PUC

Série: Monografias em Ciência da Computação
Nº 13/83

UMA NOVA BASE TEÓRICA PARA A INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS

por

Peter Albrecht
Aldenice Brito Pereira
Sebastião Pereira Martins

Departamento de Informática

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO RIO DE JANEIRO
RUA MARQUÊS DE SÃO VICENTE, 225 — CEP-22453
RIO DE JANEIRO — BRASIL

PUC/RJ - DEPARTAMENTO DE INFORMÁTICA

Série: Monografias em Ciência da Computação - Nº 13/83

Editor: Antonio L. Furtado Junho 1983.

UMA NOVA BASE TEÓRICA PARA A INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS

por

Peter Albrecht

Aldenice Brito Pereira

Sebastião Pereira Martins

Trabalho parcialmente financiado pela FINEP e CAPES

ABSTRACT

Almost all commonly used methods for O.D.Es. and their most miscellaneous compositions are A-methods, i.e. they can be reduced to the A-dependent form $z_j = Az_{j-1} + h\phi(x_{j-1}, z_{j-1}, z_j; h)$, $z_j \in \mathbb{R}^s$, $A \in \mathbb{R}(s,s)$. This paper presents a general theory for such methods in order to provide the necessary tools for the theoretical approisal of composite methods.

After a short introduction to the theory of Dahlquist, the A-method concept is presented and its stability discussed. The order condition presented in chapter 3 is of major importance for the theory, especially to error control (which is not discussed here).

Finally, the idea of equivalent methods is presented resulting in a new approach to Nordsieck's methods, and the effects of step changes to stability is discussed.

KEYWORDS AND PHRASES: ordinary differential equations, stability, order condition, equivalent methods.

RESUMO

Quase todos os métodos comumente usados para equações diferenciais ordinárias e suas mais variadas composições são A-métodos, isto é, eles podem ser reduzidos à forma dependente de A $z_j = Az_{j-1} + h\phi(x_{j-1}, z_{j-1}, z_j; h)$, $z_j \in \mathbb{R}^s$, $A \in \mathbb{R}(s,s)$. Esta monografia apresenta uma teoria geral para tais métodos afim de fornecer uma ferramenta necessária para a avaliação teórica de métodos compostos. Depois de uma breve introdução à teoria de Dahlquist, o conceito de A-método é apresentado e sua estabilidade discutida. A condição de ordem apresentada no capítulo 3 é da maior importância para a teoria, especialmente para controle de erro (que não é discutido aqui).

Finalmente, a idéia de métodos equivalentes é apresentada resultando em uma nova abordagem dos métodos de Nordsieck, e o efeito da mudança do passo na estabilidade é discutida.

PALAVRAS E FRASES CHAVES: equações diferenciais ordinárias, estabilidade, condição de ordem, métodos equivalentes.

APRESENTAÇÃO

Esta monografia considera métodos para tratamento numérico de equações diferenciais ordinárias que podem ser apresentados na forma $z_j = Az_{j-1} + h\phi(x_{j-1}, z_{j-1}, z_j; h)$, $z_j \in \mathbb{R}^s$, denominados métodos A, porque dependem essencialmente de uma matriz $A \in \mathbb{R}(s,s)$.

Quase todos os métodos atualmente usados (e muitos outros) podem ser reduzidos à forma acima.

Um primeiro passo de uma teoria geral para tais métodos foi apresentado em [3], [4]. Aqui, estes resultados são generalizados e suas consequências práticas discutidas.

O objetivo é desenvolver uma ferramenta teórica necessária para a avaliação de uma grande variedade de métodos compostos, além de pesquisar aspectos práticos de sua aplicação.

O capítulo 1 contém um breve resumo da teoria clássica de Dahlquist. O conceito de método A está apresentado no capítulo 2, com exemplos e considerações sobre o problema da estabilidade.

No capítulo 3 introduzimos o conceito importante de condição de ordem, que representa um critério para decidir sobre que hipóteses a ordem de convergência de um método pode ser maior do que sua ordem de consistência.

O conceito de métodos equivalentes está abordado no capítulo 4 e sua relação com a condição de ordem está aí contida. Além disso, como exemplo mais importante, um novo tratamento das formas de Nordsieck é apresentado.

O capítulo 5, finalmente, contém algumas observações prelimina -

res sobre o tratamento teórico dos métodos com mudança automática de passo.

Este texto representa o conteúdo de um seminário desenvolvido pelo primeiro autor durante o 2º semestre de 1982 no departamento de Informática da PUC-RJ.

SUMÁRIO

com $k_i(x_j,y_j) = f(x_j+h\alpha_i, y_j+h\sum_{r=1}^{i-1} \beta_{ir}k_r)$; $i=1(1)s$; $x_j \in I_h$.

b) $T_h[y](x_j) := h^{-1}\{\alpha_k y_j+\alpha_{k-1}y_{j-1}+\ldots+\alpha_o y_{j-k} - h(\beta_k f_j+\ldots+ \beta_o f_{j-k})\}$; $j=k(1)m_h$

$y_o = \eta_o$, $y_1 = \eta_1$, ..., $y_{k-1} = \eta_{k-1}$

1.1.1 - Definição - (Erro local de discretização)

Definimos como erro local de discretização de um método $T_h[y](x) = \theta$ no ponto $x=x_j$, $j=k(1)m_h$, a quantidade $d_h(x_j)$ dada por: $d_h(x_j) := T_h[Y](x_j)$, onde Y é a solução exata de (1.1)

1.1.2 - Definição - (Consistência)

O operador de diferenças T_h é consistente com o operador diferencial T se $\lim_{h\to 0} |T_h[Y](x_j)| = 0$, $j=k(1)m_h$.

Ainda, os valores iniciais são consistentes se :

$\lim_{h\to 0} |\eta_j(h) - Y(x_j)| = 0$; $j=0(1)k-1$.

1.1.3 - Definição - (Consistência do método)

O método de discretização definido pelo operador:

$$T_h[y](x_j) = \theta, \quad j=k(1)m_h \tag{1.2}$$

é dito consistente se T_h for consistente com o operador diferencial T.

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo apresentaremos algumas definições e resultados da teoria dos métodos numéricos para equações diferenciais ordinárias, bem como exemplos onde podem ser apontadas algumas limitações para a teoria de Dahlquist.

