

Débora Andréa Pereira

Métodos Lineares Gerais: Dimsim





MÉTODOS LINEARES GERAIS:
DIMSIM

**MÉTODOS LINEARES GERAIS:
DIMSIM**

Debora Andrea Pereira

**Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada e
Computacional
MAC-024**

Dissertação apresentada ao DCCEN/UNESP como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências Matemáticas - Área de Concentração Matemática Aplicada e Computacional.



775/88

São José do Rio Preto, Abril de 1997

MÉTODOS LINEARES GERAIS: DIMSIM

Debora Andrea Pereira

Orientador Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins

Dissertação apresentada ao DCCE/IBILCE/UNESP como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências Matemáticas - Área de Concentração Matemática Aplicada e Computacional.



775/98

São José do Rio Preto, Abril de 1997.

13



ao meu filho Rafael , dedico.



aos meus pais, ofereço.

*Deus tirou o "um" do nada
para criar o "múltiplo".*

(Pitágoras)



Família

*A distância muitas vezes auxilia na reaproximação dos
entes queridos, quando de manso chega a saudade.
Na minha vida, desde a infância separei-me dos meus
familiares e hoje, uma dor no peito, vivo uma fantasia.
Faço dos meus sonhos uma viagem, onde converso,
abraço e beijo a minha amada mãe.
Ao invés do álcool, ofereço um copo de suco ou um chá para
irmã e cunhado: dou testemunho de uma família feliz
ao casal de sobrinhos quase separados.
Aproximo-me da irmã no passado rebelde, com um
abraço bem apertado e no olhar o meu amor e o dom de esquecer.
Chego aos lugares sempre na hora da festa e entrego um jarro
com o líquido sagrado, implorando um minuto de reflexão.
Vôo com um pássaro, transporto para outra cidade e
coloco no coração da outra irmã a compreensão.
Volto para meu lar: - calma, tranqüila e com o coração
cheio de alegrias -
Grito forte aos quatro cantos do amor.
Colhi o que plantei .
Neste momento Deus me acorda.*

(Maria José Pereira Guidolin)

Agradecimentos:

Primeiramente, ao Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins que com sabedoria, tolerância e paciência, orientou-me durante todas as fases deste trabalho e ao Prof. Dr. Norian Marranghello pela orientação inicial.

À Profa. Dra. Sandra Maria Ventureli Ferreira Dias e ao Prof. Dr. Trajano Pires da Nobrega Neto, pelo apoio e palavra amiga sempre empenhada.

À amiga Argélia Maria de Santis Caligares pelo companheirismo e incentivo aos estudos.

À CAPES e à Fundação Educacional de Votuporanga pelo apoio financeiro concedido em períodos do desenvolvimento deste trabalho, bem como ao Núcleo Central de Informática das Faculdades Integradas Riopretense, pelo apoio na reprodução e encadernação da dissertação.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Em especial, à Franciella Pereira Rodrigues prima dedicada, que sempre auxiliou-me nas tarefas relacionadas aos aspectos sociais e familiares.

RESUMO

O objetivo principal deste trabalho é apresentar a classe dos Métodos Lineares Gerais, conforme proposto por J. C. Butcher. Nessa classe de métodos exploramos a subclasse dos métodos DIMSIM, também propostos por Butcher, com preocupação para aspectos qualitativos e computacionais, tais como a estabilidade e o processamento em paralelo. São apresentados vários exemplos de métodos DIMSIM, construídos através de técnicas propostas na teoria.

ABSTRACT

The main objective of this work is to study the class of General Linear Methods as proposed by J. C. Butcher. In this class of methods we explore the subclass of DIMSIM methods, also proposed by Butcher, which is concerned with the qualitative and computational aspects, such as stability and parallel processing. We present several examples of DIMSIM methods developed through the techniques proposed in the theory.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO.....	1
1 PRELIMINARES	4
1.1 INTRODUÇÃO.....	4
1.2 TEORIA DE MATRIZES.....	4
2 MÉTODOS DE INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	10
2.1 INTRODUÇÃO.....	10
2.2 A CLASSE DOS MÉTODOS DE DISCRETIZAÇÃO.....	11
2.3 ALGUNS CONCEITOS QUALITATIVOS.....	13
3 MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA E LINEARES DE PASSO MÚLTIPLO	17
3.1 INTRODUÇÃO.....	17
3.2 MÉTODO DE RUNGE-KUTTA.....	18
3.3 ESTABILIDADE LINEAR.....	22
3.4 MÉTODOS LINEARES DE PASSO MÚLTIPLO.....	25
4 MÉTODO LINEAR GERAL	30
4.1 INTRODUÇÃO.....	30
4.2 MÉTODO LINEAR GERAL.....	30
4.3 O MÉTODO DE RUNGE-KUTTA COMO MÉTODO LINEAR GERAL.....	35
4.4 OS MÉTODOS LINEARES DE PASSO MÚLTIPLO COMO MÉTODO LINEAR GERAL.....	39
5 GENERALIZAÇÃO DO MÉTODO LINEAR GERAL	43
5.1 INTRODUÇÃO.....	43
5.2 OS MLG ($\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$) NA FORMA $(\bar{A}, \bar{B})$	43



5.3	GENERALIZAÇÃO DOS MÉTODOS $(\bar{A}, \bar{B})$	46
5.4	ESTABILIDADE LINEAR.....	50
6	MÉTODO DE INTEGRAÇÃO COM MÚLTIPLO ESTÁGIO E DIAGONALMENTE	
	IMPLÍCITO (DIMSIM)	53
6.1	INTRODUÇÃO.....	53
6.2	A CLASSE DOS MÉTODOS DIMSIM.....	54
6.3	CONDIÇÕES DE ORDEM.....	56
7	CONSTRUÇÃO DE ALGUNS MÉTODOS DIMSIM	61
7.1	INTRODUÇÃO.....	61
7.2	DIMSIM TIPO 1.....	61
7.3	DIMSIM TIPO 2.....	67
7.4	DIMSIM TIPO 3.....	70
7.5	DIMSIM TIPO 4.....	72
8	UMA CLASSE DE DIMSIM	73
8.1	INTRODUÇÃO.....	73
8.2	DIMSIM COM $r = s = p$	73
8.3	CONSTRUINDO DIMSIM TIPO 1 COM $r = s = p = 3$	78
9	CONSIDERAÇÕES FINAIS	85
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	89



INTRODUÇÃO

Dificuldades na determinação da solução exata de muitas equações diferenciais ordinárias, embora garantida sua existência e unicidade, quando fixada uma condição inicial, tem estimulado a utilização de técnicas que permitam gerar aproximações para a solução exata, com o menor esforço computacional possível. Assim, algumas classes de métodos tem se mostrado eficientes e estimulado novas investigações. Merecem destaque os Métodos lineares de passo múltiplo, de Runge-Kutta, Híbridos e os Pseudo-Runge-Kutta, entre outros. A abordagem teórica dessas classes de métodos numa mesma linguagem, conforme proposto por Butcher(1966) em [4], introduzindo a classe de Métodos Lineares Gerais, tem se constituído numa linha muito interessante de pesquisa e obtenção de resultados.

Neste trabalho, apresentaremos essa nova classe de métodos e mostraremos como os Métodos de Runge-Kutta e os Métodos lineares de passo múltiplo podem ser escritos como um Método Linear Geral. A seguir mostraremos como tais métodos podem ser considerados, analisando, segundo essa nova abordagem, os principais conceitos qualitativos relacionados com essas duas classes de métodos. Esse é o conteúdo dos quatro primeiros capítulos de nossa dissertação.

No capítulo 5, apresentaremos uma generalização da classe dos Métodos lineares gerais.



Atualmente, a procura de métodos de integração que possam se beneficiar da computação em paralelo tem sido uma linha importante de investigação. As dificuldades encontradas nesse tipo de implementação dos métodos clássicos já existentes, levou Butcher(1993) [6] a propor uma nova classe de métodos de integração, denominados *Métodos de integração numérica com múltiplo estágio e diagonalmente implícitos (DIMSIM)*. Como o nome sugere, esses métodos possuem uma estrutura muito semelhante à dos métodos de Runge-Kutta diagonalmente-implícitos, introduzidos por Roger(1977) [20].

Os métodos DIMSIM superam algumas desvantagens apresentadas pelos métodos de integração já existentes, tais como, o alto custo computacional dos Métodos de Runge-Kutta implícitos, a dificuldade apresentada por muitos métodos para se determinar uma estimativa para o erro de truncamento local e a utilização em problemas que apresentam saída densa. Podemos também mencionar a dificuldade em se trabalhar com Métodos lineares de passo múltiplo que tenham ordem elevada e sejam *A-estáveis*.

No capítulo 6 e 7, apresentaremos a classe dos DIMSIM, que podem subdividir-se em quatro subclasses, denominadas por Butcher de DIMSIM Tipo 1, Tipo 2, Tipo 3 e Tipo 4. Analisaremos os principais conceitos qualitativos relacionados com essa nova classe e apresentaremos os resultados de Butcher, em [6], [7] e [8], que mostram os procedimentos para obtenção desses métodos, sendo em determinados casos um mais conveniente que o outro. Para cada um dos quatro tipos de métodos DIMSIM construiremos um exemplo.



Considerando-se o trabalho de Christiano e Martins [11], mostraremos, no capítulo 8, dois procedimentos para obtenção de uma subclasse de DIMSIM Tipo 1, onde $r = s = p = 3$, sendo que num dos procedimentos iremos considerar resultados importantes mostrados por Butcher [6] e por Butcher e Jackiewicz [9].



CAPÍTULO 1

PRELIMINARES

1.1 INTRODUÇÃO

Apresentaremos, neste capítulo, alguns conceitos e resultados da teoria de matrizes, que serão utilizados no desenvolvimento deste trabalho.

1.2 TEORIA DE MATRIZES

Para toda matriz quadrada A de ordem n , as três sentenças abaixo são equivalentes:

- (i) $\det(A) = 0$.
- (ii) Existe $v \in \mathbb{C}^n$ não nulo, tal que $Av = \theta$, onde θ é o vetor nulo de $\mathbb{C}^n$.
- (iii) Existem $x, y \in \mathbb{C}^n$ com $x \neq y$ tal que $Ax = y$.



Definição 1.1 : Uma matriz $A_{n \times n}$, é dita ter **auto-valor** $\lambda \in \mathbb{C}$, se existir um vetor não nulo $v \in \mathbb{C}^n$ tal que $Av = \lambda v$. Dizemos que v será o **auto-vetor** de A associado a λ .

Definição 1.2 : Denominamos **spectrum** de A ao conjunto de todos os auto-valores de A e denotamos por $\sigma(A)$.

A relação $Av = \lambda v$ é equivalente à equação $(A - \lambda I)v = \theta$, que terá solução não-nula v se e, somente se:

$$\det(A - \lambda I) = 0. \quad (1.1)$$

Observe que $\det(A - \lambda I)$ é um polinômio de grau n em λ , denominado **polinômio característico** de A , que denotamos por $p(\lambda)$.

Ainda, a equação (1.1) é denominada **equação característica** de A .

Definição 1.3 : Denominamos **raio espectral** de $A_{n \times n}$ ao valor:

$$\rho(A) = \max_{\lambda_i \in \sigma(A)} |\lambda_i|.$$

Ao considerarmos numericamente um vetor $x \in \mathbb{C}^n$ torna-se geralmente necessária a utilização de um conceito de medida. Para isso torna-se fundamental o conceito que introduziremos a seguir.

Definição 1.4 : Para qualquer vetor $x \in \mathbb{C}^n$, denominamos de **norma de x** e denotamos $\|x\|$ ao número real que satisfaz às seguintes condições:

$$(i) \|x\| > 0 \text{ se } x \neq \theta \text{ e } \|\theta\| = 0,$$



(ii) para qualquer escalar λ e qualquer vetor x ,
 $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|$,

(iii) para quaisquer vetores x e y , $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

Podemos definir várias normas de um vetor, a mais usual é a norma Euclidiana, denotada por $\|\cdot\|_2$, e definida por $\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$, para $x = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n)^T$.

Outras normas também consideradas são:

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|,$$

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|.$$

Na verdade, podemos considerar essas três definições de norma como casos particulares de:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}, \quad p \geq 1.$$

De maneira análoga, podemos definir uma norma para matrizes quadradas de ordem n , associada a uma norma de vetor.

Definição 1.5 : Dada uma matriz $A_{n \times n}$, denominamos *norma de A subordinada a uma norma de vetor* e denotamos por $\|A\|$ o número real:

$$\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|.$$

Vale observar que o supremo é considerado sobre o conjunto de todos os vetores com norma unitária.



As mais usuais normas de uma matriz são:

$$\|A\|_1 = \max_{j=1}^n \sum_{i=1}^n |a_{ij}|, \quad (1.2a)$$

$$\|A\|_2 = \left(\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.2b)$$

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}| = \|A^T\|_1, \quad (1.2c)$$

onde A^T é a matriz transposta de A .

Neste trabalho, a menos que se faça necessário, não especificaremos a norma a que estamos nos referindo.

Teorema 1.6 : Para qualquer norma de matriz definida por (1.2), temos:

$$\rho(A) \leq \|A\|.$$

Corolário 1.7 : Para uma matriz $A_{n \times n}$ qualquer, $\rho(A) < 1$ se, e somente se, $\|A\| < 1$.

Definição 1.8 : Duas matrizes A e B são ditas *similares* se existir uma matriz não singular S tal que $A = SBS^{-1}$, ou equivalentemente, $B = S^{-1}AS$. A matriz S é denominada matriz da transformação de similaridade.

Pode ser facilmente verificado que o polinômio característico de A e B é o mesmo.

De fato, seja λ auto-valor e v um auto-vetor de A associado a λ . Então, $BS^{-1}v = S^{-1}Av = \lambda S^{-1}v$, isto é λ será também auto-valor de B e $S^{-1}v$ um auto-vetor associado.

Definição 1.9 : Uma matriz A é dita *convergente* se $\|A^m\|_\infty \rightarrow 0$ quando $m \rightarrow \infty$, ou seja, as potências de A são limitadas.

O Teorema que enunciaremos a seguir, nos fornece duas alternativas de condições necessárias e suficientes para a *convergência* de A .

Teorema 1.10 : Para toda matriz $A_{n \times n}$, as três sentenças são equivalentes:

- (i) A é *convergente*.
- (ii) $\rho(A) < 1$.
- (iii) Existe uma matriz B , *similar* a A tal que $\|B\|_\infty < 1$.

Definição 1.11 : Um polinômio P é dito satisfazer à *condição de raiz* se todas as suas raízes pertencerem ao disco unitário fechado e toda raiz não simples estiver no disco unitário aberto.

Definição 1.12 : Uma matriz A é *estável* se existir uma constante c tal que $\|A^m\|_\infty \leq c$ para todo $m = 1, 2, \dots$.

Podemos agora estabelecer condições necessárias e suficientes para que A seja estável.

Teorema 1.13 : Para toda matriz $A_{n \times n}$, as três sentenças são equivalentes:

- (i) A é *estável*.
- (ii) O *polinômio minimal* de A satisfaz à condição de raiz.
- (iii) Existe uma matriz B , *similar* a A , tal que $\|B\|_\infty < 1$.



Registramos que o conceito de polinômio minimal, não definido neste capítulo, pode ser encontrado por exemplo em Butcher[5], p. 10.

Um produto interessante entre matrizes, que será utilizado neste trabalho é o que a seguir definiremos.

Definição 1.14 : Sejam $A_{n \times n}$ e $B_{m \times m}$, matrizes quaisquer, definimos *produto direto entre A e B*, denotado por $A \otimes B$, à matriz de ordem $mn \times mn$, dada por:

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}B & a_{n2}B & \cdots & a_{nn}B \end{pmatrix} \quad (1.3)$$



CAPÍTULO 2

MÉTODOS DE INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

2.1 INTRODUÇÃO

Equações Diferenciais Ordinárias aparecem freqüentemente em diversas áreas, tais como: mecânica de fluidos, simulação de circuitos elétricos, fluxo de calor, reações químicas e nucleares, etc.... Sabemos que para muitas equações diferenciais, embora tenhamos garantia de existência da solução, esta não pode ser conhecida analiticamente.

Devido a essa dificuldade, a utilização de técnicas numéricas, que permitem gerar aproximações para a solução exata da equação diferencial é um procedimento bastante considerado.

Neste capítulo, apresentaremos uma formulação para os métodos de integração numérica, conforme proposto por Lambert[16], bem como os principais conceitos qualitativos a eles relacionados.



2.2 A CLASSE DOS MÉTODOS DE DISCRETIZAÇÃO

Consideremos o problema de valor inicial (pvi):

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y), \\ y(a) &= \eta,\end{aligned}\tag{2.1}$$

com $f: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $\eta = ({}^1\eta, {}^2\eta, \dots, {}^m\eta)^T$ cuja solução $y(x)$ admitiremos existir de maneira única no intervalo $[a, b]$, isto é, valem as hipóteses do teorema que enunciaremos a seguir.

Teorema 2.1 : Sejam $f: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ definida e contínua em $D = \{(x, y) \mid a \leq x \leq b, -\infty < {}^t y < +\infty, t = 1(1)m, \text{ com } a \text{ e } b \text{ finitos}\}$ e L constante tal que :

$$\|f(x, y) - f(x, y^*)\| \leq L \|y - y^*\|,\tag{2.2}$$

acontece para todo (x, y) e (x, y^*) em D .

Então, para todo $\eta \in \mathbb{R}^m$ existe uma única solução $y(x)$ para o pvi (2.1), contínua e diferenciável em D .

A condição (2.1) é conhecida como *condição de Lipschitz* e L é a *constante de Lipschitz*.

O pvi dado por (2.2) pode também ser representado na sua forma autônoma, ou seja:

$$\begin{aligned}y' &= f(y), \\ y(a) &= y_0,\end{aligned}\tag{2.3}$$

com $f: \mathbb{R}^{m+1} \rightarrow \mathbb{R}^{m+1}$.

A utilização de técnicas numéricas para obtenção de aproximações para a solução de (2.1) ou (2.3) requer que o intervalo



contínuo $[a, b]$ seja discretizado, ou seja, dele será considerado apenas um conjunto discreto de pontos $\{x_n\}$ definidos por $x_n = a + nh$, $n=0(1)N$, para $N = \frac{b-a}{h}$. O parâmetro h é denominado **argumento ou tamanho do passo**. Podemos também considerar o tamanho do passo, variando a cada uma ou mais integrações.

Denotaremos por y_n a toda aproximação para a solução exata $y(x)$ de (2.1) ou (2.3) nos pontos $x = x_n$, ou seja $y_n \approx y(x_n)$.

Vamos aqui considerar métodos numéricos dados na forma de uma equação de diferenças, envolvendo um número de aproximações consecutivas y_{n+j} , $j = 0(1)k$ para $k \in \mathbb{N}^*$, onde as k primeiras aproximações estão disponíveis e y_{n+k} é a aproximação a ser determinada através da equação de diferenças. O valor de k define o número de passos do método, assim se $k=1$ teremos métodos ditos de passo um, se $k > 1$ métodos de passo múltiplo ou simplesmente passo- k .

