\frac{a1 c1 H^2}{2 (1+a H^2)^2} + \frac{1}{4 (1+a H^2)} \right) \\ -H^2 \left(-\frac{a1 H^2}{(1+a H^2)^2} + \frac{1}{1+a H^2} \right) & 1 - H^2 \left(-\frac{a1 c1 H^2}{(1+a H^2)^2} + \frac{1}{2 (1+a H^2)} \right) \end{pmatrix}$$

□ Calculamos o Traço e o Determinante da Matriz M

```
Simplify[Tr[M]]
```

$$\frac{4 + 2 (-1 + 4 a) H^2 + (-2 a + 4 a^2 + a1 + 2 a1 c1) H^4}{2 (1 + a H^2)^2}$$

```
Simplify[Det[M]]
```

$$1 + \frac{a1 (-1 + 2 c1) H^4}{2 (1 + a H^2)^2}$$

□ Calculamos erro de dispersão do método

```
F = H - ArcCos[Tr[M] / (2 * Sqrt[Det[M]])]; Simplify[Series[F, {H, 0, 3}]]
```

$$\left(-\frac{1}{24} + \frac{a}{2} + \frac{a1}{2} \right) H^3 + O[H]^4$$

Referências Bibliográficas

- [1] Brusa, L., Nigro, L. (1980), *A one step method for direct integration of structural dynamic equations*, Internal. J. Numer. Methods Engg., **15**, 685-699.
- [2] Burden, R.L., Faires, J.D. (1993), *Numerical Analysis*, PWS-KENT PUBLISHING COMPANY, Boston.
- [3] Caligares, A.M.S. (1996), *A Phase-lag e o Erro de Amplificação para Métodos de Runge-Kutta Explícitos*, Dissertação de Mestrado, UNESP, São José do Rio Preto-SP.
- [4] Calvo, M., Franco, J.M., Montijano, J.I., Randez, L. (1996). *Explicit Runge-Kutta methods for initial value problems with oscillating solutions*, J. Computer. and Appl. Math., **76**, 195-212.
- [5] Chawla, M.M., Al-Zanaid, M.A., Al-Ghonaim, S.S. (1999), *Singly -implicit stabilized extended one-step methods for second-order initial value problems with oscillating solutions*, Mathematical and Computer Modelling, **29**, 63-72.
- [6] Chawla, M.M., Al-Zanaid, M.A., Al-Sahhar, M.S. (1994), *Stabilized fourth order extended methods for the numerical solution of ODEs*, Internal. J. Computer. Math., **52**, 99-107.



- [7] Chawla, M.M., Al-Zanaid, M.A., Al-Sahhar, M.S. (1995), *A class of stabilized extended one-step methods for the numerical solution of odes.*, Computers and Math. with Applics., **29** (10), 79-84.
- [8] Chawla, M.M., Al-Zanaid, M.A.(1998), *Non-dissipative extended one-step methods for oscillatory problems*, Internal. J. Computer. Math., **69**, 85-100.
- [9] Fried, I. (1979), *Numerical Solution of Differential Equations*, Academic Press, New York.
- [10] Hairer, E. (1979), *Unconditionally stable methods for second-order differential equations*, Numer. Math. **32**, 373-379.
- [11] Hu, F.Q., Hussaini, M.Y., Manthey, J.L. (1996). *Low-dissipation and low-dispersion Runge-Kutta schemes for computations acoustics*, J. Comput. Phys., **124**, 177-191.
- [12] Lambert, J.D., Watson, I.A. (1976), *Symmetric multistep methods for periodic initial value problems*, J. Inst. Math. Applic. **18**, 189-202.
- [13] Lambert, J.D. (1991), *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem*, John Wiley, New York.
- [14] Meyer, H. D., Berghe, G. V., Hecker, T. V., Daele, M. V. (1997), *On the generation of mono-implicit Runge-Kutta-Nyström methods by mono-implicit Runge-Kutta methods*, Journal of Computational and Applied Mathematics, **87**, 147-167.
- [15] Sharp, P.W., Fine, J.M., Burrage, K. (1990), *Two-stage and three-stage diagonally implicit Runge-Kutta Nyström methods of orders three and four*, IMA J. Numer. Anal., **10**, 489-504.



- [16] Sideris, A.B., Simos, T.E. (1992), *A low-order embedded Runge-Kutta method for periodic initial value problems*, J. Comput. Appl. Math., **44**, 235-244.
- [17] Souza, P.C. de (2000), *Construção de Uma Classe de Métodos Estendidos de Passo-um para Problemas de Valor Inicial*, Dissertação de Mestrado, UNESP, São José do Rio Preto-SP.
- [18] Usmani, R.A., Agarwal, R.P. (1985), *An A-stable extended trapezoidal rule for the numerical integration of ordinary differential equations*, Computers Math. Applic., **11** (12), 1183-1191.
- [19] Van der Houwen, P.J., Sommeijer, B.P. (1987), *Explicit Runge-Kutta (Nyström) methods with reduced phase errors for computing oscillating solutions*, SIAM J. Numer. Anal., **24**, 595-617.
- [20] Van der Houwen, P.J., Sommeijer, B.P. (1989), *Phase-lag analysis of implicit Runge-Kutta methods*, SIAM J. Numer. Anal., **26**, 214-229.
- [21] Van der Houwen, P.J. and Sommeijer, B.P. (1989), *Diagonally Implicit Runge-Kutta-Nyström Methods for Oscillatory Problems*, SIAM J. Numer. Anal., **26**, 414-429.
- [22] Veríssimo, F.A. (1998), *Métodos Estendidos de Passo-um para Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias*, Dissertação de Mestrado, UNESP, São José do Rio Preto-SP.





unesp