1.1 - CONCEITOS E DEFINIÇÕES

Consideremos o problema de valor inicial:

$$T[Y](x) := Y'(x) - f(x,Y(x)) = \sigma; \; Y(a) = \eta_o \qquad (1.1)$$

com $\eta_o \in \mathbb{R}^s$, $f: [a,b] \times \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}^s$.

Nas considerações que seguem admitiremos sempre a existência e unicidade da solução Y de (1.1) em $[a,b]$.

A idéia básica no tratamento numérico de (1.1) está na substituição da equação diferencial por uma equação de diferenças, isto é, consideramos ao invés da equação $T[Y](x) = \sigma$ a equação $T_h[y](x) = \sigma$ que fornece aproximações y de Y numa malha $I_h := \{x_j = a+jh, \; j=0(1)m_h\}$. É conveniente considerar também a malha $I'_h := \{x'_j = a+jMh, \; j=0(1)m'_h, \; M \in \mathbb{N}\}$.

Para simplificar a notação tratamos aqui somente o caso s=1. A generalização para s>1 é obvia.

Existem várias escolhas para o operador T_h, como ilustração apresentamos duas delas:

a) $T_h[y](x_{j+1}) := h^{-1}\{y_{j+1} - y_j - h \sum_{i=1}^{s} \gamma_i \; k_i(x_j, y_j)\}; \; y_o = \eta_o$

1.1.4 - Definição - (Ordem de consistência)

O método de discretização (1.2) é dito ter ordem de consistência q, se $q \in \mathbb{N}$ fôr o maior número para o qual existem $h_1 > 0$ e $c > 0$ constantes tal que para todo $h \in (0, h_1]$ temos:

$$\|d_h(x_j)\| \leq c\, h^q, \quad j=k(1)m_h.$$

Obs.: A ordem de consistência mede a "qualidade" da substituição da equação diferencial pela equação de diferenças, pois podemos escrever:

$$\|d_h(x_j)\| = \|T_h[Y](x_j)\| = \|T_h[Y](x_j) - T[Y](x_j)\|,$$
$$j=k(1)m_h$$

Para ilustrar, consideremos o método de Euler explícito :

$$T_h[Y](x_j) := h^{-1}\{y_j - y_{j-1} - hf_{j-1}\} = 0; \quad j=1(1)m_h$$

$$y_o = \eta_o$$

$$\|d_h(x_j)\| = \|h^{-1}[Y(x_j) - Y(x_{j-1}) - hf(x_{j-1}, Y(x_{j-1}))]\| =$$

$$= \|h^{-1}[Y(x_{j-1}) + hY'(x_{j-1}) + \frac{h^2}{2!} Y''(x_{j-1}) + \ldots -$$

$$- Y(x_{j-1}) - hY'(x_{j-1})]\| \leq \frac{h}{2} \|Y''(x_{j-1})\| + O(h^2),$$

$$j=1(1)m_h$$

Assim, o método de Euler explícito tem ordem de consistência $q = 1$

1.1.5 - Definição - (Ordem de convergência)

O método de discretização (1.2) tem ordem de convergência p se existem constantes $C_1>0$ e $C_2>0$ independentes de h, tais que: $C_1 h^p \le E_j := \| Y(x_j) - y_j \| \le C_2 h^p$; $j=0(1)m_h$

Obs.: A ordem de convergência de um método de discretização não coincide necessàriamente com sua ordem de consistência q. Pode-se demonstrar que nos métodos lineares de passo k e nos métodos de Runge-Kutta a igualdade se verifica se

$\| Y_j - \eta_j(h) \| = O(h^r)$ onde $Y_j = Y(x_j)$ e $r \ge q$.

A ordem de convergência diz algo sobre a qualidade da solução da equação de diferenças com relação à solução da equação diferencial.

Uma questão que pode aqui ser levantada é sobre a existência de alguma relação entre os erros $d_h(x_j)$ e E_j.

1.2 - MÉTODOS LINEARES DE PASSO k E MÉTODOS LINEARES CÍCLICOS

1.1.2 - Definição - (Método linear de passo k)

Denomina-se método linear de passo k a todo método de discretização de (1.1) da forma:

$$\alpha_k y_j + \alpha_{k-1} y_{j-1} + \dots + \alpha_o y_{j-1} = h \sum_{\ell=0}^{k} \beta_\ell f_{j-k+\ell} \qquad (1.3)$$

$$y_j = \eta_j(h) \;; \quad j=0(1)k-1 \qquad\qquad j=k(1)m_h$$

onde y_j representa a aproximação da solução exata $Y(x)$ em $x = x_j = a+jh$, $j=0(1)m_h$, com α_i e β_i constantes , $i = 0(1)k$.

A teoria para tais métodos é bem conhecida e foi desenvolvida por Dahlquist e Henrici.

O critério clássico de estabilidade para tais métodos é devido a Dahlquist e conhecido como "critério das raízes" ("root-condition"), pelo qual (1.3) é estável se as raízes μ_i de seu polinômio característico associado $\rho(\mu) = \sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell \mu^\ell$ satisfazem $|\mu_i| \leq 1$, $i=1(1)k$, e se $|\mu_\ell|=1$ então μ_ℓ é uma raiz simples.

1.2.2 - Teorema [10]

O operador T_h associado ao método linear de passo k (1.3) é consistente se:

$$\rho(1) = \sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell = 0 \quad \text{e} \quad \rho'(1) = \sum_{\ell=1}^{k} \ell\, \alpha_\ell = \sum_{\ell=1}^{k} \beta_\ell$$

1.2.3 - Teorema [9]

Um método (1.3) com ordem de consistência q é estável se e somente se:

$$q \leq \begin{cases} k+2 & \text{se } k \text{ é par} \\ k+1 & \text{se } k \text{ é impar} \end{cases}$$

Obs.: O resultado acima é conhecido como "barreira de Dahlquist".

1.2.4 - Definição

Um conjunto ordenado de M fórmulas lineares de passo múltiplo é dito um método linear M-cíclico de passo múltiplo, se essas fórmulas ("estágios") são usadas ciclicamente na ordem dada para o cálculo das aproximações subsequentes y_j.