Podemos representar tais métodos numa forma geral:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \phi_f(y_{n+k}, y_{n+k-1}, \dots, y_n, x_n; h), \quad (2.4)$$

onde ϕ_f é uma expressão que, através da função $f(x, y)$ depende de $y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+k}$ e de x_n .

Dentre as classes de métodos de integração numérica dadas por (2.4), duas são bastante consideradas, a dos métodos de Runge-Kutta e a dos métodos Lineares de Passo Múltiplo ou Passo- k . Para cada uma delas temos, hoje, uma teoria qualitativa bem elaborada. Vamos



apresentar, a seguir, os principais conceitos e resultados envolvendo essas duas classes de métodos, definidos por (2.4).

2.3 ALGUNS CONCEITOS QUALITATIVOS

Consideremos a solução numérica do pvi (2.1), obtida através de um método definido por (2.4), considerando-se valores iniciais adequados. Isto é, a solução é obtida utilizando:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \phi_f(y_{n+k}, y_{n+k-1}, \dots, y_n, x_n; h), \quad (2.5a)$$

$$y_i = \eta_i(h), \quad i = 0(1)(k-1). \quad (2.5b)$$

Definição 2.2: Dizemos que um método definido por (2.5) é *convergente*, se para todo pvi satisfazendo às hipóteses do Teorema 2.1 temos que:

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ x=a+nh}} y_n = y(x),$$

acontece para todo $x \in [a, b]$ e toda solução $\{y_n\}$ de (2.5), com $\lim_{h \rightarrow 0} \eta_i(h) = \eta$ para $i = 0(1)(k-1)$.

Alternativamente, podemos dizer que o método (2.5) é convergente se, para todo pvi satisfazendo às hipóteses do Teorema 2.1 temos que $\max_{0 \leq n \leq N} \|y(x_n) - y_n\| \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow 0$.

Observe que a convergência é uma propriedade bastante forte, que pode ser satisfeita pelo método e independe do pvi onde é aplicado. Porém, a verificação da convergência a partir da definição ou da opção alternativa apresenta dificuldades.



Vamos então introduzir alguns conceitos que permitem, de forma prática, avaliar a convergência.

Definição 2.3 : Denomina-se *erro de truncamento local* do método definido por (2.5) em $x = x_{n+k}$, ao valor residual R_{n+k} definido por:

$$R_{n+k} = \sum_{j=0}^k \alpha_j y(x_{n+j}) - h \phi_f(y(x_{n+k}), y(x_{n+k-1}), \dots, y(x_n), x_n; h). \quad (2.6)$$

Pensando na convergência do método (2.5) devemos esperar que $R_{n+k} \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow 0$. Porém, adiantamos que apenas essa condição não nos garantirá a convergência.

Definição 2.4 : O método (2.5) é dito ser *consistente* se, para todo pvi satisfazendo às hipóteses do Teorema 2.1 tivermos:

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ x=a+nh}} \frac{1}{h} R_{n+k} = 0. \quad (2.7)$$

Conforme Lambert [16], p.28, a condição (2.7) se verifica quando:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0, \quad (2.8a)$$

e

$$\phi_f(y(x_n), y(x_n), \dots, y(x_n), x_n; 0) / \left(\sum_{j=0}^k j \alpha_j \right) = f(x_n, y(x_n)). \quad (2.8b)$$

Definição 2.5 : Sejam δ_n e δ_n^* , $n = 0(1)N$ perturbações quaisquer de (2.1), com z_n e z_n^* as respectivas soluções perturbadas. Dizemos que o método (2.5) é *zero-estável* se existem constantes S e h_0 tal que para todo $h \in (0, h_0]$ tivermos:



$$\|z_n - z_n^*\| \leq S\varepsilon,$$

sempre que $\|\delta_n - \delta_n^*\| \leq \varepsilon, \quad n = 0(1)N.$

A partir da expressão que aparece no lado esquerdo de (2.5a) podemos definir o polinômio:

$$\rho(\xi) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^j, \quad (2.9)$$

denominado *primeiro polinômio característico* do método.

Daí, considerando (2.8), facilmente, concluímos que uma condição necessária e suficiente para que o método (2.5) seja *consistente* é:

$$\rho(1) = 0, \quad (2.10a)$$

$$\phi_f(y(x_n), y(x_n), \dots, y(x_n), x_n; 0) / \rho'(1) = f(x_n, y(x_n)). \quad (2.10b)$$

Definição 2.6 : O método (2.5) é dito satisfazer à *condição de raiz*, se todas as raízes de $\rho(\xi)$ tiverem módulo menor ou igual a 1 e aquelas de módulo 1 forem simples.

Teorema 2.7 : Uma condição necessária e suficiente para o método (2.5) ser *zero-estável*, quando aplicado a um pvi que satisfaz à condição de Lipschitz, é que ele satisfaça à condição de raiz.

A partir dos conceitos de zero-estabilidade e de consistência, que conforme podemos constatar através dos conceitos e resultados aqui introduzidos, são de fácil verificação, podemos estabelecer uma condição necessária e suficiente para a convergência (definição 2.2) de um método de discretização dado por (2.5).



Teorema 2.8 : Uma condição necessária e suficiente para a *convergência* do método (2.5) é que ele seja consistente e zero-estável.



CAPÍTULO 3

MÉTODOS DE RUNGE - KUTTA E LINEARES DE PASSO MÚLTIPLO

3.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo, introduziremos duas importantes classes de métodos da forma definida em (2.5), os métodos de Runge-Kutta e os métodos lineares de passo múltiplo.

Para cada uma dessas classes, analisaremos os conceitos qualitativos introduzidos no capítulo anterior, agora ajustados convenientemente.



3.2 MÉTODO DE RUNGE-KUTTA

Os métodos de Runge - Kutta constituem uma das classes de métodos de passo um, definidos através de (2.5), onde $k = 1, \alpha_1 = 1, \alpha_0 = -1$ e $\phi_f(y_n, x_n; h) = \sum_{i=1}^s b_i k_i$.

Assim, podemos formalmente defini-los como segue, quando aplicados a (2.1).

Definição 3.1 : Denominamos de método de Runge-Kutta (MRK) com s estágios a todo método de passo um dado por:

$$k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), \text{ para } i = 1(1)s, \quad (3.1a)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j k_j, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.1b)$$

onde $c_i, a_{ij}, b_i \in \mathfrak{R}$ e y_{n+1} são aproximações para $y(x)$ em $x = x_n + c_i h$, com:

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad (3.2a)$$

e

$$0 \leq c_i \leq 1 \text{ para } i = 1(1)s. \quad (3.2b)$$

Observe que, se considerarmos o pvi na forma autônoma (2.3), podemos obter uma representação equivalente para o MRK definido por (3.1) como:



$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j), i = 1(1)s, \quad (3.3a)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(Y_j), n = 0,1,2,\dots, \quad (3.3b)$$

Podemos caracterizar um MRK através de seus coeficientes c_i, a_{ij} e b_i , considerando uma forma matricial, devida a Butcher:

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array} \quad (3.4a)$$

ou então, se definirmos as matrizes $c = (c_i)^T$, $A^* = (a_{ij})$ e $b^T = (b_i)$, com, $j=1(1)s$, os coeficientes do MRK podem ser matricialmente representados por:

$$\begin{array}{c|c} c & A^* \\ \hline & b^T \end{array} \quad (3.4b)$$

Podemos subdividir os MRK em subclasses, em função dos valores assumidos pelos coeficientes da matriz A^* . Isto é, dizemos que um MRK é:

- *Explícito* se $a_{ij} = 0$, para $j \geq i$, $j=1(1)s$, ou seja, a matriz A^* é estritamente triangular inferior.

- *Semi-implícito* se $a_{ij} = 0$, para $j > i$, $j=1(1)s$, ou seja, quando A^* for triangular inferior.

- **Implícito** quando $a_{ij} \neq 0$, para algum $j \geq i$, $j = 1(1)s$, isto é: a matriz A^* não é estritamente triangular inferior.

Alguns autores consideram uma classe especial de métodos semi-implícitos quando $a_{ij} = 0$, para $j > i$, $j = 1(1)s$, e $a_{ii} = \lambda (\lambda \in \mathbb{R})$, $i = 1(1)s$, denominados métodos de Runge-Kutta **diagonalmente implícitos** (DIRK).

Da Definição 2.3, concluímos que o **erro de truncamento local**, de um método de Runge-Kutta em $x = x_{n+1}$ nada mais é do que o valor:

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

com $\phi_f(y(x_{n+1}), y(x_n), x_n; h) = \sum_{i=1}^s b_i k_i$, isto é, k_i definido por (3.1a) mas considerando-se $y_n = y(x_n)$.

Definição 3.2 : Seja p um número inteiro e positivo. Dizemos que um MRK tem **ordem de consistência** p , se este for o maior inteiro positivo tal que:

$$T_{n+1} = O(h^{p+1}).$$

Ainda, dizemos que um MRK é **consistente** com pvi satisfazendo às hipóteses do Teorema 2.1, se $p \geq 1$.

Considerando-se as condições de consistência dadas em (2.8), facilmente podemos concluir que um MRK será **consistente** se, e somente se:

$$\phi_f(y(x_n), y(x_n), x_n; 0) = f(x_n, y(x_n)),$$

o que é equivalente a:



$$\sum_{i=1}^s b_i = 1. \quad (3.5)$$

Por hipótese vamos sempre trabalhar com MRK em que (3.5) é satisfeita, isto é, estaremos sempre trabalhando com métodos consistentes.

Vamos admitir que em $x = x_n$ tenhamos a hipótese local $y_n = y(x_n)$ e anotar por $\tilde{y}_{n+1}$ à aproximação daí gerada pelo MRK para $y(x_{n+1})$.

Logo, podemos reescrever o *erro de truncamento local* como:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Neste caso, para alguns autores, o erro de truncamento local é simplesmente denominado *erro local*.

É importante observar que o *primeiro polinômio característico* de um MRK será sempre dado por:

$$\rho(\xi) = \xi - 1.$$

Logo, os MRK sempre satisfazem à *condição de raiz* (definição 2.6) e portanto serão sempre *zero-estáveis* (definição 2.5). Daí, podemos concluir que os MRK serão *convergentes* quando (3.5) se verifica.

Um MRK terá ordem p , se satisfizer a um conjunto de condições, denominadas *condições de ordem*. Por exemplo, as seguintes equações definem condições de ordem:

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1, \quad (3.6a)$$



$$\sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2}, \quad (3.6b)$$

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \quad (3.6c)$$

$$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}. \quad (3.6d)$$

Sabemos que (3.6a) define a classe dos métodos com ordem 1 e, se em adição também se verificar (3.6b) garantimos ordem 2 ao método. Incluindo (3.6c) e (3.6d) teremos a classe de métodos de Runge-Kutta com ordem 3.

Para alcançarmos ordem 4, além das condições (3.6) outras quatro condições se fazem necessárias. Se desejarmos garantia de ordem 5, além dessas oito, mais nove condições serão necessárias. Isto nos mostra que a obtenção de métodos de Runge-Kutta tem um grau de complexidade que cresce com p .

3.3 ESTABILIDADE LINEAR

A fim de desenvolver, para os MRK, alguns conceitos da teoria da estabilidade linear, vamos considerar a equação escalar teste:

$$y' = \lambda y, \quad (3.7)$$

onde $\lambda \in \mathbb{C}$ e $\text{Re}(\lambda) < 0$ cuja solução exata será $y(x) = e^{\lambda x}$.

Aplicando o MRK dado por (3.1) ao problema teste (3.7) obtemos uma equação de diferenças da forma $y_{n+1} = R(z)y_n$, onde $z = \lambda h$.



$R(z)$ é denominada *função de estabilidade* do método. Ainda, $y_n \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$ se e, somente se:

$$|R(z)| < 1. \quad (3.8)$$

Os valores de z para os quais (3.8) ocorre definirão a região do plano complexo onde o MRK é dito ser *absolutamente estável*, que anotaremos por $\mathfrak{R}_A$.

A fim de investigar como se expressa matematicamente $R(z)$ consideremos a aplicação do MRK escrito na forma (3.3) ao problema teste (3.7), obtendo:

$$\begin{cases} Y_i = y_n + z \sum_{j=1}^s a_{ij} Y_j, & \text{para } i = 1(1)s, \\ y_{n+1} = y_n + z \sum_{i=1}^s b_i Y_i, & n = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (3.9)$$

Definindo $Y = (Y_1 \ Y_2 \ \dots \ Y_s)^T$ e $\hat{e} = (1 \ \dots \ 1)^T \in \mathfrak{R}^s$, podemos reescrever (3.9) na forma:

$$Y = y_n \hat{e} + z A^* Y, \quad (3.10a)$$

$$y_{n+1} = y_n + z b^T Y, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.10b)$$

Resolvendo (3.10a) com relação a Y e substituindo em (3.10b) obtemos:

$$y_{n+1} = [1 + z b^T (I - z A^*)^{-1} \hat{e}] y_n, \quad (3.11)$$

onde I é a matriz identidade $s \times s$.

De (3.11) concluímos que a *função de estabilidade* do MRK é dada por:



$$R(z) = [1 + zb^T(I - zA^*)^{-1}\hat{e}]. \quad (3.12)$$

Uma forma alternativa para $R(z)$ é construída por Dekker e Verwer(1984) em [12], que será a seguir ilustrada considerando a classe dos MRK com $s = 2$ estágios.

Podemos escrever (3.9) como:

$$\begin{cases} Y_1 = y_n + z(a_{11}Y_1 + a_{12}Y_2), \\ Y_2 = y_n + z(a_{21}Y_1 + a_{22}Y_2), \\ y_{n+1} = y_n + z(b_1Y_1 + b_2Y_2), \end{cases}$$

e daí, numa forma equivalente:

$$\begin{cases} (1 - za_{11})Y_1 - za_{12}Y_2 = y_n, \\ -za_{21}Y_1 + (1 - za_{22})Y_2 = y_n, \\ -zb_1Y_1 - zb_2Y_2 + y_{n+1} = y_n. \end{cases} \quad (3.13)$$

Usando notação matricial, podemos reescrever (3.13) como:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 - za_{11} & -za_{12} & 0 \\ -za_{21} & 1 - za_{22} & 0 \\ -zb_1 & -zb_2 & 1 \end{pmatrix}}_B \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ y_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n \\ y_n \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Supondo que $D = \det(B) \neq 0$, pela regra de Cramer podemos determinar y_{n+1} , ou seja, $y_{n+1} = \frac{N}{D}$ onde:

$$N = \det \begin{pmatrix} 1 - za_{11} & -za_{12} & y_n \\ -za_{21} & 1 - za_{22} & y_n \\ -zb_1 & -zb_2 & y_n \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 - za_{11} + zb_1 & -za_{12} + zb_2 & 0 \\ -za_{21} + zb_1 & 1 - za_{22} + zb_2 & 0 \\ -zb_1 & -zb_2 & y_n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 - za_{11} + zb_1 & -za_{12} + zb_2 \\ -za_{21} + zb_1 & 1 - za_{22} + zb_2 \end{vmatrix} y_n.$$

$$\text{Isto é: } N = \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - z \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ b_1 & b_2 \end{pmatrix} \right| y_n.$$

Concluindo-se que $N = \det(I - zA^* + z\hat{e}b^T)y_n$.

Num processo análogo, temos que $D = \det(I - zA^*)y_n$.

Logo, pode-se concluir que:

$$R(z) = \frac{\det(I - zA^* + z\hat{e}b^T)}{\det(I - zA^*)}. \quad (3.14)$$

Do raciocínio desenvolvido podemos concluir que $R(z)$ pode ser definida por (3.14) para s estágios ($s \geq 2$), como uma expressão equivalente a (3.12). No entanto, em (3.14) não há necessidade de se determinar $(I - zA^*)^{-1}$. As expressões (3.12) e (3.14), são ambas aplicáveis para determinar a região de estabilidade absoluta do método, onde, dependendo da situação, uma pode ser mais conveniente que a outra.

3.4 MÉTODOS LINEARES DE PASSO MÚLTIPLO

Vamos agora analisar uma outra classe de métodos de integração numérica, definida através de (2.5) com $k > 1$, denominados Métodos Lineares de Passo Múltiplo ou alternativamente Métodos Lineares de Passo k . Devemos lembrar que nos Métodos Lineares de Passo k (MLPK) precisamos de algum modo dispor das aproximações

$y_0, y_1, \dots, y_{k-1}$. Usando a notação $f_{n+j} = f(x_{n+j}, y_{n+j})$, $j = 0(1)k$, para os MLPK temos em (2.5) que:

$$\phi_f(y_{n+k}, \dots, y_n, x_n; h) = \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j}. \quad (3.15)$$

Podemos reescrever (2.4) por:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j}, \quad (3.16)$$

onde α_j e β_j são constantes. Vamos também considerar, neste trabalho, $\alpha_k = 1$ e lembramos que para garantirmos que o método tenha k passos devemos considerar:

$$|\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0.$$

Quando $\beta_0 = 0$, o MLPK será denominado explícito, caso contrário implícito.

Por conveniência, dependendo da situação, vamos considerar como aproximação final y_{n+1} e então, $y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k+1}$ serão as aproximações iniciais.

Para a classe de MLPK dados por (3.15) vamos verificar alguns conceitos qualitativos.

Definição 3.3 : Definimos por *operador diferencial linear* L associado ao MLPK (3.15) o operador definido por:

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

onde por hipótese admitiremos que $z(x)$ é qualquer função suficientemente derivável, para todo $x \in [a, b]$.



Considerando os desenvolvimentos numa vizinhança de x de $z(x+jh)$ e $z'(x+jh)$ em série de Taylor, e agrupando-se convenientemente em função das derivadas para $j=1(1)k$ obtemos:

$$L[z(x);h] = C_0 z(x) + C_1 h z^{(1)}(x) + C_2 h^2 z^{(2)}(x) + \dots + C_q h^q z^{(q)}(x) + \dots, \quad (3.17)$$

com C_q assumindo valores constantes dados por:

$$C_0 = \sum_{j=0}^k \alpha_j, \quad (3.18a)$$

$$C_1 = \sum_{j=0}^k j \alpha_j - \sum_{j=0}^k \beta_j, \quad (3.18b)$$

$$C_q = \sum_{j=0}^k \left[\frac{1}{q!} j^q \alpha_j - \frac{1}{(q-1)!} j^{q-1} \beta_j \right], \quad q=2,3,\dots. \quad (3.18c)$$

Definição 3.4 : Denominamos *erro de truncamento local* do MLPK em $x = x_{n+k}$ ao valor $L[y(x_{n+k});h]$, onde $y(x)$ é a solução exata do pvi (2.1).

$$\text{Note que se } \sum_{j=0}^k \alpha_j y(x_n + h) = h \sum_{j=0}^k \beta_j y'(x_n + jh) + L[y(x_{n+k});h],$$

podemos concluir que neste caso, o resíduo R_{n+k} definido em (2.6) será dado por $R_{n+k} = L[y(x_{n+k});h]$.