Se o método necessita de k valores iniciais ele é dito um método linear M-cíclico de passo k.

Sobre essa classe de métodos cabem algumas observações:

1 - Se todos os estágios foram explícitos o método é dito explícito, caso contrário é dito implícito.

2 - Assumimos que para cada estágio uma aproximação final é gerada. Caso contrário - como veremos no exemplo 1.3.2 - usamos o termo "método linear multiestágio de passo multiplo".

3 - Os estágios do método não necessitam ter o mesmo número k de passos.

4 - Os métodos cíclicos foram introduzidos por Donelson e Hansen [7] apontando como uma de suas principais vantagens a superação da barreira de Dahlquist.

1.3.- LIMITAÇÕES DA TEORIA DE DAHLQUIST

Neste parágrafo procuraremos mostrar através de alguns exemplos as limitações da teoria de Dahlquist quando aplicada a alguns métodos numéricos de discretização existentes.

1.3.1 - Consideremos o método 3-cíclico linear de passo 3, apresentado por Donelson e Hansen [7] :

$$\begin{aligned}
33y_{3j}+24y_{3j-1}-57y_{3j-2} &= h(10f_{3j}+57f_{3j-1}+24f_{3j-2} - \\
&\quad - f_{3j-3}) \\
125y_{3j+1}-144y_{3j}-117y_{3j-1}+136y_{3j-2} &= 3h(14f_{3j+1}+39f_{3j}-48f_{3j-1}- \\
&\quad - 15f_{3j-2}) \qquad (1.4) \\
58y_{3j+2}+531y_{3j+1}-306y_{3j}-283y_{3-1} &= 3h(3f_{3j+2}+102f_{3j+1}+177f_{3j}+ \\
&\quad + 28f_{3j-1})
\end{aligned}$$

$y_o = \eta_o$, $y_1 = \eta_1$, $y_2 = \eta_2$; $j=1(1)m_h$

Pensando na estabilidade de (1.4) podemos associar a cada um dos estágios o seu polinômio característico:

$$\rho_1(\mu) = 33\mu^3 + 24\mu^2 - 57\mu$$
$$\rho_2(\mu) = 125\mu^3 - 144\mu^2 - 117\mu + 136$$
$$\rho_3(\mu) = 58\mu^3 + 531\mu^2 - 306\mu - 283$$

Determinando as raízes de $\rho_1(\mu)$, $\rho_2(\mu)$, $\rho_3(\mu)$ verificamos que todos eles possuem raiz fora do círculo unitário, isto é, nenhum dos três estágios de (1.4) satisfaz o critério das raízes de Dahlquist. Entretanto, segundo um critério de estabilidade a ser introduzido em 2.3 o método (1.4) é estável.

Com relação à consistência, usando a definição 1.1.4 pode-se mostrar que cada um dos estágios de (1.4) tem ordem de consistência 5. Porém, conforme será visto em 3.2.3 o método composto (1.4) tem ordem de convergência 6.

1.3.2 - Seja o método composto com 2 estágios e termos de correção, considerado por Albrecht em [4].

$$y_{j+2} = \frac{11}{30}y_{j+1} + \frac{19}{30}\bar{y}_j + \frac{h}{720}(251f_{j+2} + 817f_{j+1} + 97f_j + 11f_{j-1})$$

$$\bar{y}_{j+1} = \frac{11}{30}y_{j+1} + \frac{19}{30}\bar{y}_j + \frac{19}{720}h(-f_{j+2} + 13f_{j+1} + 13f_j - f_{j-1}) \tag{1.5}$$

$$y_o = \eta_o,\ y_1 = \bar{y}_1 = \eta_1,\ y_2 = \eta_2 \qquad j=1(1)m_h$$

A cada passo a aproximação anterior y_{j+1} é corrigida antes de ser usada no passo seguinte, através de uma combinação linear de valores já calculados.

Como em 1.3.1, aqui também alguns pontos merecem ser destacados:

- qual o polinômio característico de (1.5) ?
- conforme [2, pág. 384] cada um dos estágios de (1.5) tem ordem de consistência $q=4$, conforme veremos mais à frente, se $Y \in \mathbb{C}^6[a,b]$ e os valores iniciais satisfazem : $|Y(x_i) - \eta_i| = O(h^5)$; $i=1,2$, então (1.5) terá ordem de convergência 5.

1.3.3 - Seja o método bloco-implícito de passo um e com dois estágios, introduzido por Shampine e Watts [ ] :

$$
\begin{aligned}
y_{2j-1} &= y_{2j-2} + \frac{h}{12}(5f_{2j-2} + 8f_{2j-1} - f_{2j}) \\
& \hspace{20em} (1.6) \\
y_{2j} &= y_{2j-2} + \frac{h}{3}(f_{2j-2} + 4f_{2j-1} + f_{2j}) \\
y_o &= \eta_o \; ; \; j=1(1)m_h
\end{aligned}
$$

O método (1.6) é A-estável e conhecido y_{2j-2} determinamos simultaneamente y_{2j-1} e y_{2j} , resolvendo um sistema não linear a duas equações.

Pode-se verificar que o primeiro estágio de (1.6) tem ordem de consistência $q=3$ e o segundo estágio tem ordem $q=4$.

Conforme Lambert [10, pág. 160] as aproximações de índice par são de ordem 4 e as de índice ímpar são de ordem 3, o que conforme veremos não é correto pois (1.6) tem ordem de convergência $q=4$ para todas aproximações y_k, $k=1(1)m_h$.

Ainda, podemos questionar aqui a forma como poderia ser analisada a estabilidade de (1.6) pois a combinação de métodos estáveis nem sempre é estável.

1.3.4 - Consideremos o método Adams escrito na notação Nordsieck:

$$y_j = y_{j-1} + (1-\beta_3)h\, f_{j-1} + \beta_3 h f_j + (1-2\beta_3)\,\frac{1}{2}\,h^2 y''_{j-1} + (1-3\beta_3)\,\frac{1}{6}h^3 y'''_{j-1}$$

$$y''_j = -\frac{3}{4}hf_{j-1} - \frac{h^2}{4}y''_{j-1} + \frac{h^3}{8}\,y'''_{j-1} + \frac{3}{4}hf_j \tag{1.7}$$

$$y'''_j = -\frac{1}{6}hf_{j-1} - \frac{1}{6}h^2\,y''_{j-1} + \frac{1}{12}h^3 y'''_{j-1} + \frac{1}{6}hf_j$$

$$y_o = \eta_o, \qquad y''_o = Y''(x_o),\ y'''_o = Y'''(x_o)$$

Obs.: Aqui, y''_j e y'''_j são interpretados como aproximações respectivamente de $Y''(x_j)$ e $Y'''(x_j)$.