Definição 3.5 : Dizemos que um MLPK é *consistente* se tiver ordem $p \geq 1$.

Definição 3.6 : Dizemos que o MLPK associado ao operador diferença linear $L[z(x);h]$ terá *ordem* p se $C_0 = C_1 = \dots = C_p = 0$ e $C_{p+1} \neq 0$. Ainda, a constante C_{p+1} , denomina-se *constante de erro* do MLPK.

De (3.17), observamos que um MLPK será *consistente* se, e somente se:

$$C_0 = C_1 = 0. \quad (3.19)$$

Daí, considerando-se (3.18a), (3.18b) e (3.19), podemos facilmente concluir que uma condição necessária e suficiente para que o método seja *consistente* é :

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0, \quad (3.20a)$$

e

$$\sum_{j=0}^k j \alpha_j = \sum_{j=0}^k \beta_j. \quad (3.20b)$$

De (2.9) temos que o *primeiro polinômio característico* de um MLPK é dado por:

$$\rho(\xi) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^j. \quad (3.21a)$$

Para os MLPK torna-se interessante definir um outro polinômio, denominado de *segundo polinômio característico*, dado por:

$$\sigma(\xi) = \sum_{j=0}^k \beta_j \xi^j. \quad (3.21b)$$

Considerando-se (3.21), podemos obter uma condição necessária e suficiente para que um MLPK seja *consistente*, dada pelo resultado a seguir.

Teorema 3.7 : O MLPK dado em (3.16) é dito ser *consistente* se, e somente se:

$$\rho(1) = 0 \quad \text{e} \quad \rho'(1) = \sigma(1).$$

Observe que, para métodos consistentes se $\sigma(1) = 0$ teremos $\rho'(1) = \rho(1)$. Logo, o método não satisfaz à condição de raiz (definição 2.6), portanto não será zero-estável. Daí, se $\sigma(1) \neq 0$, podemos concluir que o MLPK dado em (3.16) será sempre *zero-estável*.

Enunciaremos um resultado fundamental para os MLPK, cuja demonstração pode ser encontrado em [16].

Teorema 3.8 : Um MLPK será *convergente* se for consistente e zero-estável.

Observe que, a consistência é uma condição necessária mas não suficiente para a convergência.



CAPÍTULO 4

MÉTODO LINEAR GERAL

4.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo apresentaremos uma classe de métodos numéricos para a integração de (2.1), definidos por Butcher em [4] e [5], por ele denominados Métodos Lineares Gerais. Conforme mostraremos a seguir, essa classe contém, entre outras, as dos Métodos Lineares de Passo Múltiplo (MLPK) e dos Métodos de Runge-Kutta (MRK). Analisaremos os principais conceitos qualitativos relacionados com essa nova classe de métodos, mostrando a possibilidade de se considerar numa só abordagem teórica os MRK e os MLPK.

4.2 MÉTODO LINEAR GERAL

Para a integração numérica de problemas de valor inicial definidos por (2.3), num intervalo onde se tem garantia da existência e



unicidade da solução $y(x)$, podemos considerar a classe de métodos que a seguir definiremos.

Definição 4.1 : Sejam $\hat{A} = (\hat{a}_{ij})$, $\hat{B} = (\hat{b}_{ij})$ e $\hat{C} = (\hat{c}_{ij})$ matrizes quadradas de ordem N . Definimos por Método Linear Geral (MLG) a todo método numérico para a obtenção de aproximações $y_i^{[n]}$ para a solução de um pvi dado por (2.3), dados por:

$$y_i^{[n]} = \sum_{j=1}^N \hat{a}_{ij} y_j^{[n-1]} + h \sum_{j=1}^N \hat{b}_{ij} f(y_j^{[n]}) + h \sum_{j=1}^N \hat{c}_{ij} f(y_j^{[n-1]}), \quad i = 1(1)N, \quad (4.1)$$

onde $y_i^{[n]}$ são aproximações para $y(x)$ no n -ésimo passo de integração e $y_j^{[n-1]}$ são aproximações do passo anterior. Observe que um MLG pode ser caracterizado pelas matrizes $\hat{A}$, $\hat{B}$ e $\hat{C}$. Assim, por conveniência, vamos anotar um MLG dado por (4.1) como um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$. Ainda, quando tivermos $\hat{C} = \theta$ podemos identificar o método simplesmente por $(\hat{A}, \hat{B})$.

Definindo $Y_n = (y_1^{[n]} \dots y_N^{[n]})^T$ podemos escrever (4.1) na forma:

$$Y_n = (A \otimes I)Y_{n-1} + h(B \otimes I)F(Y_n) + H(C \otimes I)F(Y_{n-1}),$$

para " $\otimes$ " definido por (1.3).

Definição 4.2 : (Butcher [5]) Um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ é *estável* se a matriz $\hat{A}$ é estável (Definição 1.12).

Podemos enunciar, através do teorema que enunciaremos a seguir, uma condição necessária e suficiente para que o método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ seja estável.

Teorema 4.3 : Um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ é *estável* se, e somente se, o polinômio característico da matriz $\hat{A}$ não tiver raiz com valor absoluto, maior do que um e as de tamanho um são simples.

Definição 4.4 : Um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ é dito ser *pré-consistente* se:

$$\hat{A}\hat{e} = \hat{e},$$

onde $\hat{e}$ é o vetor de dimensão N com valor 1 em cada uma de suas componentes.

Se, em adição, para algum vetor $v \in \mathbb{R}^N$ tivermos:

$$\hat{A}v + (\hat{B} + \hat{C})\hat{e} = v + \hat{e},$$

o método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ será *consistente*.

Vale observar que o vetor v é conhecido como *vetor de consistência* do método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$.

Podemos verificar que a *pré-consistência* nos permite assumir que a aproximação gerada a cada passo pelo MLG, bem representa para a da equação escalar

$$y' = 0, \quad (4.2a)$$

sua solução exata:

$$y(x) = 1. \quad (4.2b)$$

Para simplificar a constatação dessa observação, vamos considerar um MLG com $N = 2$, isto é:

$$\begin{pmatrix} y_1^{[n]} \\ y_2^{[n]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{11} & \hat{a}_{12} \\ \hat{a}_{21} & \hat{a}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1^{[n-1]} \\ y_2^{[n-1]} \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \hat{b}_{11} & \hat{b}_{12} \\ \hat{b}_{21} & \hat{b}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(y_1^{[n]}) \\ f(y_2^{[n]}) \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \hat{c}_{11} & \hat{c}_{12} \\ \hat{c}_{21} & \hat{c}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(y_1^{[n-1]}) \\ f(y_2^{[n-1]}) \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Pela equação (4.2a) temos que $f(y_1^{[n]}) = f(y_2^{[n]}) = f(y_1^{[n-1]}) = f(y_2^{[n-1]}) = 0$ e pela equação (4.2b) $y_1^{[n]} = y_2^{[n]} = y_1^{[n-1]} = y_2^{[n-1]} = 1$. Logo, teremos (4.3) dado por:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{11} & \hat{a}_{12} \\ \hat{a}_{21} & \hat{a}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Logo, podemos reescrever (4.4) usando notação matricial como

$$\hat{A}\hat{e} = \hat{e} \quad (4.5)$$

De maneira análoga, podemos constatar que a consistência nos permite assumir que cada aproximação $y_i^{[n]}$ representa num ponto próximo de x_n , por exemplo $x_n + c_i h$, com $0 < c_i \leq 1$, para a equação:

$$y' = 1, \quad (4.6a)$$

a solução exata:

$$y(x) = x \quad (4.6b)$$

Considerando-se que $y_1^{[n]} = x_n + c_1 h$, $y_2^{[n]} = x_n + c_2 h$ e as equações (4.6a) e (4.6b), podemos reescrever (4.3), como:

$$\begin{pmatrix} x_n + c_1 h \\ x_n + c_2 h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{11} & \hat{a}_{12} \\ \hat{a}_{21} & \hat{a}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{n-1} + c_1 h \\ x_{n-1} + c_2 h \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} b'_{11} & b'_{12} \\ b'_{21} & b'_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

onde $b'_{ij} = \hat{b}_{ij} + \hat{c}_{ij}$, $i, j = 1, 2$.

Observe que podemos convenientemente reescrever (4.7) como:

$$\begin{cases} c_1 h = \hat{a}_{11}(x_{n-1} - x_n) + \hat{a}_{11}c_1 h + \hat{a}_{12}(x_{n-1} - x_n) + \hat{a}_{12}c_2 h + h(b'_{11} + b'_{12}) \\ c_2 h = \hat{a}_{21}(x_{n-1} - x_n) + \hat{a}_{21}c_2 h + \hat{a}_{22}(x_{n-1} - x_n) + \hat{a}_{22}c_2 h + h(b'_{21} + b'_{22}) \end{cases}$$

que é equivalente a:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{11} & \hat{a}_{12} \\ \hat{a}_{21} & \hat{a}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 - 1 \\ c_2 - 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b'_{11} & b'_{12} \\ b'_{21} & b'_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Daí, usando (4.5) podemos reescrever (4.8) numa forma matricial como:

$$\hat{A}v + (\hat{B} + \hat{C})\hat{e} = v + \hat{e}, \quad (4.9)$$

onde $v = (c_1 \quad c_2)^T$.

Um outro conceito qualitativo importante, que pode ser considerado para a classe dos MLG é a **convergência**, pois nos permite avaliar quão bem a solução numérica representa a solução exata quando o número de passos de integração cresce. Considerando-se o pvi dado em (2.3) e o vetor Y_0 cujas componentes são os valores iniciais $y_1^{[0]}, y_2^{[0]}, \dots, y_N^{[0]}$, podemos defini-la.

Definição 4.5 : Um MLG dado por (4.1) é **convergente para o pvi (2.3)** sobre $[a, b]$ se, para qualquer $x_0, x \in [a, b]$ e para $Y_0(h)$ tal que $\|y_i^{[0]}(h) - y(x_0)\| \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow 0$ para $i=1(1)N$, pudermos garantir que $\|y_i^{[n]}((x - x_0)/n) - y(x)\| \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty, i=1(1)N$.

Definição 4.6 : Um MLG é dito ser **convergente**, se ele for convergente sobre qualquer intervalo e qualquer pvi satisfazendo à condição de Lipschitz.

Teorema 4.7 : Um MLG é **convergente** se e, somente se for consistente e estável.

4.3 O MÉTODO DE RUNGE-KUTTA COMO MÉTODO LINEAR GERAL

Conforme já observamos um MRK com s estágios definido através de (3.3), pode ser reescrito como:

$$\begin{cases} Y_i = y_{n-1} + h \sum_{j=1}^s a_{ij}^* f(Y_j), & \text{para } i = 1(1)s, \\ y_n = y_{n-1} + h \sum_{j=1}^s b_j f(Y_j), & n = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (4.10)$$

Se considerarmos em (4.1) $N = s + 1$, $y_i^{[n]} = Y_i$ para $i=1(1)s$ e $y_{s+1}^{[n]} = y_n$ podemos reescrever o MRK na forma de um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$, como definido em (4.1):

$$\begin{aligned} y_1^{[n]} &= y_{s+1}^{[n-1]} + h[a_{11}^* f(y_1^{[n-1]}) + a_{12}^* f(y_2^{[n-1]}) + \dots + a_{1s}^* f(y_s^{[n-1]})], \\ y_2^{[n]} &= y_{s+1}^{[n-1]} + h[a_{21}^* f(y_1^{[n-1]}) + a_{22}^* f(y_2^{[n-1]}) + \dots + a_{2s}^* f(y_s^{[n-1]})], \\ &\vdots \\ y_s^{[n]} &= y_{s+1}^{[n-1]} + h[a_{s1}^* f(y_1^{[n-1]}) + a_{s2}^* f(y_2^{[n-1]}) + \dots + a_{ss}^* f(y_s^{[n-1]})], \\ y_{s+1}^{[n]} &= y_{s+1}^{[n-1]} + h[b_1 f(y_1^{[n-1]}) + b_2 f(y_2^{[n-1]}) + \dots + b_s f(y_s^{[n-1]})], \end{aligned} \quad (4.11)$$

ou

$$\begin{pmatrix} y_1^{[n]} \\ y_2^{[n]} \\ \vdots \\ y_s^{[n]} \\ y_{s+1}^{[n]} \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} y_1^{[n-1]} \\ y_2^{[n-1]} \\ \vdots \\ y_s^{[n-1]} \\ y_{s+1}^{[n-1]} \end{pmatrix} + h \hat{B} \begin{pmatrix} f(y_1^{[n-1]}) \\ f(y_2^{[n-1]}) \\ \vdots \\ f(y_s^{[n-1]}) \\ f(y_{s+1}^{[n-1]}) \end{pmatrix} + h \hat{C} \begin{pmatrix} f(y_1^{[n-1]}) \\ f(y_2^{[n-1]}) \\ \vdots \\ f(y_s^{[n-1]}) \\ f(y_{s+1}^{[n-1]}) \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

onde :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^* & a_{12}^* & \cdots & a_{1s}^* & 0 \\ a_{21}^* & a_{22}^* & \cdots & a_{2s}^* & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{s1}^* & a_{s2}^* & \cdots & a_{ss}^* & 0 \\ \hline b_1 & b_2 & \cdots & b_s & 0 \end{array} \right) \quad \text{e} \quad \hat{C} = \theta. \quad (4.13)$$

A matriz $\hat{B}$ pode ser representada por $\hat{B} = \left(\begin{array}{c|c} A^* & \theta_1 \\ \hline b^T & 0 \end{array} \right)$, onde A^* e b^T são respectivamente constituídas pelos coeficientes a_{ij}^* e b_i de (4.11) com $\theta_1 = (0 \ \cdots \ 0)^T$ e que caracterizam juntamente com o vetor c um método de Runge-Kutta.

Logo, temos em (4.12) a classe dos MRK com s estágios reescrita na forma (4.1), isto é, como um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$. Observe que (4.12) nos permite caracterizar como um MLG todas as subclasses de MRK definidas no parágrafo 3.2. Como ilustração, vamos considerar o MRK implícito com $s=2$ dado por:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{4} & \frac{5}{12} \\ \hline & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{array}.$$

Então, escrevendo-o na notação (4.10) temos:

$$Y_1 = y_{n-1} + h[\frac{1}{4}f(Y_1) - \frac{1}{4}f(Y_2)],$$

$$Y_2 = y_{n-1} + h[\frac{1}{4}f(Y_1) + \frac{5}{12}f(Y_2)],$$

$$y_n = y_{n-1} + h[\frac{1}{4}f(Y_1) + \frac{3}{4}f(Y_2)],$$

Logo, $N = s + 1 = 3$ e definindo $y_1^{[n]} = Y_1, y_2^{[n]} = Y_2, y_3^{[n]} = y_n$

obtemos a forma (4.11):

$$\begin{aligned}y_1^{[n]} &= y_3^{[n-1]} + h[\tfrac{1}{4}f(y_1^{[n]}) - \tfrac{1}{4}f(y_2^{[n]})], \\y_2^{[n]} &= y_3^{[n-1]} + h[\tfrac{1}{4}f(y_1^{[n]}) + \tfrac{5}{12}f(y_2^{[n]})], \\y_3^{[n]} &= y_3^{[n-1]} + h[\tfrac{1}{4}f(y_1^{[n]}) + \tfrac{3}{4}f(y_2^{[n]})],\end{aligned}$$

cuas matrizes $\hat{A}$, $\hat{B}$ e $\hat{C}$ são:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{5}{12} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & 0 \end{array} \right) \quad \text{e} \quad \hat{C} = \theta.$$

Observe que a matriz $\hat{A}$ é limitada, ou seja $\hat{A} = \hat{A}^n$ para $n=2,3,\dots$.

Ainda;

(i) o *polinômio característico* de $\hat{A}$ possui uma raiz simples igual a 1 e as demais iguais a zero, logo satisfaz o Teorema 4.3, e portanto, podemos concluir que o MLG é estável.

(ii) $\|\hat{A}\|_{\infty} = 1$

(iii) $\hat{A}\hat{e} = \hat{e}$, o que nos garante a *pré-consistência*

(iv) $\hat{A}v + \hat{B}\hat{e} = v + \hat{e}$, isto é o MRK será *consistente*

Daí, pelo Teorema 4.7, concluímos a *convergência* do MRK considerando-o como um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$.

Teorema 4.8 : Sejam as matrizes $\hat{A}$, $\hat{B}$ e $\hat{C}$ dadas em (4.13).

Dizemos que um MRK é *consistente* se e, somente se $\sum_{i=1}^s b_i = 1$.

Ainda, o *vetor de consistência* v é dado por:

$$v = (c_1 \quad c_2 \quad \cdots \quad c_s \quad 1)^T,$$

onde $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}^*$ para $i=1(1)s$.

Demonstração:

De fato, por (4.9) temos:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{s+1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11}^* & \cdots & a_{1s}^* & 0 \\ a_{21}^* & \cdots & a_{2s}^* & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ b_1 & \cdots & b_s & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{s+1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix},$$

logo:

$$c_{s+1} + a_{11}^* + \cdots + a_{1s}^* = c_1 + 1, \quad (4.14a)$$

$$c_{s+1} + a_{21}^* + \cdots + a_{2s}^* = c_2 + 1, \quad (4.14b)$$

$$\vdots$$

$$c_{s+1} + b_1 + \cdots + b_s = c_{s+1} + 1. \quad (4.14s)$$

Por (4.14s) concluímos que $\sum_{i=1}^s b_i = 1$.

Sabendo-se que $y_{s+1}^{[n]} = y_n$ podemos concluir que $c_{s+1} = 1$,

logo $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}^*$ para $i=1(1)s$.

4.4 OS MÉTODOS LINEARES DE PASSO MÚLTIPLO COMO MÉTODO LINEAR GERAL

Vamos agora considerar a classe dos MLPK dado em (3.16) e mostrar que eles também podem ser escritos na forma de um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$. Para isso, vamos utilizar uma definição mais convenientemente, dada por Butcher em [5], isto é:

$$y_n = \alpha_1 y_{n-1} + \alpha_2 y_{n-2} + \dots + \alpha_k y_{n-k} + h[\beta_0 f(y_n) + \beta_1 f(y_{n-1}) + \dots + \beta_k f(y_{n-k})] \quad (4.15)$$

Neste caso, o MLPK (4.15) será explícito se $\beta_0 = 0$, caso contrário, implícito.