Ordem de consistência de (1.7) é $q=3$, porém, conforme veremos em 4.2.1, (1.7) é "equivalente" ao método de Adams-Moulton com ordem de convergência 4.

1.3.5 -

Nos exemplos apresentados pudemos destacar um fator novo e que não encontra respaldo na teoria de Dahlquist: a ordem de consistência é menor do que a ordem de convergência.

Com relação à estabilidade dois problemas merecem ser destacados:

1. como caracterizar a estabilidade de métodos como os apresentados em 1.3.2 e 1.3.3 ?
2. como justificar que métodos multi-estágios, com estágios não estáveis venham a ser estáveis ?

Tais situações, entre outras, nos levam a caracterizar a necessidade de uma teoria que permita melhor definir a estabilidade de um método, bem como procure determinar sob que condições um méto do com ordem de consistência q possa convergir com ordem p, $p>q$. Assim, nos próximos parágrafos procuraremos apresentar um novo tratamento para os métodos de discretização, devido a Albrecht [3], que entre outros pontos principalmente procurará :

1. tratar os métodos de discretização até aqui conhecidos da forma mais uniformizada possível;
2. introduzir um novo conceito de estabilidade, que possa inclusive ser considerado na presença de mudanças do tamanho do passo de integração ;
3. determinar a ordem de convergência do método.
4. justificar a ocorrência de ordem de convergência maior do que a ordem de consistência;
5. relacionar tanto quanto possível E_j e $d_h(x_j)$.

CAPÍTULO 2 - MÉTODOS A E SUA ESTABILIDADE

Consideraremos a seguir uma classe de métodos de discretização onde os exemplos apresentados no parágrafo anterior possam ser tratados como casos particulares.

Conforme procuraremos mostrar, não apenas esses mas a grande maioria dos métodos de discretização atualmente conhecidos pertencem a essa classe de métodos.

Ainda para essa classe de métodos definiremos um outro conceito de estabilidade.

2.1 - Definição (Método A)

Seja M uma classe de métodos de discretização que permite determinar $z_j \in R^s$, $A \in R(s,s)$ e uma função

$\phi: I_h' \times R^s \times R^s \to R^s$ a fim de que o método de discretização possa ser escrito na forma:

$$z_j = Az_{j-1} + h\,\phi(x_{j-1}', z_{j-1}, z_j\,;\,h) \qquad j=1(1)m_h \tag{2.1}$$
$$z_o = \xi(h)$$

como $h \in (0,h_0]$, $h_0 \leq b-a$, tal que (2.1) possue solução única z_j.

Métodos da classe M foram inicialmente considerados por Albrecht em [1].

As componentes de z_j caracterizam, em formas diferentes, a aproximação da solução exata $Y(x)$ de (1.1) no ponto $x_j' \in I_h'$.

2.1.1 - <u>Definição</u> (Discretização)

Caracterizamos a solução exata Y num ponto $x' \in I'_h$, pelas componentes de um vetor $Z_j \in R^s$.

Denominamos Z_h: $I'_h \to R^s$ com valores Z_j uma "discretização" de Y(x) em x'_j .

Para ilustrar a definição 2.1.1, consideremos a discretização $Z_j := (Y_j, Y_{j-1}, \ldots, Y_{j-s+1})^T$.

Z_j descreve Y através dos valores funcionais Y_i, $i=j-s+1(1)j$, que por si só definem numa maneira única um polinômio P de interpolação com grau (s-1). Assim, poderíamos também caracterizar Y no ponto x_j pelo polinômio P.

2.1.2 - <u>Definição</u> (Método A).

Métodos de discretização que podem ser reduzidos à forma (2.1) são chamados métodos A se as seguintes condições se verificam :

(a) existe c>o tal que $\|A^j\| \leq c$ para todo $j \in N$

(b) ϕ satisfaz à condição de Lipschitz: existem $k_1 \geq o$, $k_2 \geq o$,

independentes de h e x'_j, tais que $\forall (x'_j \in I'_h$; $u,v \in R^s$; $h \in (o,h_o])$ temos

$$\|\phi(x'_j, u_1,v_1;h) - \phi(x'_j, u_2,v_2;h)\| \leq k_1 \|u_1-u_2\| + k_2\|v_1-v_2\|$$

Obs.: A condição (a) equivale a dizer que os auto-valores de A não excedem a 1 em valor absoluto e aos de módulo 1 pertencem apenas divisores elementares lineares.

Daqui em diante nos referiremos a um método da classe M se tivermos um método A.

Quando houver necessidade de nos referirmos a um elemento particular dessa classe, caracterizado pela matriz A, B ou C, denominamos respectivamente A-método, B-método ou C-método.

2.1.3 - Definição - (critério das raízes)

Se a condição (a) acontece, a matriz A é dita satisfazer o "critério das raízes". Se, em adição, todos os auto-valores μ_i distintos de $\mu=1$ satisfazem $|\mu_i| < 1$, então A é dita satisfazer o "critério forte das raízes", caso contrário ela satisfaz o "critério fraco das raízes".

2.1.4 - Teorema

Um método da forma :

$$z_o=\zeta(h);\ Lz_j=Uz_{j-1}+h\ \phi(x'_{j-1},z_{j-1},z_j;h) \quad j=1(1)m'_h \qquad (2.2)$$

com $\det L \neq 0$ é um método A se $A=L^{-1}U$ satisfaz o critério das raízes.

DEM: Imediata pois $\hat{\phi}=L^{-1}\phi$ satisfaz à condição (b) da definição 2.1.2 se f é Lipschitz-contínua, o que é sempre assumido.

Obs.: A matriz $L^{-1}U$ não necessita ser calculada pois de:

$\det(\mu I-A) = 0$ segue $\det(\mu L - U) = 0$.