Considerando-se o MLG (4.1) e assumindo para (4.15) que $N=k$, $y_1^{[n]} = y_n$, $y_2^{[n]} = y_{n-1}$, ..., e $y_k^{[n]} = y_{n-k+1}$, podemos representar os MLPK na forma de um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$. De fato, observando que $y_2^{[n]} = y_1^{[n-1]}$, ..., $y_k^{[n]} = y_{k-1}^{[n-1]}$ podemos escrever:

$$\begin{aligned} y_1^{[n]} &= \alpha_1 y_1^{[n-1]} + \dots + \alpha_k y_k^{[n-1]} + h\beta_0 f(y_1^{[n]}) + h[\beta_1 f(y_1^{[n-1]}) + \beta_2 f(y_2^{[n-1]}) + \dots + \beta_k f(y_k^{[n-1]})], \\ y_2^{[n]} &= y_1^{[n-1]}, \\ y_3^{[n]} &= y_2^{[n-1]}, \\ &\vdots \\ y_{k-1}^{[n]} &= y_{k-1}^{[n-1]}, \\ y_k^{[n]} &= y_{k-1}^{[n-1]}. \end{aligned}$$

Daí, definindo as matrizes:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_{k-1} & \alpha_k \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} \beta_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \hat{C} = \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_{k-1} & \beta_k \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

podemos reescrever um MLPK, implícito ou explícito, como um MLG. Observe que, para a classe dos MLPK explícitos teremos $\hat{B}=\theta$, isto é, as matrizes $\hat{A}$ e $\hat{C}$ caracterizam essa classe de métodos.

Como ilustração, vamos considerar o MLP3 explícito dado por:

$$y_n = -\frac{1}{4}y_{n-1} + \frac{1}{2}y_{n-2} + \frac{3}{4}y_{n-3} + h\left[\frac{19}{8}f(y_{n-1}) + \frac{5}{8}f(y_{n-3})\right]. \quad (4.17)$$

Considerando $N = k = 3$, $y_1^{[n]} = y_n$, $y_2^{[n]} = y_{n-1}$ e $y_3^{[n]} = y_{n-2}$, podemos reescrever (4.17) como:

$$\begin{aligned} y_1^{[n]} &= -\frac{1}{4}y_1^{[n-1]} + \frac{1}{2}y_2^{[n-1]} + \frac{3}{4}y_3^{[n-1]} + h\left[\frac{19}{8}f(y_1^{[n-1]}) + \frac{5}{8}f(y_3^{[n-1]})\right], \\ y_2^{[n]} &= y_1^{[n-1]}, \\ y_3^{[n]} &= y_2^{[n-1]}, \end{aligned}$$

ou seja:

$$\begin{pmatrix} y_1^{[n]} \\ y_2^{[n]} \\ y_3^{[n]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{3}{4} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1^{[n-1]} \\ y_2^{[n-1]} \\ y_3^{[n-1]} \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \frac{19}{8} & 0 & \frac{5}{8} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(y_1^{[n-1]}) \\ f(y_2^{[n-1]}) \\ f(y_3^{[n-1]}) \end{pmatrix},$$

onde as matrizes $\hat{A}$, $\hat{B}$ e $\hat{C}$ são:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{3}{4} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \theta \quad \text{e} \quad \hat{C} = \begin{pmatrix} \frac{19}{8} & 0 & \frac{5}{8} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Observe que a matriz $\hat{A}$ de (4.18) é limitada, ainda podemos facilmente verificar que:

(i) o *polinômio característico* de $\hat{A}$ satisfaz o Teorema 4.3.

Logo, o MLG dado por (4.18) é *estável*.

(ii) $\hat{A}\hat{e}=\hat{e}$, o que nos garante a *pré-consistência*.

(iii) $\hat{A}v+\hat{B}\hat{e}=v+\hat{e}$, isto é, o método (4.18) será *consistente*.

Pode-se então, concluir pelo Teorema 4.7, a convergência do MLPK considerado como um método $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$.

Teorema 4.9 : O MLPK caracterizado pelas matrizes de (4.16) será *consistente* se:

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i = 1, \quad (4.19a)$$

e

$$\sum_{i=1}^k i \alpha_i = \sum_{i=0}^k \beta_i, \quad (4.19b)$$

e o *vetor de consistência* v é dado por:

$$v = [-1, -2, \dots, -(k+1)]^T.$$

Demonstração:

Considerando-se a Definição 4.4 e as matrizes $\hat{A}$, $\hat{B}$ e $\hat{C}$ dadas em (4.16), podemos concluir que, o MLPK será pré-

consistente se:
$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_k \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ ou seja, } \sum_{i=1}^k \alpha_i = 1.$$

Por outro lado, será consistente se:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_k \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_0 + \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_k \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 + 1 \\ v_2 + 1 \\ \vdots \\ v_k + 1 \end{pmatrix},$$

onde obtemos:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_k v_k + \beta_0 + \beta_1 + \dots + \beta_k \\ v_1 \\ \vdots \\ v_{k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 + 1 \\ v_2 + 1 \\ \vdots \\ v_k + 1 \end{pmatrix},$$

ou seja,

$$\begin{cases} \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_k v_k + \beta_0 + \beta_1 + \dots + \beta_k = v_1 + 1, \\ v_2 = v_1 - 1, \\ v_3 = v_1 - 2, \\ \vdots \\ v_{k-1} = v_1 - k. \end{cases}$$

Note que,

$$\alpha_1 v_1 + \alpha_2 (v_1 - 1) + \dots + \alpha_k (v_1 - k) + \beta_0 + \beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_k = v_1 + 1,$$

isto é:

$$(\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_k) v_1 - \alpha_2 - 2\alpha_3 - \dots - (k-1)\alpha_k + \beta_0 + \beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_k = v_1 + 1. \quad (4.20)$$

Substituindo (4.19a) em (4.20), podemos concluir que

$$\sum_{i=1}^k i \alpha_i = \sum_{i=0}^k \beta_i. \text{ Considerando } v_1 = -1, \text{ concluimos que o vetor de}$$

consistência v é dado por $[-1, -2, \dots, -(k+1)]^T$.

CAPÍTULO 5

GENERALIZAÇÃO DO MÉTODO LINEAR GERAL

5.1 INTRODUÇÃO

Butcher apresenta em [5], uma generalização da classe dos Métodos Lineares Gerais, reescrevendo-os através de uma única matriz particionada. Considerando essa nova representação, apresentaremos os principais conceitos qualitativos, obtendo assim uma teoria unificada para os MLG que será de grande importância para os próximos capítulos.

5.2 OS MLG $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ NA FORMA $(\bar{A}, \bar{B})$

Conforme observamos no capítulo anterior, na classe dos MLG $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ também são considerados os métodos com $\hat{C}=\theta$, que Butcher denomina caso *standard* e por simplificação de notação representa tais métodos por $(\hat{A}, \hat{B})$.



Vamos, a seguir, mostrar que independente da nulidade ou não da matriz $\hat{C}$ podemos escrever um MLG $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ na forma $(\bar{A}, \bar{B})$.

Usando as aproximações $y_i^{[n]}$, $i=1(1)N$, geradas pelo MLG $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$ dado em (4.1) sejam:

$$\bar{y}_i^{[n]} = \begin{cases} y_i^{[n]} & \text{se } i \leq N \\ y_{i-N}^{[n-1]} & \text{se } i > N \end{cases}, \quad i=1(1)2N,$$

e as matrizes $\bar{A} = (\bar{a}_{ij})$ e $\bar{B} = (\bar{b}_{ij})$ quadradas de ordem $2N$. Daí, podemos definir a classe dos MLG $(\bar{A}, \bar{B})$ dada por:

$$\bar{y}_i^{[n]} = \sum_{j=1}^{2N} \bar{a}_{ij} \bar{y}_j^{[n-1]} + h \sum_{j=1}^{2N} \bar{b}_{ij} f(\bar{y}_j^{[n]}), \quad (5.1)$$

onde:

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} \hat{A} & \theta \\ I & \theta \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \bar{B} = \begin{pmatrix} \hat{B} & \hat{C} \\ \theta & \theta \end{pmatrix},$$

com I sendo a matriz identidade e θ a matriz nula, ambas de ordem N .

Para ilustração, vamos considerar um particular MRK explícito com 3 estágios:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \quad (5.2)$$

Usando a notação (2.13), podemos escrever o método como:

$$Y_1 = y_{n-1},$$

$$Y_2 = y_{n-1} + \frac{1}{2}hf(Y_1),$$

$$Y_3 = y_{n-1} + h[-f(Y_1) + 2hf(Y_2)],$$

$$y_n = y_{n-1} + h[\frac{1}{6}f(Y_1) + \frac{2}{3}hf(Y_2) + \frac{1}{6}f(Y_3)].$$

Definindo $N = s + 1 = 4$ e identificando $y_1^{[n]} = Y_1$, $y_2^{[n]} = Y_2$,

$y_3^{[n]} = Y_3$, $y_4^{[n]} = y_n$, teremos:

$$\begin{aligned} y_1^{[n]} &= y_4^{[n-1]}, \\ y_2^{[n]} &= y_4^{[n-1]} + \frac{1}{2}h[f(y_1^{[n]})], \\ y_3^{[n]} &= y_4^{[n-1]} + h[-f(y_1^{[n]}) + 2f(y_2^{[n]})], \\ y_4^{[n]} &= y_4^{[n-1]} + h[\frac{1}{6}f(y_1^{[n]}) + \frac{2}{3}f(y_2^{[n]}) + \frac{1}{6}f(y_3^{[n]})], \end{aligned}$$

a partir dos quais definimos:

$$\begin{aligned} \bar{y}_1^{[n]} &= y_1^{[n]} = Y_1, & \bar{y}_5^{[n]} &= y_1^{[n-1]}, \\ \bar{y}_2^{[n]} &= y_2^{[n]} = Y_2, & \bar{y}_6^{[n]} &= y_2^{[n-1]}, \\ \bar{y}_3^{[n]} &= y_3^{[n]} = Y_3, & \bar{y}_7^{[n]} &= y_3^{[n-1]}, \\ \bar{y}_4^{[n]} &= y_4^{[n]} = y_n, & \bar{y}_8^{[n]} &= y_4^{[n-1]}. \end{aligned} \quad e$$

Logo;

$$\begin{aligned} \bar{y}_1^{[n]} &= y_1^{[n]} = y_4^{[n-1]} = \bar{y}_4^{[n-1]}, \\ \bar{y}_5^{[n]} &= y_1^{[n-1]} = \bar{y}_1^{[n-1]}, \\ \bar{y}_6^{[n]} &= y_2^{[n-1]} = \bar{y}_2^{[n-1]}, \\ \bar{y}_7^{[n]} &= y_3^{[n-1]} = \bar{y}_3^{[n-1]}, \\ \bar{y}_8^{[n]} &= y_4^{[n-1]} = \bar{y}_4^{[n-1]}, \end{aligned}$$

e escrevendo na forma (5.1), obtemos:

$$\begin{pmatrix} \bar{y}_1^{[n]} \\ \bar{y}_2^{[n]} \\ \bar{y}_3^{[n]} \\ \bar{y}_4^{[n]} \\ \bar{y}_5^{[n]} \\ \bar{y}_6^{[n]} \\ \bar{y}_7^{[n]} \\ \bar{y}_8^{[n]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{y}_1^{[n-1]} \\ \bar{y}_2^{[n-1]} \\ \bar{y}_3^{[n-1]} \\ \bar{y}_4^{[n-1]} \\ \bar{y}_5^{[n-1]} \\ \bar{y}_6^{[n-1]} \\ \bar{y}_7^{[n-1]} \\ \bar{y}_8^{[n-1]} \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(\bar{y}_1^{[n]}) \\ f(\bar{y}_2^{[n]}) \\ f(\bar{y}_3^{[n]}) \\ f(\bar{y}_4^{[n]}) \\ f(\bar{y}_5^{[n]}) \\ f(\bar{y}_6^{[n]}) \\ f(\bar{y}_7^{[n]}) \\ f(\bar{y}_8^{[n]}) \end{pmatrix}$$

cujas matrizes $\bar{A}$ e $\bar{B}$ são:

$$\bar{A} = \left(\begin{array}{cccc|cccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad \text{e} \quad \bar{B} = \left(\begin{array}{cccc|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Logo, obtemos a representação do MRK definido em (5.2) na forma $(\bar{A}, \bar{B})$ dado em (5.1).

Definição 5.1 : Um método $(\bar{A}, \bar{B})$ é dito ser *pré-consistente* se $\bar{A}\hat{e} = \hat{e}$ e *consistente* se $\bar{A}v + \bar{B}\hat{e} = v + \hat{e}$, onde $\hat{e}, v \in \mathbb{R}^{2N}$.

5.3 GENERALIZAÇÃO DOS MÉTODOS $(\bar{A}, \bar{B})$

Vamos agora considerar uma outra forma de se gerar os métodos $(\bar{A}, \bar{B})$, baseada numa partição das matrizes $\bar{A}$ e $\bar{B}$ de ordem $2N \times 2N$, da forma:

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & \theta \\ A_{21} & \theta \end{pmatrix}, \quad \bar{B} = \begin{pmatrix} \theta & B_{12} \\ \theta & B_{22} \end{pmatrix}.$$

Tais partições consideram separadamente os estágios do método que são utilizados apenas como informação no passo presente e os estágios cuja informação são repassadas como dados de entrada para o passo seguinte.

Assim para r e s , tal que $N = r + s$ sejam $y_1^{[n-1]}, \dots, y_r^{[n-1]}$ os estágios cujas informações são passadas de um passo ao outro e

Sejam $Y = (Y_1 \ Y_2 \ \dots \ Y_s)^T$, $y^{[n]} = (y_1^{[n]} \ y_2^{[n]} \ \dots \ y_r^{[n]})^T$ e a matriz $C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix}$ onde $C_{11} = B_{22}$, $C_{12} = A_{21}$, $C_{21} = B_{12}$ e $C_{22} = A_{11}$.

Então, podemos caracterizar o método simplesmente através da matriz C e, de maneira análoga à representação (4.2) do MLG $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C})$, podemos reescrevê-lo na forma:

$$Y = (C_{11} \otimes I)hF(Y) + (C_{12} \otimes I)y^{[n-1]}, \quad (5.3a)$$

$$y^{[n]} = (C_{21} \otimes I)hF(Y) + (C_{22} \otimes I)y^{[n-1]}. \quad (5.3b)$$

Observe que essa representação é algo meramente formal, indicando que um método $(\bar{A}, \bar{B})$ pode sempre ser escrito como um método particionado, com $2N$ estágios, com $C = \begin{pmatrix} \bar{B} & \bar{A} \\ \bar{B} & \bar{A} \end{pmatrix}$, onde conseguimos separar os estágios para os quais f é aplicada e aqueles com a função apenas de passar informações de um passo ao outro, que podem ser substituídas por qualquer conjunto não-singular de combinações lineares delas.

É óbvio que essa nova representação do método é equivalente à representação $(\bar{A}, \bar{B})$ no sentido usual, mas não podemos garantir necessariamente que ele está escrito de forma a satisfazer às condições de consistência e estabilidade.

Para isso, sejam $z_1^{[n]}, z_2^{[n]}, \dots, z_r^{[n]}$ o novo conjunto de informações e T^{-1} a matriz dos coeficientes desse novo conjunto. Isto é, para $T = (t_{ij})$ temos:

$$y_i^{[n]} = \sum_{j=1}^r t_{ij} z_j^{[n]}, \quad i=1(1)r.$$

Substituindo em (5.3) obtemos:

$$Y = (C_{11} \otimes I)hF(Y) + [(C_{12}T) \otimes I]z^{[n-1]}, \quad (5.4a)$$

$$z^{[n]} = [(T^{-1}C_{21}) \otimes I]hF(Y) + [(T^{-1}C_{22}T) \otimes I]z^{[n-1]}, \quad (5.4b)$$

onde agora a matriz do método será:

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} \bar{C}_{11} & \bar{C}_{12} \\ \bar{C}_{21} & \bar{C}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12}T \\ T^{-1}C_{21} & T^{-1}C_{22}T \end{pmatrix}.$$

Conforme registramos no capítulo anterior, o método $(\bar{A}, \bar{B})$ será estável se $\|\bar{A}^n\|$ for limitada, agora, a estabilidade estará garantida se tivermos a limitação de $\|C_{22}^n\|$, pois tal limitação ocorre se e somente se $\|\bar{C}_{22}^n\|$ for limitada, uma vez que C_{22} não será afetada pela matriz T . Podemos então definir:

Definição 5.2 : Um MLG particionado, com matriz

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \text{ é estável se } \sup\{\|C_{22}^n\| : n = 1, 2, \dots\} < \infty.$$

Vamos agora analisar a consistência do método em sua formulação generalizada.

Para o método $(\bar{A}, \bar{B})$ suponhamos que o vetor de consistência seja particionado como $(\bar{w} \ w)^T$ e que o vetor de pré-consistência seja também particionado como $(\bar{e} \ \hat{e})^T$. Então, as condições de consistência serão:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \theta \\ A_{21} & \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{e} \\ \hat{e} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{e} \\ \hat{e} \end{pmatrix} \quad (5.5a)$$

e

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \theta \\ A_{21} & \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{w} \\ w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \theta & B_{12} \\ \theta & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{e} \\ \hat{e} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{w} \\ w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \bar{e} \\ \hat{e} \end{pmatrix}, \quad (5.5b)$$

ou seja:

$$A_{11}\bar{e} = \bar{e}, \quad (5.6a)$$

$$A_{21}\bar{e} = \hat{e}, \quad (5.6b)$$

$$A_{11}\bar{w} + B_{12}\hat{e} = \bar{w} + \bar{e}, \quad (5.6c)$$

$$A_{21}\bar{w} + B_{22}\hat{e} = w + \hat{e}. \quad (5.6d)$$

Considerando que $A_{11} = C_{22}$, $A_{21} = C_{12}$, $B_{12} = C_{21}$ e $B_{22} = C_{11}$ e definindo $u = T^{-1}\bar{e}$, $v = T^{-1}\bar{w}$, podemos reescrever as condições de consistência dos MLG dadas em (5.6a), (5.6b) e (5.6c) por:

$$\bar{C}_{22}u = u,$$

$$\bar{C}_{12}u = \hat{e},$$

$$\bar{C}_{22}v + \bar{C}_{21}\hat{e} = v + u,$$

onde u será denominado *vetor de pré-consistência*, e v de *vetor de consistência* do método $\bar{C}$.

Agora, podemos formalmente definir a pré-consistência e a consistência do método.

Definição 5.3 : Um Método Linear Geral com matriz particionada C é *pré-consistente*, com *vetor de pré-consistência* u se:

$$C_{22}u = u, \quad (5.7a)$$

$$C_{12}u = \hat{e}, \quad (5.7b)$$

e *consistente* se, em adição, para algum vetor v tivermos:

$$C_{22}\hat{e} + C_{21}v = u + v. \quad (5.7c)$$

A fim de facilitar a notação, podemos considerar, conforme Butcher em [6], $C_{11} = A$, $C_{21} = B$, $C_{12} = U$ e $C_{22} = V$. Logo, obtemos

$C = \begin{pmatrix} A & U \\ B & V \end{pmatrix}$, onde a representação (5.3) poderá ser reescrita como:

$$Y = (A \otimes I)hF(Y) + (U \otimes I)y^{[n-1]}, \quad (5.8a)$$

$$y^{[n]} = (B \otimes I)hF(Y) + (V \otimes I)y^{[n-1]}. \quad (5.8b)$$

Portanto, podemos também reescrever (5.7) como:

$$Vu = u,$$

$$Uu = \hat{e},$$

$$Vv + B\hat{e} = u + v.$$

5.4 ESTABILIDADE LINEAR

Para desenvolver alguns conceitos da teoria de estabilidade linear para os MLG dados em (5.3), Butcher[5] considera a equação escalar:

$$y' = \lambda y. \quad (5.9)$$

Aplicando o MLG dado por (5.8), ao problema teste (5.9) obtemos $y^{(n)} = M(z)y^{(n-1)}$, onde denominamos $M(z)$ de *matriz de estabilidade* do método.



A fim de investigar como será $M(z)$ vamos considerar um particular MLG com $r=s=2$, $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a & 0 \end{pmatrix}$, $U=I$ e $V\hat{e} = \hat{e}$; onde

$V = \begin{pmatrix} 1-v & v \\ 1-v & v \end{pmatrix}$. Assim, o MLG escrito na forma de (5.8) será:

$$\begin{aligned} Y_1 &= y_1^{[n-1]}, \\ Y_2 &= haf(Y_1) + y_2^{[n-1]}, \\ y_1^{[n]} &= h[b_{11}f(Y_1) + b_{12}f(Y_2)] + (1-v)y_1^{[n-1]} + vy_2^{[n-1]}, \\ y_2^{[n]} &= h[b_{21}f(Y_1) + b_{22}f(Y_2)] + (1-v)y_1^{[n-1]} + vy_2^{[n-1]}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

que aplicado à equação (5.9) nos fornece:

$$Y_1 = y_1^{[n-1]}, \quad (5.11a)$$

$$Y_2 = ha\lambda y_1^{[n-1]} + y_2^{[n-1]}, \quad (5.11b)$$

$$y_1^{[n]} = h[b_{11}\lambda y_1^{[n-1]} + b_{12}\lambda(ha\lambda y_1^{[n-1]} + y_2^{[n-1]})] + (1-v)y_1^{[n-1]} + vy_2^{[n-1]}, \quad (5.11c)$$

$$y_2^{[n]} = h[b_{21}\lambda y_1^{[n-1]} + b_{22}\lambda(ha\lambda y_1^{[n-1]} + y_2^{[n-1]})] + (1-v)y_1^{[n-1]} + vy_2^{[n-1]}. \quad (5.11d)$$

Assumindo que $z=h\lambda$, podemos reescrever as equações (5.11c) e (5.11d), na forma:

$$y_1^{[n]} = [zb_{11} + z^2ab_{12} + (1-v)]y_1^{[n-1]} + [zb_{12} + v]y_2^{[n-1]}, \quad (5.12a)$$

$$y_2^{[n]} = [zb_{21} + z^2ab_{22} + (1-v)]y_1^{[n-1]} + [zb_{22} + v]y_2^{[n-1]}. \quad (5.12b)$$

Dadas equações (5.11a) e (5.11b) temos:

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ za & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1^{[n-1]} \\ y_2^{[n-1]} \end{pmatrix}$$

e das equações (5.12a) e (5.12b) teremos:

$$\begin{pmatrix} y_1^{[n]} \\ y_2^{[n]} \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 1-v & v \\ 1-v & v \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ za & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1^{[n-1]} \\ y_2^{[n-1]} \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Sabendo-se que $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ za & 1 \end{pmatrix} = (I - zA)^{-1}$ temos que (5.13) pode

ser escrito como:

$$y^{(n)} = [V + zB(I - zA)^{-1}U] y^{(n-1)}, \quad (5.14)$$

onde $y^{(n)} = \begin{pmatrix} y_1^{[n]} \\ y_2^{[n]} \end{pmatrix}$ e $y^{(n-1)} = \begin{pmatrix} y_1^{[n-1]} \\ y_2^{[n-1]} \end{pmatrix}$.

Portanto, a *matriz de estabilidade* do método (5.8) será:

$$M(z) = V + zB(I - zA)^{-1}U. \quad (5.15)$$

Podemos garantir que em (5.14) teremos uma sequência estável, se a matriz de estabilidade $M(z)$ possui potências limitadas.

Em [6], [7] e [8] podemos verificar que o *polinômio de estabilidade* de um método definido por (5.8), será dado por:

$$p(w, z) = \det(wI - M(z)), \quad (5.16)$$

A *região de estabilidade* definida por (5.16) será um conjunto de pontos do plano complexo obtido por:

$$\{z \in \mathbb{C} : p(w, z) = 0 \Rightarrow |w| < 1\}.$$

Definição 5.4 : Um MLG (5.8) é *A-estável* se a região de estabilidade contem o semi-plano negativo.

Teorema 5.5 : Um MLG (5.8) é *A-estável* se e somente se, para todo $z \in \mathbb{C}^-$, $I - zA$ é não-singular e $M(z)$ é uma matriz estável.

CAPÍTULO 6

MÉTODO DE INTEGRAÇÃO COM MÚLTIPLO ESTÁGIO E DIAGONALMENTE IMPLÍCITO (DIMSIM)

6.1 INTRODUÇÃO

Conforme apresentamos no capítulo anterior, podemos representar os MLG na forma (5.8), onde as matrizes $A = (a_{ij})$, $B = (b_{ij})$, $U = (u_{ij})$ e $V = (v_{ij})$ podem ser consideradas como uma partição de uma certa matriz C com dimensão $r+s$, dada por (5.3). Explorando características especiais de cada uma dessas matrizes, podemos gerar classes especiais de MLG.

Em particular, Butcher [6] considera uma subclasse de métodos (5.8), que apresentaremos neste capítulo, denominados DIMSIM, onde A é triangular inferior com um valor constante na diagonal principal, a aproximação final e os estágios auxiliares tem a



mesma ordem, V satisfaz à propriedade de estabilidade forte e as matrizes B e U tem características que permitem estimar o erro local, gerar interpolantes e efetuar mudança do tamanho do passo de integração.

6.2 A CLASSE DOS MÉTODOS DIMSIM

Visando dispor de métodos que tivessem boa precisão e características fortes de estabilidade, sem exigir um esforço computacional excessivo, Roger(1977) construiu métodos de Runge-Kutta diagonalmente implícitos (DIRK), isto é, assumindo um valor constante para todos os elementos da diagonal principal e que são A -estáveis. Tais métodos demonstraram ser eficientes quando aplicados a problemas *stiff*. Butcher, em [6], considera a partir de tais métodos uma subclasse de MLG, utilizando a representação (5.8).

Denominamos métodos DIMSIM a uma subclasse dos métodos de discretização para a integração numérica de (2.3), cujo algoritmo é dado por (5.8) e apresenta as seguintes características:

- a) A matriz A é triangular inferior com um valor constante na diagonal principal
- b) A matriz V deverá possuir um auto valor simples igual a 1 e os demais iguais a 0, ou seja, satisfaz à propriedade de estabilidade.
- c) A ordem dos estágios e a ordem global são iguais.

Quatro casos especiais de métodos DIMSIM tornam-se bastante interessantes, sob o ponto de vista computacional:



I) DIMSIM Tipo 1, explícito com A estritamente triangular inferior - devemos considerar processamento seqüencial.

II) DIMSIM Tipo 2, implícito com A triangular inferior e tendo um valor constante na diagonal principal - também aqui devemos considerar processamento seqüencial.

III) DIMSIM Tipo 3, explícito com $A = \theta$ - neste caso todas as aproximações geradas pelos estágios, $Y_i = \sum_{j=1}^r u_{ij} y_j^{[n-1]}$, para $i = 1(1)s$ podem ser estimadas simultaneamente (ou em qualquer ordem). Logo, podemos melhorar o desempenho do processamento, implementando o algoritmo de forma a considerar processamentos em paralelo.

IV) DIMSIM Tipo 4, implícito com $A = \lambda I$, onde I é a matriz identidade de ordem s - os valores de estágio ainda podem ser calculados simultaneamente, embora para a obtenção de cada um deles seja necessária a utilização de um método iterativo, devido à não linearidade de $y(x)$. Isto é, $Y_i = h\lambda f(Y_i) + \sum_{j=1}^r u_{ij} y_j^{[n-1]}$, $i = 1(1)s$, podendo, assim, ter níveis intermediários de paralelismo.

Podemos portanto, em função da matriz A , subdividir a classe dos métodos DIMSIM em 4 subclasses.

A ilustração a seguir nos mostra a melhor indicação de cada um dos tipos de métodos DIMSIM, em função do pvi que se pretende integrar ser ou não do tipo *stiff*, bem como qual técnica computacional pode ser considerada.



Estrutura de A	Tipo de problema	Técnica computacional
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{s1} & \cdots & a_{s,s-1} & 0 \end{pmatrix}$ Tipo 1	não-stiff	seqüencial
$\begin{pmatrix} \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{s1} & \cdots & a_{s,s-1} & \lambda \end{pmatrix}$ Tipo 2	stiff	seqüencial
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$ Tipo 3	não-stiff	paralelo
$\begin{pmatrix} \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda \end{pmatrix}$ Tipo 4	stiff	paralelo

6.3 CONDIÇÕES DE ORDEM

Consideremos a ordem dos estágios e do método DIMSIM iguais a p e assumamos que no primeiro passo os valores iniciais passam ser escritos na forma:

$$y_i^{[0]} = \sum_{k=0}^p \alpha_{ik} y^{(k)}(x_0) h^k + O(h^{p+1}), \quad i = 1(1)r, \quad (6.1)$$

onde: $\alpha_{ik} \in \Re$ e $y^{(k)}$ são derivadas de ordem k da solução de $y(x)$. Ainda, os números α_{ik} devem ser escolhidos afim de que os valores de estágio, que são aproximações para a solução nos pontos $x_0 + hc_i$, com $0 \leq c_i \leq 1$ para $i=1(1)s$, possam ser expressados por:

$$Y_i = \sum_{k=0}^p \frac{c_i^k}{k!} y^{(k)}(x_0) h^k + O(h^{p+1}), \quad \text{para } i=1(1)s, \quad (6.2)$$

e os valores calculados no final do 1º passo, são da forma:



$$y_i^{[1]} = \sum_{k=0}^p \alpha_{ik} y^{(k)}(x_1) h^k + O(h^{p+1}), \quad (6.3)$$

onde $x_1 = x_0 + h$.

O teorema a seguir nos permite observar que os valores de estágio dados em (6.2) e a aproximação para $y(x_1)$ dada em (6.3) podem ser expressados de maneira mais simples.

Teorema 6.1: Os números α_{ik} , $i = 1(1)r$, $k = 0(1)p$ em (6.1) e as matrizes A, B, U e V satisfazem às equações (6.2) e (6.3) se e somente se:

$$e^{cz} = zAe^{cz} + Uw + O(z^{p+1}), \quad (6.4)$$

$$e^z w = zBe^{cz} + Vw + O(z^{p+1}), \quad (6.5)$$

onde $e^{cz} = (e^{c_1 z} \quad \dots \quad e^{c_s z})^T$ e $w = (w_1 \quad \dots \quad w_r)^T$ com:

$$w_i = \sum_{k=0}^p \alpha_{ik} z^k \text{ para } i = 1(1)r \text{ e } z \in \mathbb{C}. \quad (6.6)$$

Demonstração:

No primeiro passo de integração, isto é, para $n = 1$, a representação (5.8) do método DIMSIM nos fornece:

$$Y_i = h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j) + \sum_{j=1}^r u_{ij} y_j^{[0]}, \quad i = 1(1)s, \quad (6.7a)$$

$$y_i^{[1]} = h \sum_{j=1}^s b_{ij} f(Y_j) + \sum_{j=1}^r v_{ij} y_j^{[0]}, \quad i = 1(1)r. \quad (6.7b)$$

Vamos, a seguir, determinar Y_i , $hf(Y_i)$, $y_i^{[0]}$ e $y_i^{[1]}$ para substituir em (6.7a) e (6.7b).

Sabemos por (6.2) que:

$$Y_i = \sum_{k=0}^p \frac{c_i^k}{k!} y^{(k)}(x_0) h^k + O(h^{p+1}), \text{ para } i = 1(1)s.$$

Considerando o desenvolvimento em série de Taylor da função $y(x)$ em torno do ponto x_0 com incremento hc_i , e sabendo-se que Y_i são aproximações de $y(x)$ nestes pontos, podemos concluir que:

$$Y_i = y(x_0 + hc_i) + O(h^{p+1}).$$

Como $y'(x) = f(y(x))$ então $y'(x_0 + hc_i) = f(Y_i) + O(h^{p+1})$, que multiplicando por h obtemos:

$$hf(Y_i) = hy'(x_0 + hc_i) + O(h^{p+2}), \quad (6.8)$$

mas $y(x_0 + hc_i) \equiv \sum_{k=0}^p \frac{c_i^k}{k!} y^{(k)}(x_0) h^k$, logo:

$$y'(x_0 + hc_i) = y^{(1)}(x_0) + \frac{c_i}{1!} y^{(2)}(x_0) h + \frac{c_i^2}{2!} y^{(3)}(x_0) h^2 + \dots + \frac{c_i^{p+1}}{(p+1)!} y^{(p+2)}(x_0) h^{p+1} + O(h^{p+2}).$$

Substituindo $y'(x_0 + hc_i)$ em (6.8) teremos:

$$hf(Y_i) = \sum_{k=1}^{p+1} \frac{c_i^{k-1}}{(k-1)!} y^{(k)}(x_0) h^k + O(h^{p+2}) \quad (6.9a)$$

$$= \sum_{k=1}^p \frac{c_i^{k-1}}{(k-1)!} y^{(k)}(x_0) h^k + O(h^{p+1}). \quad (6.9b)$$

De (6.3) sabemos que para $i = 1(1)r$,

$$y_1^{[1]} = \alpha_{10} y^{(0)}(x_1) + \alpha_{11} y^{(1)}(x_1) h + \dots + \alpha_{1p} y^{(p)}(x_1) h^p + O(h^{p+1}), \quad (6.10a)$$

$$y_2^{[1]} = \alpha_{20} y^{(0)}(x_1) + \alpha_{21} y^{(1)}(x_1) h + \dots + \alpha_{2p} y^{(p)}(x_1) h^p + O(h^{p+1}), \quad (6.10b)$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$y_r^{[1]} = \alpha_{r0} y^{(0)}(x_1) + \alpha_{r1} y^{(1)}(x_1) h + \dots + \alpha_{rp} y^{(p)}(x_1) h^p + O(h^{p+1}). \quad (6.10r)$$

Ainda :



$$y^{(0)}(x_1) = y^{(0)}(x_0) + y^{(1)}(x_0)h + \dots + \frac{y^{(p)}(x_0)}{p!}h^p + O(h^{p+1}).$$

Então,

$$y^{(1)}(x_1) = y^{(1)}(x_0) + y^{(2)}(x_0)h + \dots + \frac{1}{p!}y^{(p+1)}(x_0)h^p + O(h^{p+1}),$$

$$y^{(2)}(x_1) = y^{(2)}(x_0) + y^{(3)}(x_0)h + \dots + \frac{1}{p!}y^{(p+2)}(x_0)h^p + O(h^{p+1}),$$

$\vdots$

$\vdots$

$\vdots$

$$y^{(p)}(x_1) = y^{(p)}(x_0) + y^{(p+1)}(x_0)h + \dots + \frac{1}{p!}y^{(2p)}(x_0)h^p + O(h^{p+1}).$$

Substituindo em (6.10) obtemos:

$$y_i^{(1)} = \sum_{k=0}^p \sum_{l=0}^k \frac{\alpha_{i,k-l}}{l!} y^{(k)}(x_0) h^k + O(h^{p+1}), \text{ para } i = 1(1)r. \quad (6.11)$$

Substituindo as equações (6.1), (6.2) e (6.9) em (6.7a) e as equações (6.1), (6.10) e (6.11) em (6.7b) teremos:

$$\sum_{k=0}^n \{c_i^k - \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{k-1} k - \sum_{j=1}^r u_{ij} \alpha_{jk} k!\} y^{(k)}(x_0) \frac{h^k}{k!} = O(h^{p+1}), \quad i = 1(1)s, \quad (6.12a)$$

e

$$\sum_{k=0}^n \{ \sum_{l=0}^k \frac{\alpha_{i,k-l}}{l!} k! - \sum_{j=1}^s b_{ij} c_j^{k-1} k - \sum_{j=1}^r v_{ij} \alpha_{jk} k! \} y^{(k)}(x_0) \frac{h^k}{k!} = O(h^{p+1}), \quad i = 1(1)r. \quad (6.12b)$$

No entanto, na equação (6.12a), para que os estágios tenham ordem p os coeficientes de $\frac{y^{(k)}(x_0)}{k!} h^k$ para $k = 0(1)p$ devem ser nulos.

Logo, igualando-os a zero e multiplicando por $\frac{z^k}{k!} (z \in \mathbb{C})$ teremos:

$$\frac{c_i^0 z^0}{0!} - \frac{0 \cdot z^0}{0!} (a_{i1} c_1^{-1} + a_{i2} c_2^{-1} + \dots + a_{is} c_s^{-1}) - z^0 (u_{i1} \alpha_{10} + u_{i2} \alpha_{20} + \dots + u_{ir} \alpha_{r0}) = 0, \quad (6.13a)$$

$$\frac{c_i^1 z}{1!} - \frac{1 \cdot z}{1!} (a_{i1} c_1^0 + a_{i2} c_2^0 + \dots + a_{is} c_s^0) - z (u_{i1} \alpha_{11} + u_{i2} \alpha_{21} + \dots + u_{ir} \alpha_{r1}) = 0, \quad (6.13b)$$

$$\frac{c_i^2 z^2}{2!} - \frac{2 \cdot z^2}{2!} (a_{i1} c_1^1 + a_{i2} c_2^1 + \dots + a_{is} c_s^1) - z^2 (u_{i1} \alpha_{12} + u_{i2} \alpha_{22} + \dots + u_{ir} \alpha_{r2}) = 0, \quad (6.13c)$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

$$\frac{c_i^p z^p}{p!} - \frac{p \cdot z^p}{p!} (a_{i1} c_1^{p-1} + a_{i2} c_2^{p-1} + \dots + a_{is} c_s^{p-1}) - z^p (u_{i1} \alpha_{1p} + u_{i2} \alpha_{2p} + \dots + u_{ir} \alpha_{rp}) = 0, \quad (6.13p)$$

Somando as equações de (6.13), e aproximando

$$\frac{c_i^0 z^0}{0!} + \frac{c_i^1 z}{1!} + \dots + \frac{c_i^p z^p}{p!} \text{ por } e^{c_i z} \text{ para } i = 1(1)s, \text{ concluimos que a equação}$$

(6.12a) é equivalente a:

$$e^{c_i z} - \sum_{j=1}^s z a_{ij} e^{c_j z} - \sum_{j=1}^r u_{ij} w_j = O(z^{p+1}), \quad i = 1(1)s, \quad (6.14)$$

onde:

$$w_i = \sum_{k=0}^p \alpha_{ik} z^k, \quad i = 1(1)r. \quad (6.15)$$

Analogamente, obtemos que a equação (6.12b) é equivalente

a:

$$e^z w_i - \sum_{j=1}^s z b_{ij} e^{c_j z} - \sum_{j=1}^r v_{ij} w_j = O(z^{p+1}), \quad i = 1(1)r. \quad (6.16)$$

Então, as equações (6.14), (6.16) e (6.15) são equivalentes respectivamente, às equações (6.4), (6.5) e (6.6). o que completa a demonstração.