Logo, os auto-valores de $A=L^{-1}.U$ são as raízes do polinômio $P(\mu) = \det(\mu L-U)$.

Assim, a estabilidade de um método na forma (2.2) depende das raízes do polinômio $P(\mu) = \det(\mu L-U)$.

2.2 - ALGUNS EXEMPLOS DE MÉTODOS A

Vamos agora mostrar como algumas famílias de métodos de discretização de (1.1) podem ser escritas na forma (2.1).

2.2.1 - Consideremos os métodos lineares de passo k da forma (1.3) com $\alpha_k=1$.
Tais métodos podem ser escritos na forma (2.1) se definimos:

$x_j' = x_j$ e :

$$z_j = \begin{pmatrix} y_j \\ y_{j+1} \\ \vdots \\ y_{j+k-2} \\ y_{j+k-1} \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ -\alpha_0 & -\alpha_1 & -\alpha_2 & & -\alpha_{k-1} \end{pmatrix} \qquad \zeta = \begin{pmatrix} \eta_0 \\ \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_{k-2} \\ \eta_{k-1} \end{pmatrix}$$

Observemos que nesse caso o método na forma (2.1) conterá (k-1) equações triviais da forma $y_\ell=y_\ell$, $\ell = j(1)(j+k-2)$.

2.2.2 - Consideremos o método composto com três estágios, apresentado em (4.4)

Para $x_j' = x_{3j}$ e $z_j = \begin{pmatrix} y_{3j} \\ y_{3j+1} \\ y_{3j+2} \end{pmatrix}$; $L = \begin{pmatrix} 33 & 0 & 0 \\ -144 & 125 & 0 \\ -306 & 531 & 58 \end{pmatrix}$;

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 57 & -24 \\ 0 & -136 & 117 \\ 0 & 0 & 283 \end{pmatrix} ; \quad \zeta = \begin{pmatrix} \eta_0 \\ \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} ;$$

$$\phi(x'_{j-1}, z_{j-1}, z_j; h) = \begin{pmatrix} 10f_{3j}+57f_{3j-1}+24f_{3j-2}-f_{3j-3} \\ 42f_{3j+1}+117f_{3j}-144f_{3j-1}-45f_{3j-2} \\ 9f_{3j+2}+306f_{3j+1}+531f_{3j}+84f_{3j-1} \end{pmatrix}$$

o método (1.4) toma a forma:

$$Lz_j = U\, z_{j-1} + h\phi(x_{3j-3}, z_{j-1}, z_j; h)$$

Logo multiplicando-se ambos os membros da última igualdade por L^{-1} obtemos a forma (2.1)

2.2.3 - Para o método composto e com termos de correção apresentado em (1.5) obtemos a forma (2.1) para:

$$x_j' = x_j \quad z_j = \begin{pmatrix} y_j \\ y_{j+1} \\ y_{j+2} \\ \bar{y}_{j+1} \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{11}{30} & \frac{19}{30} \\ 0 & 0 & \frac{11}{30} & \frac{19}{30} \end{pmatrix} \qquad \zeta_o = \begin{pmatrix} \eta_0 \\ \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_1 \end{pmatrix}$$

$$\phi(x_{j-1},\ z_{j-1},\ z_j\ ;\ h) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{720}(251f_{j+2}+817f_{j+1}+97f_j+11f_{j-1}) \\ 19(-f_{j+2}+13f_{j-1}+13f_j-f_{j-1}) \end{pmatrix}$$

2.2.4 - Para o método bloco-implícito apresentado em (1.6) a forma (2.1) é obtida se considerarmos:

$$x_j' = x_{2j}\ ;\quad z_j = \begin{pmatrix} Y_{2j-1} \\ Y_{2j} \end{pmatrix}\ ;\quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\ ;\quad \zeta_o = \begin{pmatrix} 0 \\ \eta_o \end{pmatrix}$$

$$\phi(x_{2j-2},\ z_{j-1},\ z_j;\ h) = \frac{1}{12}\begin{pmatrix} 5f_{2j-2}+8f_{2j-1}-f_{2j} \\ 4(f_{2j-2}+4f_{2j-1}+f_{2j}) \end{pmatrix}$$

Os exemplos apresentados podem nos dar uma idéia da variedade de métodos de discretização de (1.1) que possuem uma representação na forma (2.1).

2.3 - ESTABILIDADE DOS MÉTODOS A

Conforme pudemos verificar através dos exemplos apresentados em 1.3, o conceito da estabilidade de Dahlquist representado pelo critério das raízes não é bem sucedido para métodos compostos.

Ainda, em 2.2 mostramos que todos os exemplos citados em 1.3 possuem uma representação na forma (2.1).

Visando estudar a estabilidade de métodos A vamos aqui considerar um novo conceito de estabilidade, a partir do conceito de funcional estabilidade introduzido por Spijker [11].

2.3.1 - Para cada $h \in (0,h_o]$ seja $\mathbb{G}_h$ o espaço das funções malha $z_h: I'_h \to \mathbb{R}^s$, $I'_h = \{x'_j \ , \ j=0(1)m'_h\}$ com a norma:

$$\|z_h\| = \max_{0 \le i \le m'_h} |z_i|, \text{ onde } |\bullet| \text{ denota a norma do máximo em } \mathbb{R}^s.$$

Seja Ψ_h um funcional definido em $\mathbb{G}_h$ (que é assumido ser indendendente de f).

Dado um A-método, associamos a ele um operador $U_h: \mathbb{G}_h \to \mathbb{G}_h$ definido por

$$U_h[z](x'_j) := \begin{cases} z_o - \zeta(h) & \text{para } j=o \\ \\ h^{-1}[z_j - Az_{j-1} - h\phi(x'_{j-1}, z_{j-1}, z_j ; h)] & \text{para } j=1(1)m'_h \end{cases} \qquad (2.3)$$

2.3.2 - <u>Definição</u> [11]

Um A-método é estável segundo o funcional Ψ_h se existem números positivos e fixos C e $h_1 \in (0,h_o]$ tais que:

$$\|z - \tilde{z}\|_h \le C \ \Psi_h[d_h] \qquad (2.4)$$

se verifica para todo $h \in (0,h_1]$ e todo $z, \tilde{z}, d_j \in \mathbb{G}_h$ que satisfazem:

$$U_h[\tilde{z}](x'_j) = d_j \qquad (2.5.a)$$

$$U_h[z](x'_j) = \emptyset \qquad (2.5.b)$$

O funcional Ψ_h nessas condições é chamado "funcional de estabilidade" do método.

1 - Os vetores d_j que são perturbações do método, podem ser identificados como os erros locais de discretização no caso particular em que $\tilde{z}_j = Z_h(x_j')$, onde $Z_h(x_j') \in \mathbb{E}_h$ é uma discretização de Y. Nessas condições podemos dizer que (2.4) fornece um limite para o erro global devido aos erros locais de discretização $d_h(x_j') \in \mathbb{R}^s$.

2 - No estudo aqui apresentado os valores d_j podem ser perturbações quaisquer (por exemplo, devidos aos erros de arredondamento na aplicação do método).

Cabe aqui a colocação de algumas questões:

$1^{a.}$) Existem funcionais Ψ_h que permitem limitar $\|z-\tilde{z}\|_h$ em ambos os lados ?

$2^{a.}$) Caso existam, como determiná-los ?

$3^{a.}$) Determinado um funcional nessas condições, quais as consequências para a teoria dos métodos A?

Consideremos os funcionais :

(a) $\Psi_h[d] := \max\limits_{o \le j \le m_h'} |d_j|$ - "norma do máximo"

(b) $\Psi_h[d] := |d_o| + h \sum\limits_{j=1}^{m_h'} |d_j|$

(c) $\Psi_h[d] := \max\limits_{o \le j \le m_h'} \{|d_o + h \sum\limits_{\ell=1}^{j} d_\ell|\}$ - "norma de Spijker"

Stetter [12, pág. 84] mostra que a norma de Spijker fornece as melhores estimativas bilaterais da forma:

$$C_1 \Psi_h [d] \leq \max_{0 \leq j \leq m_h'} | z_j' - z(x_j') | \leq C_2 \Psi_h[d] , \forall h \in (0,h_1],$$

para métodos Adams.

Albrecht[4] mostrou que a escolha desse funcional não é muito adequada, nem mesmo para métodos lineares de passo k que não sejam métodos Adams.

Podemos ainda destacar que métodos com mais de uma raiz de seu polinômio característico no círculo unitário não são estáveis com relação ao funcional de Spijker.

Se existem $C > 0$ e $h_1 > 0$ tais que para todo $d \in \mathbb{C}_h$ e todo $h \in (0,h_1]$ vale:

$$\Psi_h^{(1)} [d] \leq C \Psi_h^{(2)} [d]$$

então anotamos $\Psi_h^{(1)} \prec \Psi_h^{(2)}$.

2.3.3 - <u>Definição</u> - (Funcional minimal) [11]

Um funcional de estabilidade $\Psi_h^{(o)}$ de um método de discretização é dito "minimal" se para todos os funcionais de estabilidade Ψ_h do método vale: $\Psi_h^{(o)} \prec \Psi_h$.

2.3.4 - <u>Definição</u> - (Funcionais equivalentes) [11]

Dados $\Psi_h^{(1)}$ e $\Psi_h^{(2)}$ funcionais de estabilidade de um método de discretização, se $\Psi_h^{(1)} \prec \Psi_h^{(2)}$ e $\Psi_h^{(2)} \prec \Psi_h^{(1)}$ dizemos que $\Psi_h^{(1)}$ e $\Psi_h^{(2)}$ são funcionais equivalentes.

<u>Obs.</u>: Para os funcionais definidos anteriormente podemos dizer que (a) e (b) são equivalentes mas (b) e (c) não o são.

2.3.5 - Teorema [12]

O funcional de Spijker é minimal para métodos lineares de passo k com $\mu_1=1$ e $|\mu_i| < 1$ para $i=2(1)k$.

Obs.: O mesmo não se verifica para outros métodos de discretização (por exemplo métodos cíclicos).

A definição de Spijker nos leva a pensar que possuímos um instrumento para medir a "qualidade" da estabilidade, isto é, podemos falar de "mais estável" ou menos "menos estável", o que sem tirar a legitimidade da definição em termos conceituais não é correto .

Entre os resultados até aqui considerados podemos destacar a existência de um funcional de estabilidade que permite limitar em ambos os lados $\|z-\tilde{z}\|_h$.

Agora, considerado um método de discretização podemos pensar na existência ou não de um funcional de estabilidade do método que é "melhor", bem como em caso positivo como determiná-lo.

Consideremos o funcional [3] :

$$\Psi_h[d] := \max_{0\leq j\leq m_h} | A^j d_o + h \sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} d_\ell |$$

O funcional assim definido é uma norma em $\mathbb{C}_h$, o que permite denominá-lo "A-norma" e anotá-lo por $\|d\|_h^A$.

Vale observar que se A=I o funcional acima coincide com a norma de Spijker.

Vamos a seguir procurar resultados que permitam melhor identificar o funcional $\|d\|_h^A$.

2.3.6 - Teorema

Todos os métodos A são estáveis com relação ao funcional $\| d \|_h^A$.

DEM:

De (2.5 - a/b) temos:

$$z_j = Az_{j-1} + h\phi(x'_{j-1}, z_{j-1}, z_j; h) + hd_j \quad ; \quad z_o = \zeta + d_o$$

$$z^*_j = Az^*_{j-1} + h\phi(x'_{j-1}, z^*_{j-1}, z^*_j ; h) \quad ; \quad z^*_o \text{ para } j=1(1)m'_h.$$

Considerando:

$$q_o := z_o - z^*_o$$

$$q_j := z_j - z^*_j$$

$$e_j := \phi(x'_{j-1}, z_{j-1}, z_j ; h) - \phi(x'_{j-1}, z^*_{j-1}, z^*_j; h) \quad j=1(1)m'_h$$

Temos:

$$q_o = d_o$$

$$q_j = Aq_{j-1} + hd_j + he_j \qquad j=1(1)m'_h \tag{2.6}$$

Usando (2.6), por recorrência obtemos:

$$q_j = A[Aq_{j-2} + hd_{j-1} + he_{j-1}] + hd_j + he_j = \ldots =$$

$$= A^j d_o + h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} d_\ell + h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} e_\ell \qquad j = o(1)m'_h \tag{2.7}$$