Logo, podemos considerar como condições de ordem para a classe dos métodos DIMSIM equações (6.14), (6.15) e (6.16).

Observe que tais equações são também equivalentes as equações (6.1) e (6.2), respectivamente.

CAPÍTULO 7

CONSTRUÇÃO DE ALGUNS MÉTODOS DIMSIM

7.1 INTRODUÇÃO

Ilustraremos neste capítulo, a construção de algumas subclasses dos métodos DIMSIM Tipo1, Tipo 2, Tipo3 e Tipo4.

7.2 DIMSIM TIPO 1

Usando as condições de ordem (6.14), (6.15) e (6.16), estabelecidas através do Teorema 6.1, vamos desenvolver os passos necessários para a determinação dos coeficientes de um DIMSIM Tipo 1, Butcher [6].

Consideremos $r = s = 3$ e $p = 5$, suponhamos $U = I$, $c_1 = 0$, para facilitar os cálculos.



Seja $V = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix}$, satisfazendo às propriedades de

estabilidade.

Então, as equações (6.14) e (6.16) serão:

$$e^{ciz} - \sum_{j=1}^3 z a_{ij} e^{ciz} - \sum_{j=1}^3 u_{ij} w_j = O(z^6), \quad (7.1)$$

$$e^z w_i - \sum_{j=1}^3 z b_{ij} e^{ciz} - \sum_{j=1}^3 v_{ij} w_j = O(z^6), \quad (7.2)$$

onde $w_i = \sum_{k=0}^5 \alpha_{ik} z^k$, $i = 1(1)3$.

Da equação (7.1), obtemos:

$$w_1 = 1, \quad (7.3)$$

$$w_2 = e^{c2z} - z a_{21} + O(z^6), \quad (7.4)$$

$$w_3 = e^{c3z} - z(a_{31} + a_{32} e^{c2z}) + O(z^6), \quad (7.5)$$

e da equação (7.2) teremos:

$$e^z = z(b_{11} + b_{12} e^{c2z} + b_{13} e^{c3z}) + (v_1 w_1 + v_2 w_2 + v_3 w_3) + O(z^6), \quad (7.6)$$

$$e^z w_2 = z(b_{21} + b_{22} e^{c2z} + b_{23} e^{c3z}) + (v_1 w_1 + v_2 w_2 + v_3 w_3) + O(z^6), \quad (7.7)$$

$$e^z w_3 = z(b_{31} + b_{32} e^{c2z} + b_{33} e^{c3z}) + (v_1 w_1 + v_2 w_2 + v_3 w_3) + O(z^6). \quad (7.8)$$

Subtraindo a equação (7.6) da equação (7.7), teremos:

$$e^z (w_2 - 1) = z(b_{21} - b_{11}) + z(b_{22} - b_{12}) e^{c2z} + z(b_{23} - b_{13}) e^{c3z} + O(z^6). \quad (7.9)$$

Dividindo a equação (7.9) por z e substituindo w_2 dado em (7.4), vamos obter:

$$\frac{e^{(1+c_2)z} - e^z}{z} = a_{21}e^z + (b_{21} - b_{11}) + (b_{22} - b_{12})e^{c_2z} + (b_{23} - b_{13})e^{c_3z} + O(z^6). \quad (7.10)$$

Para eliminar a_{21} , $b_{21} - b_{11}$, $b_{22} - b_{12}$, $b_{23} - b_{13}$ vamos aplicar em (7.10) o operador diferencial $D(D-1)(D-c_2)(D-c_3)$, em relação a z ; isto é:

$$D(D-1)(D-c_2)(D-c_3)\left(\frac{e^{(1+c_2)z} - e^z}{z}\right) = O(z). \quad (7.11)$$

Se desenvolvermos a função $\frac{e^{(1+c_2)z} - e^z}{z}$ em série de Taylor em torno do ponto $z=0$, teremos:

$$\frac{e^{(1+c_2)z} - e^z}{z} = \delta_1 + \delta_2 z + \delta_3 z^2 + \dots + \delta_{n-1} z^{n-1} + O(z^n), \quad (7.12a)$$

onde:

$$\delta_i = \frac{(1+c_2)^i - 1}{i!} \text{ para } i = 1, 2, 3, \dots \quad (7.12b)$$

Logo, aplicando o operador $D(D-1)(D-c_2)(D-c_3)$ em (7.12a) obtemos:

$$(2\delta_3^{[2]} - \delta_2^{[2]}) + 2(3\delta_4^{[2]} - \delta_3^{[2]})z + 3(4\delta_5^{[2]} - \delta_4^{[2]})z^2 + \dots, \quad (7.13a)$$

onde:

$$\delta_i^{[1]} = i\delta_{i+1} - \delta_i c_3, \quad (7.13b)$$

$$\delta_i^{[2]} = i\delta_{i+1}^{[1]} - \delta_i^{[1]} c_2. \quad (7.13c)$$

Por outro lado, temos que a equação (7.11) será igual a equação (7.13a) se $2\delta_3^{[2]} - \delta_2^{[2]} = 0$ e substituindo $\delta_3^{[2]}$ e $\delta_2^{[2]}$ teremos:

$$6\delta_4^{[1]} - 2\delta_3^{[1]}(c_2 + 1) + \delta_2^{[1]}c_2 = 0.$$

Por (7.13b) e (7.12b) obtemos:

$$\begin{aligned} & \frac{(1+c_2)^5-1}{5} - (1+c_2+c_3) \left[\frac{(1+c_2)^4-1}{4} \right] \\ & + (c_2+c_3+c_2c_3) \left[\frac{(1+c_2)^3-1}{3} \right] - c_3c_2 \left[\frac{(1+c_2)^2-1}{2} \right] = 0; \end{aligned}$$

o que nos fornece c_3 em função de c_2 . Podemos verificar que a expressão obtida é equivalente a:

$$\int_1^{1+c_2} x(x-1)(x-c_2)(x-c_3)dx = 0. \quad (7.14)$$

Considerando então (7.14), podemos também determinar o valor de c_3 em função de c_2 ($c_2 \neq 0$), isto é :

$$c_3 = \frac{30 + 30c_2 + 5c_2 - 3c_2^3}{30 + 10c_2 - 5c_2^2}.$$

Por um procedimento análogo, podemos determinar os valores de a_{21} , $b_{21} - b_{11}$, $b_{22} - b_{12}$, $b_{23} - b_{13}$ usando respectivamente os operadores $D(D-c_2)(D-c_3)$, $(D-1)(D-c_2)(D-c_3)$, $D(D-1)(D-c_3)$ e $D(D-1)(D-c_2)$, na equação (7.10) e considerando $z = 0$. De maneira equivalente, como no caso anterior, esses valores podem também ser encontrados através de integrais adequadas, isto é:

$$a_{21} = \frac{\int_1^{1+c_2} x(x-c_2)(x-c_3)dx}{(1-c_2)(1-c_3)} = \frac{c_2(12+6c_2-c_2^3)-2c_2c_3(6-c_2^2)}{12(1-c_2)(1-c_3)} \quad (c_2, c_3 \neq 1),$$

$$b_{21} - b_{11} = \frac{-\int_1^{1+c_2} (x-1)(x-c_2)(x-c_3)dx}{c_2c_3} = \frac{c_2(-6-2c_2+c_2^2)+c_2c_3(6-2c_2)}{12c_3} \quad (c_2c_3 \neq 0),$$

$$b_{22} - b_{12} = \frac{\int_1^{1+c_2} x(x-1)(x-c_3)dx}{c_2(c_2-1)(c_3-c_2)} = \frac{c_2(6+8c_2+3c_2^2)-c_2c_32(3+2c_2)}{12(c_2-1)(c_2-c_3)} \quad (c_2 \neq 1, c_2 \neq c_3),$$

$$b_{23} - b_{13} = \frac{\int_{c_3}^{1+c_2} x(x-1)(x-c_2)dx}{c_3(c_3-1)(c_3-c_2)} = \frac{c_2^2(6+2c_2-c_2^2)}{12c_3(c_3-1)(c_3-c_2)} \quad (c_3 \neq 0, c_3 \neq 1, c_2 \neq c_3).$$

Analogamente, se subtraímos a equação (7.6) da equação (7.8), vamos obter:

$$\frac{e^{(1+c_3)z} - e^z}{z} = a_{31}e^z + (b_{31} - b_{11}) + a_{32}e^{(1+c_2)z} + (b_{32} - b_{12})e^{c_2z} + (b_{33} - b_{13})e^{c_3z} + O(z^5) \quad (7.15)$$

Para determinar a_{31} , a_{32} , $b_{31} - b_{11}$, $b_{32} - b_{12}$ e $b_{33} - b_{13}$, aplicamos os operadores $D(D-1-c_2)(D-c_2)(D-c_3)$, $D(D-1)(D-c_2)(D-c_3)$, $(D-1)(D-1-c_2)(D-c_2)(D-c_3)$, $D(D-1)(D-1-c_2)(D-c_3)$ e $D(D-1)(D-1-c_2)(D-c_2)$, respectivamente em (7.15), logo:

$$a_{31} = \frac{-\int_{c_3}^{1+c_3} x(x-1-c_2)(x-c_2)(x-c_3)dx}{c_2(1-c_2)(1-c_3)} = \frac{60c_3c_2(1-c_2) + 30c_3^2(-1+2c_2) + 10c_3^3(-3+c_2+c_2^2) + 5c_3^4(-1-2c_2) + 3c_3^5}{60c_2(1-c_2)(1-c_3)},$$

$$a_{32} = \frac{\int_{c_2}^{1+c_3} x(x-1)(x-c_2)(x-c_3)dx}{c_2(1+c_2)(1+c_2-c_3)} = \frac{30c_3^2(1-c_2) + 10c_3^3(3-c_2) + 5c_3^4(1+c_2) - 3c_3^5}{60c_2(1+c_2)(1+c_2-c_3)},$$

$$b_{31} - b_{11} = \frac{\int_1^{1+c_3} (x-1)(x-1-c_2)(x-c_2)(x-c_3)dx}{c_3 c_2 (1+c_2)}$$

$$= \frac{30c_3 c_2 (-1+c_2) + 10c_3^2 (2-3c_2-c_2^2) + 10c_3^3 (1+c_2) - 3c_3^4}{60c_2 (1+c_2)},$$

$$b_{32} - b_{12} = \frac{-\int_1^{1+c_3} x(x-1)(x-1-c_2)(x-c_3)dx}{c_2 (c_2-1)(c_2-c_3)}$$

$$= \frac{30c_3^2 c_2 + 10c_3^3 (-2+c_2) + 5c_3^4 (-2-c_2) + 3c_3^5}{60c_2 (c_2-1)(c_2-c_3)},$$

$$b_{33} - b_{13} = \frac{\int_1^{1+c_3} x(x-1)(x-1-c_2)(x-c_2)dx}{c_3 (c_3-1)(c_3-1-c_2)(c_3-c_2)} =$$

$$= \frac{15c_3 c_2 (-1+c_2) + 10c_3^2 (1-3c_2+c_2^2) + 15c_3^3 (1-c_2) + 6c_3^4}{30(c_3-1)(c_3-1-c_2)(c_3-c_2)}.$$

Finalmente, para determinar $v_1, v_2, v_3, b_{11}, b_{12}$ e b_{13} , vamos usar a equação (7.6), isto é:

$$e^z = [v_1 + (b_{11} - v_2 a_{21} - v_3 a_{31})z] + [v_2 + (b_{12} - v_3 a_{32})z]e^{c_2 z} + [v_3 + b_{13}z]e^{c_3 z} + O(z^6). \quad (7.16)$$

Neste caso, para se determinar $b_{11} - v_2 a_{21} - v_3 a_{31}$ usaremos o operador $D(D-c_2)^2(D-c_3)^2$ em (7.16) e a seguir consideramos fazendo $z=0$, obtendo:

$$b_{11} - v_2 a_{21} - v_3 a_{31} = \frac{(1-c_2)^2(1-c_3)^2}{c_2^2 c_3^2}. \quad (7.17)$$

Agora, aplicando o operador $(D-c_2)^2(D-c_3)^2$ em (7.16) e novamente considerando $z=0$ determinaremos v_1 , obtendo:

$$v_1 = \frac{(2c_2 + c_3)[b_{11} - v_2 a_{21} - v_3 a_{31}]}{c_2 c_3} + \frac{(1 - c_2)^2 (1 - c_3)^2}{c_2^2 c_3^2}. \quad (7.18)$$

Substituindo (7.17) em (7.18), obtemos:

$$v_1 = \frac{(1 - c_2)^2 (1 - c_3)^2 [c_3 (2 + c_2) + 2c_2]}{c_2^3 c_3^3}.$$

De modo análogo, usando os operadores $D^2(D - c_2)(D - c_3)^2$, $D^2(D - c_3)^2$, $D^2(D - c_2)^2(D - c_3)$ e $D^2(D - c_2)^2$ podemos determinar respectivamente $b_{12} - v_3 a_{32}$, v_2 , b_{13} e v_3 , ou seja:

$$b_{12} - v_3 a_{32} = \frac{(1 - c_2)(1 - c_3)^2}{c_2^2 (c_3 - c_2)^2},$$

$$v_2 = \frac{(1 - c_3)^2 [c_3 (3c_2 - 2) + 4c_2 - 5c_2^2]}{c_2^3 (c_3 - c_2)^2},$$

$$b_{13} = \frac{(1 - c_2)^2 (1 - c_3)}{c_3^2 (c_3 - c_2)^2},$$

$$v_3 = \frac{(1 - c_2)^2 [c_3 (-3c_2 - 4) + 2c_2 + 5c_3^2]}{c_3^3 (c_3 - c_2)^2}.$$

7.3 DIMSIM TIPO 2

Podemos, através do exemplo apresentado, concluir que a determinação dos coeficientes de um método DIMSIM, utilizando os operadores diferenciais não é uma tarefa muito simples. Devido a essa dificuldade, Butcher em [8] apresenta um outro procedimento para determinar os coeficientes do método, utilizando nas condições de ordem do método, o desenvolvimento em série de Taylor das componentes do vetor e^{cz} e da função e^z , na vizinhança do ponto zero.

Para ilustração desse procedimento, considerando $r = s = 2$, $p = 3$ vamos construir um DIMSIM Tipo 2, ou seja $A = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ a_{21} & \lambda \end{pmatrix}$. Por conveniência, vamos supor que $c = (0 \quad c_2)^T$, $U=I$ e $V = \begin{pmatrix} 1-\nu & \nu \\ 1-\nu & \nu \end{pmatrix}$, cujo spectrum é $\sigma(V) = \{0,1\}$.

Consideremos $c_2 = \frac{3}{2}$ e $\lambda = \frac{3}{4}$, que segundo Butcher [8] nos garante a A-estabilidade do método. Logo, as condições de ordem do método serão:

$$e^{cz} = zAe^{cz} + Uw + O(z^4), \quad (7.19)$$

$$e^z w = zBe^{cz} + Vw + O(z^4). \quad (7.20)$$

De (7.19) temos para $w = (w_1 \quad w_2)^T$ que:

$$w_1 = 1 - \frac{3}{4}z + O(z^4) \quad (7.21a)$$

$$w_2 = e^{\frac{3}{2}z} - \left(a_{21} + \frac{3}{4}e^{\frac{3}{2}z}\right)z + O(z^4). \quad (7.21b)$$

e de (7.20) obtemos:

$$e^z w_1 = z(b_{11} + b_{12}e^{\frac{3}{2}z}) + (1-\nu)w_1 + \nu w_2 + O(z^4), \quad (7.22a)$$

$$e^z w_2 = z(b_{21} + b_{22}e^{\frac{3}{2}z}) + (1-\nu)w_1 + \nu w_2 + O(z^4), \quad (7.22b)$$

Considerando o desenvolvimento em série de Taylor da função $e^{\frac{3}{2}z}$ em (7.21b), teremos:

$$w_2 = 1 + \left(\frac{3}{4} - a_{21}\right)z - \frac{9}{32}z^3 + O(z^4). \quad (7.23)$$

Substituindo (7.21a) e (7.23) em (7.22) e considerando-se os desenvolvimentos de e^z e $e^{\frac{3}{2}z}$ vamos obter expressões em potências de z , que devidamente agrupadas nos fornecem:

$$(1 - b_{11} - b_{12} - \frac{3}{2}v + a_{21}v)z + (-\frac{1}{4} - \frac{3}{2}b_{12})z^2 + (-\frac{5}{24} - \frac{9}{8}b_{12} + \frac{9}{32}v)z^3 + O(z^4), \quad (7.24a)$$

e

$$(\frac{5}{2} - a_{21} - b_{21} - b_{22} - \frac{3}{2}v + a_{21}v)z + (\frac{5}{4} - a_{21} - \frac{3}{2}b_{22})z^2 + (\frac{25}{96} - \frac{1}{2}a_{12} - \frac{9}{8}b_{22} + \frac{9}{32}v)z^3 + O(z^4). \quad (7.24b)$$

Como desejamos um método com ordem $p=3$, igualando a zero os coeficientes de z , z^2 e z^3 em (7.24) teremos:

$$\begin{cases} 1 - b_{11} - b_{12} - \frac{3}{2}v + a_{21}v = 0, \\ -\frac{1}{4} - \frac{3}{2}b_{12} = 0, \\ -\frac{5}{24} - \frac{9}{8}b_{12} + \frac{9}{32}v = 0, \\ \frac{5}{2} - a_{21} - b_{21} - b_{22} - \frac{3}{2}v + a_{21}v = 0, \\ \frac{5}{4} - a_{21} - \frac{3}{2}b_{22} = 0, \\ \frac{25}{96} - \frac{1}{2}a_{21} - \frac{9}{8}b_{22} + \frac{9}{32}v = 0, \end{cases} \quad (7.25)$$

para todo z .