Daí :

$$|q_j| \le \max_{0 \le j \le m'_h} |A^j d_o + h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} d_\ell| + h|\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} e_\ell| \le$$

$$\le \| d \|_h^A + h\sum_{\ell=1}^{j} \| A^{j-\ell} \| \, |e_\ell|$$

Aplicando a definição 2.1.2 temos :

$$|q_j| \le \| d \|_h^A + hD\sum_{\ell=1}^{j} [k_1 \, |z_{\ell-1} - z^*_{\ell-1}| + k_2 \, |z_\ell - z^*_\ell|] =$$

$$= \| d \|_h^A + hD\sum_{\ell=1}^{j} [k_1 \, |q_{\ell-1}| + k_2 \, |q_\ell|] \tag{2.8}$$

Considerando (2.8) e $hDk_2 < 1$, utilizando indução finita sobre j, mostremos que :

$$|q_j| \leq \frac{(1+h\upsilon)^{j-1}}{1-hDk_2} \cdot (\| d \|_h^A + hDk_1 \cdot |q_o|) \text{ com } \upsilon := \frac{D(k_1+k_2)}{1-hDk_2} \quad (2.9)$$

Para j=1 temos :

$$|q_1| \leq \| d \|_h^A + hD[k_1 \ |q_o| + k_2 |q_1|] =$$

$$= \| d \|_h^A + hDk_1 |q_o| + hDk_2 \ |q_1|$$

de onde obtemos:

$$|q_1| \leq \frac{1}{1-hDk_2} [\| d \|_h^A + hDk_1 \ |q_o|] = \frac{(1+h\upsilon)^{1-j}}{1-hDk_2} (\| d \|_h^A + hDk_1 \ |q_o|)$$

Suponhamos (2.9) válida para j-1, isto é :

$$|q_{j-1}| \leq \frac{(1+h\upsilon)^{j-2}}{1 - hDk_2} (\| d \|_h^A + hDk_1 \ |q_o|)$$

Mostremos a validade de (2.9) para j:

$$|q_j| \leq \| d \|_h^A + hD[k_1 \ |q_o| + (k_1+k_2)(|q_1| + |q_2| + \dots + |q_{j-1}|) + k_2 \ |q_j|]$$

Daí :

$$|q_j| \leq \frac{1}{1-hk_2D} [\| d \|_h^A + hDk_1 |q_o| + hD(k_1+k_2)(|q_1| + \dots + |q_{j-1}|)]$$

Considerando $\alpha = \| d \|_h^A + hDk_1 \ |q_o|$ e a validade da tese para q_ℓ, $\ell = 1(1)j-1$ podemos escrever:

$$|q_j| \leq \frac{1}{1-hDk_2} [1+h\upsilon(1+(1+h\upsilon)+\dots+(1-h\upsilon)^{j-2})] \ \alpha \ =$$

$$= \frac{1}{1-hDk_2} \ [1+h\upsilon(\frac{1-(1+h\upsilon)^{j-1}}{1-(1+h\upsilon)})] \ \alpha = \frac{(1-h\upsilon)^{j-1}}{1-hDk_2} (\| d \|_j^A + hDk_1 |q_o|)$$

Mas $|q_o| = |d_o| \leq \| d \|_h^A$, logo

$$|q_j| \leq \frac{(1+h\upsilon)^{j-1}}{1-hDk_2} (1+hDk_1) \quad \| d \|_j^A \leq \frac{e^{(b-a)\upsilon}}{1-hDk_2} (1+hDk_1) \| d \|_h^A \qquad (2.10)$$

Assim temos verificada a relação (2.4) para todo $h \in (0,h_1]$ com $h_1 < \dfrac{1}{Dk_2}$, o que conclue a demonstração.

Obs.:

1 - O resultado anterior permite identificar $\| d \|_h^A$ como um funcional de estabilidade para os métodos A.

2 - Os métodos lineares de passo k fracamente estáveis que segundo o funcional de Spijker não são estáveis, são métodos A logo são estáveis segundo $\| d \|_h^A$.

3 - Para os métodos Adams a norma $\| d \|_h^A$ coincide com norma de Spijker pois para tais métodos temos:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad e \quad d_j = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \\ 0 \\ c_{q+1} \end{pmatrix} h^q y^{(q+1)}(x_j') + O(h^{q+1}) \in \mathbb{R}^s$$

Assim, $A^i d_j$ $i<s$ é um vetor onde apenas as $(i+1)$-últimas componentes são não nulas e todas iguais a c_{q+1}, e $A^i d_j = c_{q+1} I h^q y^{(q+1}(x_j') + O(h^{q+1})$ para $i \geq s$.

2.3.7 - Definição - (Funcional otimal)

Seja Ψ_h um funcional de estabilidade de um método A, com Ψ_h independente de f.

Então, Ψ_h é dito um "funcional otimal" se as seguintes condições se verificam para todo $d \in \mathbb{G}_h$ e todo $h \in (o, h_1]$:

a) $\|z-z^*\|_h = \Psi_h[d]$ (2.11-a)

para todo $\phi(x,u,v;h)$ que é independente de u e v.

b) Para todo $\varepsilon > o$ existe um $\gamma > o$ tal que :

$$(1-\varepsilon)\Psi_h[d] < \|z-z^*\|_h < (1+\varepsilon)\Psi_h[d] \qquad (2.11\text{-b})$$

para todo ϕ com $k_1+k_2 < \gamma$

2.3.8 - Teorema

O funcional dado por $\Psi_h[d] = \|d\|_h^A$ (A-norma) é otimal para todo método A e permite um limite bilateral da forma :

$$C_1 \|d\|_h^A \leq \|z-z^*\|_h \leq C_2 \|d\|_h^A \qquad (2.12)$$

se $h \in (o,h_1]$ e $h_1 D k_2 < 1$ com :

$$D = \sup_j \|A^j\| \quad , \quad C_1 = [1+(b-a)D(k_1+k_2)]^{-1} \quad \text{e}$$

$$C_2 = e^{(b-a)\upsilon} \frac{(1+hDk_1)}{(1-hDk_2)}$$

DEM:

Mostremos inicialmente (2.12):