Resolvendo o sistema (7.25) obtemos:

$v = \frac{2}{27}$, $a_{21} = \frac{21}{8}$, $b_{11} = \frac{5}{4}$, $b_{12} = -\frac{1}{6}$, $b_{21} = \frac{7}{8}$ e $b_{22} = -\frac{11}{12}$. Assim, o método proposto por Butcher [8] terá como matriz:

$$C = \left(\begin{array}{cc|cc} \frac{3}{4} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{21}{8} & \frac{3}{4} & 0 & 1 \\ \hline \frac{5}{4} & -\frac{1}{6} & \frac{25}{27} & \frac{2}{27} \\ \frac{7}{8} & -\frac{11}{12} & \frac{25}{27} & \frac{2}{27} \end{array} \right).$$

Lembrando que o polinômio de estabilidade é dado por

$p(w, z) = \det(wI - M(z))$, com $M(z) = V + zB(I - zA)^{-1}U$, ou seja:

$$M(z) = \frac{1}{27(-4+3z)} \begin{pmatrix} \frac{400-60z-369z^2}{-4+3z} & 2+18z \\ \frac{2(200-111z-549z^2)}{-4+3z} & 2+99z \end{pmatrix},$$

encontramos:

$$p(w, z) = \frac{1}{(-4+3z)^2} \left(\frac{1}{3} p_1 + p_2 w + p_3 w^2 \right),$$

onde : $p_1 = -17z^2 - 32z,$

$$p_2 = 2z^2 + \frac{56}{3}z - 16,$$

$$p_3 = 9z^2 - 24z + 16.$$

7.4 DIMSIM TIPO 3

Apresentaremos agora, um DIMSIM Tipo 3 com

$$r = s = p = 2 \text{ onde consideramos } A = \theta, \quad U = I, \quad V = \begin{pmatrix} 1-v & v \\ 1-v & v \end{pmatrix} \text{ e}$$

$c = (0 \quad 1)^T$. Num processo análogo ao exemplo anterior, da equação (6.14) obtemos:

$$w_1 = 1, \tag{7.26a}$$

$$w_2 = 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + O(z^3). \tag{7.26b}$$

Substituindo (7.26) em (6.16) vamos obter expressões em potências de z , que devidamente agrupadas e igualando as potências de z

e z^2 a zero, teremos:

$$\begin{cases} 1 - b_{11} - b_{12} - v = 0, \\ 1 - 2b_{12} - v = 0, \\ 2 - b_{21} - b_{22} - v = 0, \\ 4 - 2b_{22} - v = 0, \end{cases} \quad (7.27)$$

cuja solução será:

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{v}{2} & \frac{1}{2} - \frac{v}{2} \\ -\frac{v}{2} & 2 - \frac{v}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.28)$$

Observe que neste caso, a solução do sistema (7.27) nos fornece a matriz B , em função de V . Logo, a matriz do método será:

$$C = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \frac{1}{2} - \frac{v}{2} & \frac{1}{2} - \frac{v}{2} & 1 - v & v \\ -\frac{v}{2} & 2 - \frac{v}{2} & 1 - v & v \end{array} \right). \quad (7.29)$$

Isto é, para qualquer escolha de v teremos um método DIMSIM Tipo 3 com ordem $p=2$.

Sabendo-se que a matriz de estabilidade do método (7.29) é dada por $M(z) = V + zBU$, encontramos:

$$M(z) = \begin{pmatrix} 1 - v - (\frac{1}{2} - \frac{1}{2}v)z & v - (\frac{1}{2} - \frac{1}{2}v)z \\ 1 - v + \frac{1}{2}vz & v - (2 - \frac{1}{2}v)z \end{pmatrix},$$

logo, podemos determinar o polinômio de estabilidade de (7.29), que será:

$$\det(wI - M(z)) = w^2 + w(-1 - \frac{5}{2}z + vz) - vz + (1 - v)z^2.$$

Note que, em (7.29) se considerarmos $v = \frac{7}{4}$, obtemos o método dado pela matriz:

$$C = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline -\frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & -\frac{3}{4} & \frac{7}{4} \\ -\frac{7}{8} & \frac{9}{8} & -\frac{3}{4} & \frac{7}{4} \end{array} \right), \quad (7.30)$$

cujo polinômio de estabilidade será:

$$p(w, z) = w^2 - (1 + \frac{3}{4}z) - \frac{1}{4}(z + 3z^2).$$

Esse exemplo, proposto por Butcher[8], é um DIMSIM Tipo 3. com $r = s = p = 2$, cuja matriz é dada por (7.30), ou seja, é um particular método DIMSIM Tipo 3 cuja matriz geral C é dada em (7.29).

7.5 DIMSIM TIPO 4

Finalmente, considerando $r = s = 2$ e $p = 3$ e utilizando procedimentos análogos ao usados nos itens 7.3 e 7.4, podemos construir um DIMSIM Tipo 4. Se escolhermos $c = (0 \quad 1)^T$, teremos um sistema com seis equações a seis incógnitas, cuja solução nos fornece o DIMSIM Tipo 4, tendo como matriz:

$$C = \left(\begin{array}{cc|cc} \frac{23}{72} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{23}{72} & 0 & 1 \\ \hline \frac{187}{72} & \frac{13}{18} & 5 & -4 \\ \frac{179}{72} & \frac{73}{72} & 5 & -4 \end{array} \right).$$

CAPÍTULO 8

UMA CLASSE DE DIMSIM

8.1 INTRODUÇÃO

Em [6], Butcher desenvolve um caminho para obtenção de métodos DIMSIM, com $r = s = p$ que afirma ser equivalente a considerar

$$B = B_0 - AB_1 - VB_2 + VA \quad \text{onde} \quad B_0 = \int_0^{1+c_i} l_j(x)dx, \quad B_1 = l_j(1+c_i) \quad \text{e} \quad B_2 = \int_0^{c_i} l_j(x)dx,$$

no qual $l_j(x)$, $j = 1(1)s$ são os polinômios interpoladores de Lagrange.

Neste capítulo, mostraremos como gerar métodos da classe dos DIMSIM Tipo 1 através desse procedimento.

8.2 DIMSIM COM $r=s=p$

Ao considerarmos um método DIMSIM, os coeficientes das matrizes A e V são escolhidos de forma que o método tenha uma boa



região de estabilidade. Apresentamos, a seguir, um resultado que nos fornece um procedimento para a determinação dos coeficientes da matriz B .

Teorema 8.1: Seja $r=s=p$. Então o DIMSIM com matriz $C = \begin{pmatrix} A & I \\ B & V \end{pmatrix}$ e $V\hat{e} = \hat{e}$, terá **ordem e ordem de estágio igual a p** se, e somente se, $B = B_0 - AB_1 - VB_2 + VA$, onde os elementos de B_0 , B_1 e B_2 são obtidos por:

$$B_0 = \int_0^{1+c_i} l_j(x) dx, \quad B_1 = l_j(1+c_i) \quad \text{e} \quad B_2 = \int_0^{c_i} l_j(x) dx,$$

no qual $l_j(x)$, $j = 1(1)s$ são os polinômios interpoladores de Lagrange.

Demonstração:

Sabemos pelo Teorema 6.1 que $e^{cz} - zAe^{cz} = Uw(z) + O(z^{p+1})$,

sendo $U = I$ teremos: $w(z) = (I - zA)e^{cz} + O(z^{p+1})$.

Substituindo $w(z)$ em (6.5) obtemos:

$$(B - VA)ze^{cz} = e^{(1+c)z} - Ve^{cz} - Aze^{(1+c)z} + O(z^{p+1}). \quad (8.1)$$

Observe que para $z = 0$ temos que $e^{cz} = (1 \ \cdots \ 1)^T$ teremos realmente que $V\hat{e} = \hat{e}$.

Seja $\phi_j(x) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^s (x - c_k)$ e considerando $\Psi_j(x) = \int_0^x \phi_j(t) dt$,

$i = 1(1)s$, teremos:

$$\Psi_j(D) = \frac{D^s}{s} - \frac{D^{s-1}}{s-1} \left(\sum_{k_1=1}^s c_{k_1} \right) + \frac{D^{s-2}}{s-2} \left(\sum_{k_1=1}^s c_{k_1} \sum_{k_2=k_1+1}^s c_{k_2} \right) - \frac{D^{s-3}}{s-3} \left(\sum_{k_1=1}^s c_{k_1} \sum_{k_2=k_1+1}^s c_{k_2} \sum_{k_3=k_2+1}^s c_{k_3} \right) + \dots +$$

$$(-1)^i \frac{D^{s-i}}{s-i} \left(\sum_{k_1=1}^s c_{k_1} \sum_{k_2=k_1+1}^s c_{k_2} \dots \sum_{k_i=k_{i-1}+1}^s c_{k_i} \right) + \dots + (-1)^{s-1} \prod_{i=1}^s c_{k_i} \frac{D^{s-(s-1)}}{s-(s-1)}, \quad k_i \neq j,$$

onde D é denominado operador diferencial em relação a z .

Aplicando $\Psi_j(D)$ em (8.1) teremos:

$$(B - VA)\Psi_j(D)ze^{cz} = \Psi_j(D)e^{(1+c)z} - V\Psi_j(D)e^{cz} - A\Psi_j(D)ze^{(1+c)z} + O(z^{p+1}). \quad (8.2)$$

Sabendo-se que D^i é a derivada de ordem i , $i = 1(1)s$, considerando $\hat{c} = (c_1 \quad c_2 \quad \dots \quad c_s)^T$ podemos facilmente concluir que:

$$D^i(ze^{cz}) = i\hat{c}^{i-1}e^{cz} + \hat{c}^i e^{(1+c)z},$$

$$D^i(e^{(1+c)z}) = (1 + \hat{c})^i e^{(1+c)z},$$

$$D^i(ze^{(1+c)z}) = i(1 + \hat{c})^{i-1} e^{(1+c)z} + (1 + \hat{c})^i ze^{(1+c)z},$$

$$D^i(e^{cz}) = \hat{c}^i e^{cz},$$

onde:

$$\hat{c}^i = (c_1^i \quad c_2^i \quad \dots \quad c_s^i)^T, \quad (\hat{e} + \hat{c})^i = ((1+c_1)^i \quad (1+c_2)^i \quad \dots \quad (1+c_s)^i)^T$$

para $\hat{e} = (1 \quad \dots \quad 1)^T$.

Definindo $\bar{c}_i = (c_i \quad \dots \quad c_i)^T$ para $i = 2(1)s$, assumindo que $z=0$, e utilizando a expressão determinada para $\Psi_j(D)$ vamos obter:

$$\Psi_j(D)(ze^{cz})|_{z=0} = (\hat{c} - \bar{c}_1) \dots (\hat{c} - \bar{c}_{j-1})(\hat{c} - \bar{c}_{j+1}) \dots (\hat{c} - \bar{c}_s), \quad (8.3a)$$

$$\Psi_j(D)(e^{(1+c)z})|_{z=0} = \frac{(\hat{e} + \hat{c})^s}{s} - \frac{(\hat{e} + \hat{c})^{s-1}}{s-1} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^s \bar{c}_{k_i} + \dots + (\hat{e} + \hat{c}) \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^s \bar{c}_{k_i}, \quad (8.3b)$$

$$\Psi_j(D)(ze^{(1+c)z})\Big|_{z=0} = (\hat{e} + \hat{c} - \bar{c}_1) \cdots (\hat{e} + \hat{c} - \bar{c}_{j-1})(\hat{e} + \hat{c} - \bar{c}_{j+1}) \cdots (\hat{e} + \hat{c} - \bar{c}_s), \quad (8.3c)$$

$$\Psi_j(D)(e^{cz})\Big|_{z=0} = \frac{\hat{c}^s}{s} - \frac{\hat{c}^{s-1}}{s-1} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^s \bar{c}_{k_i} + \cdots + \hat{c} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^s \bar{c}_{k_i}, \quad (8.3d)$$

onde $c_{k_i} = c_i$ para $i = 1(1)s$.

Substituindo (8.3) em (8.2) teremos:

$$(B - VA)_1 \sigma_1^j = \sigma_2^j - V \sigma_4^j - A \sigma_3^j, \text{ para } j \neq k \quad (8.4)$$

onde $\sigma_1^j, \sigma_2^j, \sigma_3^j$ e σ_4^j são dados respectivamente pelo lado direito das expressões (8.3a), (8.3b), (8.3c) e (8.3d).

Observando que os vetores $\sigma_1^j, \sigma_2^j, \sigma_3^j$ e σ_4^j são da forma

$$\sigma_1^j = (0 \quad \cdots \quad 0 \quad \sigma_{1j}^j \quad 0 \quad \cdots \quad 0)^T, \quad \sigma_2^j = (\sigma_{21}^j \quad \sigma_{22}^j \quad \cdots \quad \sigma_{2s}^j)^T,$$

$$\sigma_3^j = (\sigma_{31}^j \quad \sigma_{32}^j \quad \cdots \quad \sigma_{3s}^j)^T \text{ e } \sigma_4^j = (\sigma_{41}^j \quad \sigma_{42}^j \quad \cdots \quad \sigma_{4s}^j)^T, \text{ podemos}$$

reescrever (8.4) através dos elementos das matrizes que a define, ou seja:

$$\left\{ \begin{array}{l} b_{1j} - \sum_{i=1}^s v_{1j} a_{ij} = \frac{\sigma_{21}^j}{\sigma_{1j}^j} - \sum_{i=1}^s a_{1i} \frac{\sigma_{3i}^j}{\sigma_{1j}^j} - \sum_{i=1}^s v_{1i} \frac{\sigma_{4i}^j}{\sigma_{1j}^j}, \\ b_{2j} - \sum_{i=1}^s v_{2j} a_{ij} = \frac{\sigma_{22}^j}{\sigma_{1j}^j} - \sum_{i=1}^s a_{2i} \frac{\sigma_{3i}^j}{\sigma_{1j}^j} - \sum_{i=1}^s v_{2i} \frac{\sigma_{4i}^j}{\sigma_{1j}^j}, \\ \vdots \\ b_{sj} - \sum_{i=1}^s v_{sj} a_{ij} = \frac{\sigma_{2s}^j}{\sigma_{1j}^j} - \sum_{i=1}^s a_{si} \frac{\sigma_{3i}^j}{\sigma_{1j}^j} - \sum_{i=1}^s v_{si} \frac{\sigma_{4i}^j}{\sigma_{1j}^j}, \end{array} \right. \quad (8.5)$$

para $j = 1(1)s, j \neq k_i$.

Seja $\hat{e}_j$ um vetor da base canônica do $\mathfrak{R}^s$, então (8.5)

poderá ser dada por:

$$(B - VA - \frac{\sigma_{2j}^j}{\sigma_{1j}^j} + A \frac{\sigma_{3j}^j}{\sigma_{1j}^j} + V \frac{\sigma_{4j}^j}{\sigma_{1j}^j}) \hat{e}_j = 0, \text{ para } j = 1(1)s \text{ e } j \neq k_i, \quad (8.6)$$

Podemos facilmente verificar que:

$$\sigma_{1j}^j = \phi_j(c_j), \quad (8.7a)$$

$$\sigma_{2j}^j = \int_0^{1+c_i} \phi_j(x) dx, \quad (8.7b)$$

$$\sigma_{3j}^j = \phi_j(1 + c_j), \quad (8.7c)$$

$$\sigma_{4j}^j = \int_0^{c_i} \phi_j(x) dx, \quad (8.7d)$$

para $i = 1(1)s$, $j = 1(1)s$ e $j \neq k$.

Concluimos então, que os sistemas (8.2) e (8.6) são

equivalentes. Considerando $B_0 = \frac{\sigma_{2j}^j}{\sigma_{1j}^j}$, $B_1 = \frac{\sigma_{3j}^j}{\sigma_{1j}^j}$ e $B_2 = \frac{\sigma_{4j}^j}{\sigma_{1j}^j}$ podemos

então, reescrever (8.6) como:

$$B = B_0 - AB_1 - VB_2 + VA. \quad (8.8)$$

Observe que $\frac{\phi_j(x)}{\phi_j(c_i)} = l_j(x)$, onde $l_j(x)$ são os polinômios

de Lagrange. Assim, podemos concluir que:

$$B_0 = \int_0^{1+c_i} l_j(x) dx, \quad B_1 = l_j(1 + c_i) \quad \text{e} \quad B_2 = \int_0^{c_i} l_j(x) dx,$$

o que completa a demonstração.

Utilizando o resultado desse teorema podemos determinar os elementos da matriz B em função dos elementos da matriz A e V . O resultado a seguir, devido a Butcher e Jackiewicz [9] nos permite completar a determinação dos coeficientes do método.

Teorema 8.2 : Seja V , tal que $Vu=u$ e $P'(1) \neq 0$, onde P é o polinômio característico de V . Supondo que os coeficientes α_{ik} de (6.1) existem e que as aproximações $y_i^{[0]}$ e Y_i dadas em (6.1) e (6.2) terão ordem p , e assumindo que para a matriz de estabilidade $M(z)$ dada por:

$$M(z) = V + zB(I - zA)^{-1}U, \quad (8.9)$$

teremos:

$$\det(e^z I - M(z)) = O(z^{p+1}). \quad (8.10)$$

Então, a aproximação $y_i^{[1]}$ de (6.1) terá ordem p .

8.3 CONSTRUINDO DIMSIM TIPO 1 COM $r=s=p=3$

Utilizando resultados de Butcher [6], [7] e [8]; e de Butcher e Jackiewicz [9], e de Christiano e Martins [11], construímos um método da classe DIMSIM Tipo 1 explícito, com $r = s = p = 3$.

Por exemplo, seja $c = (0 \quad c_2 \quad c_3)^T$, $V = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix}$ onde

$$V\hat{e} = \hat{e} (v_1 = 1 - v_2 - v_3) \text{ e } U = I.$$



Através da Teorema 8.1 obtemos as matrizes B_0 , B_1 e B_2 e daí os coeficientes de B em função de A , V e c , dados por:

$$b_{11} = 1 - \frac{1}{2c_2} - \frac{1}{2c_3} + \frac{1}{3c_2c_3} + a_{21}v_2 - \frac{c_2v_2}{2} + \frac{c_2^2v_2}{6c_3} + a_{31}v_3 - \frac{c_3v_3}{2} + \frac{c_3^2v_3}{6c_2},$$

$$b_{12} = \frac{2 - 3c_3 - 2c_2^3v_2 + 3c_2^2c_3v_2 + 6a_{32}c_2^2v_3 - 6a_{32}c_2c_3v_3 + c_3^3v_3}{6c_2(c_2 - c_3)},$$

$$b_{13} = \frac{2 - 3c_2 + c_2^3v_2 + 3c_2c_3^2v_3 - 2c_3^3v_3}{-6c_3(c_2 - c_3)},$$

$$b_{21} = \frac{2 - 6a_{21} + 3c_2 + 6a_{21}c_2 - c_2^3 - 3c_3 + 6a_{21}c_3 - 6a_{21}c_2c_3 + 3c_2^2c_3 + c_2^3v_2}{6c_2c_3} +$$

$$\frac{6a_{21}c_2c_3v_2 - 3c_2^2c_3v_2 + 6a_{31}c_2c_3v_3 - 3c_2c_3^2v_3 + c_3^3v_3}{6c_2c_3},$$

$$b_{22} = \frac{-2 + 6a_{21} - 6c_2 - 6c_2^2 - 2c_2^3 + 3c_3 + 6a_{21}c_3 - 6a_{21}c_2c_3 + 3c_2^2c_3}{-6c_2(c_2 - c_3)} +$$

$$\frac{2c_2^3v_2 - 3c_2^2c_3v_2 - 6a_{32}c_2^2v_3 + 6a_{32}c_2c_3v_3 - c_3^3v_3}{-6c_2(c_2 - c_3)},$$

$$b_{23} = \frac{2 - 6a_{21} + 3c_2 + 6a_{21}c_2 - c_2^3 + c_2^3v_2 + 3c_2c_3^2v_3 - 2c_3^3v_3}{-6c_3(c_2 - c_3)},$$

$$b_{31} = \frac{2 - 6a_{31} - 6a_{32} - 3c_2 + 6a_{31}c_2 - 6a_{32}c_2 + 3c_3 + 6a_{31}c_3 + 6a_{32}c_3 - 6a_{31}c_2c_3}{6c_2c_3} +$$

$$\frac{3c_2c_3^2 - c_3^3 + c_2^3v_2 + 6a_{21}c_2c_3v_2 - 3c_2^2c_3v_2 + 6a_{31}c_2c_3v_3 - 3c_2c_3^2v_3 + c_3^3v_3}{6c_2c_3},$$

$$b_{32} = \frac{-2 + 6a_{31} + 6a_{32} + 12a_{32}c_2 + 6a_{32}c_2^2 - 3c_3 - 6a_{31}c_3 - 6a_{32}c_3 - 6a_{32}c_2c_3}{-6c_2(c_2 - c_3)} +$$

$$\frac{c_3^3 + 2c_2^3v_2 - 3c_2^2c_3v_2 - 6a_{32}c_2^2v_3 + 6a_{32}c_2c_3v_3 - c_3^3v_3}{-6c_2(c_2 - c_3)},$$

$$b_{33} = \frac{2 - 6a_{31} - 6a_{32} - 3c_2 + 6a_{31}c_2 - 6a_{32}c_2 + 6c_3 - 6c_2c_3 + 6c_3^2}{-6c_3(c_2 - c_3)} + \frac{-3c_2c_3^2 + 2c_3^3 + c_2^3v_2 + 3c_2c_3^2v_3 - 2c_3^3v_3}{-6c_3(c_2 - c_3)}.$$

Construindo a matriz de estabilidade $M(z)$ definida por (8.9), obtemos:

$$\det(M(z)) = \alpha_1 z + \alpha_2 z^2 + \alpha_3 z^3, \quad (8.11)$$

onde que os coeficientes α_i dependem dos coeficientes do método e deverão ser nulos para $i=1(1)3$. Daí, determinamos os coeficientes de A , obtendo:

$$a_{31} = \frac{c_3(c_2^3 + 3a_{21}c_2c_3 - 2c_2^2c_3 - 2a_{21}c_3^2) + c_2c_3^2}{c_2^3} \quad (8.12)$$

e

$$a_{32} = \frac{c_3^2(-c_2 + c_3)}{c_2^2}, \quad c_2, c_3 \neq 0 \text{ e } c_2 \neq c_3 \quad (8.13)$$

Uma particular classe de métodos DIMSIM Tipo 1 dadas por (8.11) e (8.12) pode ser obtida para cada escolha de c_2, c_3 onde $v_1 + v_2 + v_3 = 1$. Por exemplo, escolhendo $c_2 = \frac{1}{2}$, $c_3 = 1$, $v_1 = \frac{1}{2}$ e $v_2 = v_3 = \frac{1}{4}$, obtemos:

$$B_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{3}{8} & 0 & \frac{9}{8} \\ \frac{4}{3} & -\frac{8}{3} & \frac{10}{3} \end{pmatrix}, \quad B_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & -3 & 3 \\ 3 & -8 & 6 \end{pmatrix} \text{ e } B_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{5}{24} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{24} \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}.$$

Consequentemente, teremos:

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1}{48} + \frac{a_{21}}{2} + \frac{a_{31}}{4} & \frac{1}{3} + \frac{a_{32}}{4} & \frac{7}{48} \\ \frac{11}{48} + \frac{a_{21}}{2} + \frac{a_{31}}{4} & -\frac{1}{3} + \frac{a_{32}}{4} & \frac{53}{48} - a_{21} \\ \frac{19}{16} + \frac{a_{21}}{2} + \frac{a_{31}}{4} - a_{32} & -3 + \frac{13a_{32}}{4} & \frac{53}{16} - a_{31} - 3a_{32} \end{pmatrix}, \quad (8.14)$$

e utilizando (8.12) e (8.13) obtemos que $a_{31} = 1 - 4a_{21}$ e $a_{32} = 2$ com a_{21} qualquer.

O determinante da matriz de estabilidade será:

$\det(M(z)) = (\frac{25}{48} - \frac{17a_{21}}{12} + \frac{13a_{31}}{48} - \frac{19a_{32}}{48} + \frac{5a_{21}a_{32}}{4})z^2 + (\frac{3}{16} - \frac{11a_{21}}{24} + \frac{a_{31}}{12} - \frac{13a_{32}}{96} + \frac{19a_{21}a_{32}}{48})z^3$,
cujos coeficientes são nulos para todo valor de a_{21} , isto é, $\det(M(z))=0$,
obtendo-se assim, uma particular classe de métodos DIMSIM Tipo 1 com
 $r = s = p = 3$.

Daí, a matriz C dessa classe de métodos é dada por:

$$C = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1-4a_{21} & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \frac{13}{48} - \frac{a_{21}}{2} & \frac{5}{6} & \frac{7}{48} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{23}{48} - \frac{a_{21}}{2} & \frac{1}{6} & \frac{53}{16} - a_{21} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ -\frac{9}{16} - \frac{a_{21}}{2} & \frac{7}{2} & -\frac{59}{16} + 4a_{21} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{array} \right). \quad (8.15)$$

O polinômio de estabilidade de (8.15) será:

$$p(w, z) = w^3 + p_1 w^2 + p_2 w,$$

onde:

$$p_1 = -\frac{7a_{21}}{24} z^3 + \frac{7a_{21}}{4} z^2 - \frac{113}{48} z^2 - \frac{7a_{21}}{2} z + \frac{13}{4} z - 1,$$

e

$$p_2 = \frac{7a_{21}}{24}z^3 - \frac{7}{16}z^3 + \frac{7a_{21}}{4}z^2 - \frac{115}{48}z^2 + \frac{7a_{21}}{2}z - \frac{17}{4}z.$$

Pelo Teorema 8.1 temos que $\det(e^z I - M(z)) = O(z^4)$. De fato:

$$\det(e^z I - M(z)) = \frac{5 - 3a_{32}}{96}z^4. \quad (8.16)$$

Como $a_{32}=2$, concluímos que $\det(e^z I - M(z)) = -\frac{1}{96}z^4$, o que nos garante que o método dado em (8.15) tem ordem 3.

Em (8.16), se considerarmos $a_{32} = \frac{5}{3}$, obtemos um DIMSIM Tipo 1 onde $r = s = 3$ mas agora com $p = 4$, isto é:

$$C = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{17}{14} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{52}{21} & \frac{5}{3} & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \frac{1}{112} & \frac{3}{4} & \frac{7}{48} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{73}{336} & \frac{1}{12} & -\frac{37}{336} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ -\frac{55}{112} & \frac{29}{12} & \frac{265}{336} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{array} \right). \quad (8.17)$$

Vale observar que as matrizes B_0, B_1 e B_2 são as mesmas para os métodos (8.15) e (8.17).

Podemos também determinar os coeficientes da matriz B utilizando-se apenas das condições de ordem do método, como apresentado no capítulo anterior, que são:

$$e^{cz} = zAe^{cz} + Uw + O(z^4), \quad (8.18)$$

$$e^z w = zBe^{cz} + Vw + O(z^4). \quad (8.19)$$

Escolhendo $c = (0 \quad \frac{1}{2} \quad 1)^T$, de (8.18) e (8.19), obtemos:

$$w_1 = 1, \quad (8.20a)$$

$$w_2 = e^{\frac{1}{2}z} - za_{21} + O(z^4), \quad (8.20b)$$

$$w_3 = e^z - za_{31} - za_{32}e^{\frac{1}{2}z} + O(z^4), \quad (8.20c)$$

e

$$e^z w_1 = z(b_{11} + b_{12}e^{\frac{1}{2}z} + b_{13}e^z) + \frac{1}{4}w_1 + \frac{1}{2}w_2 + \frac{1}{4}w_3, \quad (8.21a)$$

$$e^z w_2 = z(b_{21} + b_{22}e^{\frac{1}{2}z} + b_{23}e^z) + \frac{1}{4}w_1 + \frac{1}{2}w_2 + \frac{1}{4}w_3, \quad (8.21b)$$

$$e^z w_3 = z(b_{31} + b_{32}e^{\frac{1}{2}z} + b_{33}e^z) + \frac{1}{4}w_1 + \frac{1}{2}w_2 + \frac{1}{4}w_3. \quad (8.21c)$$

Considerando o desenvolvimento em série de Taylor das funções e^z e $e^{\frac{1}{2}z}$, podemos reescrever (8.20b) e (8.20c):

$$w_2 = 1 + \left(\frac{1}{2} - a_{21}\right)z + \frac{1}{8}z^2 + \frac{1}{48}z^3 + O(z^4), \quad (8.22a)$$

$$w_3 = 1 + (1 - a_{31} - a_{32})z + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}a_{32}\right)z^2 + \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{8}a_{32}\right)z^3 + O(z^4). \quad (8.22b)$$

Substituindo (8.20a) e (8.22) em (8.21) e aí considerando novamente os desenvolvimentos de e^z e $e^{\frac{1}{2}z}$ obtemos uma expressão em potências de z . Agora, igualando os coeficientes de z , z^2 e z^3 a zero obtemos:

$$\begin{cases} 2 + 2a_{21} + a_{31} + a_{32} - 4b_{11} - 4b_{12} - 4b_{13} = 0, \\ \frac{5}{16} + \frac{1}{8}a_{32} - \frac{1}{2}b_{12} - b_{13} = 0, \\ \frac{11}{96} + \frac{1}{32}a_{32} - \frac{1}{8}b_{12} - \frac{1}{2}b_{13} = 0, \\ 1 + \frac{1}{2}a_{21} + \frac{1}{4}a_{31} - b_{21} - b_{22} - b_{23} = 0, \\ \frac{15}{16} - a_{21} + \frac{1}{8}a_{32} - \frac{1}{2}b_{22} - b_{23} = 0, \\ \frac{49}{96} - \frac{1}{2}a_{21} + \frac{1}{32}a_{32} - \frac{1}{8}b_{22} - \frac{1}{2}b_{23} = 0, \\ 6 + 2a_{21} - 3a_{31} - 3a_{32} - 4b_{31} - 4b_{32} - 4b_{33} = 0, \\ \frac{29}{16} - a_{31} - \frac{11}{8}a_{32} - \frac{1}{2}b_{32} - b_{33} = 0, \\ 41 - 16a_{31} - 35a_{32} - 4b_{32} - 16b_{33} = 0. \end{cases} \quad (8.23)$$

Resolvendo-se o sistema (8.23) obtemos a matriz B dada em (8.14). Observe que esse processo é análogo ao utilizado por Butcher em [8]. No entanto, encontramos apenas os coeficientes da matriz B em função da matriz A , e não todos os coeficientes do método, como ocorreu utilizando os resultados dos Teoremas 8.1 e 8.2.

CAPÍTULO 9

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Conforme pudemos constatar, os Métodos Lineares Gerais (MLG) propostos por Butcher, em [4] e [5], apresentam como características básicas a formulação multi-estágio, em analogia aos Métodos de Runge-Kutta, bem como a necessidade de se dispor a cada passo de aproximações para a solução em mais do que um ponto anterior, como acontece com os Métodos lineares de passo múltiplo. A incorporação dessas duas características num só método podem ser encontradas nos métodos Pseudo-Runge-Kutta [10], [17] e [18], nos métodos de passo múltiplo generalizados [3], [14], [15] e nos métodos de passo múltiplo compostos [13]. Sob o ponto de vista qualitativo, podemos considerar na sua construção as propriedades para a garantia de estabilidade e consistência. Isto é, considera-se a limitação das potências da matriz A e a existência de vetores u e v tal que $Vu=u$, $Uu=\hat{e}$ e $B\hat{e}+Vv=u+v$.

Uma outra condição que também pode ser considerada e que aparece incorporada à filosofia dos MLG é que os estágios



intermediários do método também tenham ordem elevada, e não apenas o estágio final. Essa é hoje uma propriedade importante sob o ponto de vista qualitativo e é também considerada por Albrecht [1], [2], que propôs uma classe de métodos com formulação matricial, muito semelhante à dos MLG. Essa formulação também permite a construção de uma teoria unificada para classes de métodos como os de Runge-Kutta e os lineares de passo múltiplo. Um estudo comparativo dessas duas teorias parece-nos algo muito interessante e útil.

Na busca de MLG com características favoráveis sob o ponto de vista computacional, Butcher definiu o que denominou de métodos DIMSIM. Em tais métodos podemos identificar alguns princípios: a matriz A apresenta uma estrutura que permite avaliar os estágios intermediários a um baixo custo computacional; o espectro da matriz V é dado pelo conjunto $\{0,1\}$; a ordem dos estágios intermediários é muito próxima do estágio final.

Dos quatro tipos de métodos DIMSIM propostos por Butcher consideramos os do Tipo 4 (Butcher [7]) muito interessantes, pois são voltados para problemas do tipo *stiff* e possuem uma matriz A que permite explorar o processamento em paralelo.

Na construção de métodos DIMSIM a matriz U deve ser escolhida convenientemente, por exemplo, se $r = s = p$, isto é, temos que U é uma matriz quadrada, o mais usual será considerarmos $U=I$. Essa foi a opção que consideramos na construção de métodos dos quatro tipos, apresentados no capítulo 7.

Butcher e Jackiewicz [9], ao construir métodos DIMSIM com $r = s + 1 = q$ (ordem dos estágios intermediários) e $p = q$ ou $p = q + 1$



ou quando $r+1=s=q$ e $p=q$ ou $p=q+1$, isto é, onde U não é uma matriz quadrada, consideram como U a matriz identidade completada com valores nulos ou valores cuja a soma por linha sejam iguais a um.

Os métodos DIMSIM Tipo 1 que apresentamos no capítulo 7 foram construídos usando operadores diferenciais adequados, conforme proposto por Butcher [6]. Ao consideramos $r=s=3$ e $p=5$, não conseguimos determinar os elementos das matrizes A , B e V explicitamente, isto é, são apresentados através de relações entre eles.

Tentamos resolver o mesmo problema através de outro procedimento, isto é, considerando as expressões em série de Taylor das funções e^z e e^{cz} (componente a componente). Porém, por esse caminho não chegamos à solução do sistema de equações gerado, constituído por 15 equações à 15 incógnitas.

Usando o mesmo procedimento, mas agora considerando pré-definido o vetor e o escalar λ da diagonal principal da matriz A , geramos um método do Tipo 2, quando $r=s=2$ e $p=3$.

Para o caso DIMSIM Tipo 3 ($A=\theta$), com $r=s=p=2$ obtivemos uma família de métodos a um parâmetro, considerando o mesmo procedimento utilizado no caso anterior.

Embora no trabalho tenhamos exibido um particular método de DIMSIM Tipo 4, $r=s=2$ e $p=3$, devemos registrar que sem grandes dificuldades podemos chegar a métodos com essas características, mas sem fixar o componente c_2 do vetor c .

Construímos também métodos DIMSIM Tipo 4 com $r=s=p=3$ mas que deixamos de apresentar no trabalho por que os



elementos da matriz C do método são expressões extensas, envolvendo λ e as componentes do vetor c .

No capítulo 8, apresentamos outros resultados obtidos por Butcher em [6] que permitam construir uma subclasse de métodos DIMSIM para o caso $r=s=p$. Neste caso, determinamos a matriz B através dos polinômios interpoladores de Lagrange, expressados em função dos elementos das matrizes A , V e do vetor c . A seguir, usando a matriz de estabilidade $M(z)$ determinamos os elementos da matriz A em função do vetor c . Com isso, chegamos à família de métodos, tendo os elementos da matriz C em função de elementos de A e de c .

Os elementos da matriz B podem também ser determinados através do mesmo procedimento considerado no capítulo anterior.

Ilustramos todas essas situações através de um exemplo apresentado ao final do capítulo 8.

Esperamos que este trabalho se constitua em uma contribuição teórica aos interessados na teoria desenvolvida por Butcher. Reconhecemos sua importância, em especial ao explorarmos os métodos DIMSIM, mas devemos registrar as dificuldades de assimilação que a teoria apresenta.



REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Albrecht, P.(1987), *A new theoretical approach to Runge-Kutta methods*, SIAM Journal on Num. Analysis, 24, pp. 391-406.
2. Albrecht, P. (1996), *The Runge-Kutta theory in a nutshell*, SIAM J. on Num. Analysis, V. 33, 5, pp. 1712-1735.
3. Butcher, J. C. (1966), *A modified multistep method for the numerical integration of ordinary differential equations*, J. Assoc. Comp. Math., 12, pp. 124-135.
4. Butcher, J. C. (1966), *On the convergence of numerical solutions to ordinary differential equations*, Math. Comp., V. 20.
5. Butcher, J. C. (1987), *The numerical analysis of ordinary differential equations: Runge-Kutta and general linear methods*, (Wiley, Chichester, England).
6. Butcher, J. C.(1993), *Diagonally-implicit multi-stage integration methods*, Appl. Num. Math., 11, no. 380, pp. 347-363.
7. Butcher, J. C. (1993), *General linear methods for the parallel solution of ordinary differential equations*, World Scientific Publishing Company (WSSIAA), 2, pp. 99-111.
8. Butcher, J. C. (1995), *An introduction to DIMSIMs*, Comp. Appl. Math, V. 14, nº 1, pp. 59-72.
9. Butcher, J. C. and Jackiewicz, Z. (1993), *Diagonally-implicit general methods for ordinary differential equations*, BIT, 33, pp. 452-472.
10. Byrne, G.D. and Lambert, R.J.(1966), *Pseudo-Runge-Kutta methods*, J. Assoc. Comp. Math, 114, pp. 114-123.



11. Christiano, D.A.P. e Martins, S.P.(1996), *Métodos de integração múltiplo estágio e diagonalmente implícito (DIMSIM)*, Anais do XIX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (SBMAC), pp. 351-352.
12. Dekker, K. and Verwer, J.G. (1984), *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*, (North-Holland, Amsterdam)
13. Donelson, J. and Hansen, E.(1971), *Cyclic composit multistep predictor-corrector methods*, SIAM J. on Num. Analysis, 8, pp. 137-157.
14. Gear, C.W.(1965), *Hybrid methods for initial value problems in ordinary differential equations*, SIAM J. on Num. Analysis, 2, pp. 69-86.
15. Gragg, W. B. and Stetter, H. J. (1964), *Generalized linear multistep methods*, J. Assoc. Comp. Math., 11, pp. 188-209.
16. Lambert, J.D. (1991), *Numerical methods for ordinary differential systems, the inicial value problem* (Wiley, Chichester, England).
17. Nakashima, M. (1987), *Pseudo-Runge-Kutta processes*, Publ. RIMS, Kyoto University, 23, pp. 583-611.
18. Nakashima, M. (1991), *Embedded-Pseudo-Runge-Kutta methods*, SIAM J. on Num. Analysis, V. 28 n° 6, pp. 1790-1802.
19. Phillips, G. M. and Taylor, P. J. T. (1996), *Theory and applications of numerical analysis* (Academic Press).
20. Roger, A. (1977), *Diagonally - implicit Runge - Kutta methods for stiff o.d.e's*, SIAM J. on Num. Analysis, V. 14, no. 6, pp. 1007-1021.