De (2.10) temos:

$$|z_j-z_j^*| \leq e^{(b-a)\upsilon} \frac{1+hDk_1}{1-hDk_2} \|d\|_h^A \qquad j=o(1)m_h'$$

Logo, $\|z-z^*\|_h = \max\limits_{0\le j\le m_h'} |z_j - z_j^*| \le C_2 \|d\|_h^A$

Afim de mostrar o outro lado de (2.12), usando (2.7) obtemos:

$$A^j d_o + h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} d_\ell = q_j - h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} e_\ell$$

Logo:

$$\|d\|_h^A := \max_{0\le j\le m_h'} |A^j d_o + h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} d_\ell| \le$$

$$\le \max_{0\le j\le m_h'} |q_j| + \max_{0\le j\le m_h'} \{hD\sum_{\ell=1}^{j} (k_1 |q_{\ell-1}| + k_2|q_\ell|)\} =$$

$$= \max_{0\le j\le m_h'} |q_j| + \max\{hD[k_1 |q_o| + (k_1+k_2)\sum_{\ell=1}^{j-\ell} |q_\ell| + k_2|q_j|]\} \le$$

$$\le \max_{0\le j\le m_h'} |q_j| + \max_{0\le j\le m_h'} \{hD(k_1+k_2)\, m_h' |q_j|\} \le$$

$$\le \max_{0\le j\le m_h'} |q_j| \{1+(b-a)\, D(k_1+k_2)\}$$

De onde concluimos que $C_1 \|d\|_h^A \le \|z-z^*\|_h$.

Para mostrarmos (2.11-a), usando (2.7) temos :

$$z_j - z_j^* = A^j d_o + h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} d_\ell + h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} e_\ell \;;$$

mas ϕ independe de u e v, logo $e_\ell = o$, $\ell = 1(1)j$.

Daí :

$$\|z-z^*\|_h = \max_{0\le j\le m_h'} |z_j - z_j^*| = \max_{0\le j\le m_h'} |A^j d_o + h\sum_{\ell=1}^{j} A^{j-\ell} d_\ell| = \|d\|_h^A.$$

Finalmente, (2.11-b) é consequência imediata de (2.12) pois dado $\varepsilon > o$ basta determinarmos γ com $(k_1+k_2) > \gamma$ tal que $(1-\varepsilon) < C_1$ e $(1+\varepsilon) > C_2$, o que completa a demonstração.

<u>Obs.</u>: A relação (2.12) é de fundamental importância pois através

dela procuraremos resposta para o fato de em alguns métodos de discretização a ordem de convergência ser maior do que a ordem de consistência.

CAPÍTULO 3 - A CONDIÇÃO DE ORDEM

Neste capítulo procuraremos resposta à questão levantada através dos exemplos apresentados em 1.3, onde ficou caracterizado que a ordem de convergência de um método A pode ser maior do que sua ordem de consistência.

3.1 - Definição e Formas Equivalentes

3.1.1 - Lema -

Seja $A\in \mathbb{R}(s,s)$ satisfazendo o critério das raízes com $|\mu_k|=1$ para $k=1(1)s_1\leq s$ e $t_h\colon I_h' \to \mathbb{R}^s$ uniformemente limitada para $h\in(o,h_o]$.

Então:

$$C_h(x_j'):= \sum_{\ell=o}^{j} A^{j-\ell}.t_h(x_j') \tag{3.1}$$

é uniformemente limitada para $h\in(o,h_o]$ se e somente se $\exists c>o$ tal que para todo $h\in(o,h_o]$:

$$|\sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell} \quad p_k^T \quad t_h(x_\ell')| \leq c, \quad k=1(1)s_1 \tag{3.2}$$

onde p_k são auto-vetores à esquerda linearmente independentes , correspondentes aos auto-valores μ_k, $k=1(1)\ s_1$.

DEM :

Consideremos uma base de Jordan $\{u(\mu_k),\ k=1(1)s\}$.

Então:

$$t_h(x_\ell') = \sum_{k=1}^{s} d_k(x_\ell')\ u(\mu_k) \tag{3.3-a}$$

com

$$d_k(x'_\ell) = (p_k^T\, u(\mu_k))^{-1}\, (p_k^T\, t_h(x'_\ell)), \quad k=1(1)s \tag{3.3-b}$$

Ainda:

$$A^{j-\ell}\, u(\mu_k) = \begin{cases} \mu_k^{j-\ell}\, u(\mu_k) & , \quad k=1(1)s_1 \\ \sum\limits_{r=0}^{r_k-1} p_k^{(r)}(\ell)\, A^r\, \mu_k^{j-\ell}\, u(\mu_k), & k=(s_1+1)(1)s \end{cases} \tag{3.4}$$

onde $p_k^{(r)}$ é um polinômio de grau(r_k-1); r_k o grau do vetor principal $u(\mu_k)$.

De (3.1) e (3.3-a/b) obtemos:

$$|C_h(x'_j)| = \left| \sum_{k=1}^{s} \sum_{\ell=o}^{j} d_k(x'_\ell)\, A^{j-\ell}\, u(\mu_k) \right| \le \sum_{k=1}^{s} S_k(h)$$

onde com (3.4) $S_k(h)$ é da forma:

a) para $k=1(1)s_1$:

$$S_k(h) = \left| \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell}\, (p_k^T\, u(\mu_k))^{-1}\, (p_k^T\, t_h(x'_\ell))\, u(\mu_k) \right|$$

Logo, $C_h(x'_j)$ é uniformemente limitada para todo $h\in(o,h_o]$ se e somente se (3.2) se verifica.

b) para $k=(s_1+1)(1)s$:

$$S_k(h) = \left| \sum_{\ell=1}^{j} d_k(x'_\ell) \sum_{r=o}^{r_k-1} p_k^{(r)}(\ell)\, \mu_k^{j-\ell}\, A^r\, u(\mu_k) \right| \le$$

$$\le \sum_{\ell=1}^{j} |d_k(x'_\ell)| \left| \sum_{r=o}^{r_k-1} p_k^{(r)}(\ell)\, A^r\, u(\mu_k) \right| \left| \mu_k^{j-\ell} \right|$$

o que nos permite concluir que as somas $S_k(h)$ são limitadas para todo $h\in(o,h_o]$, pois como $|\mu_k|<1$ o majorante será convergente.

3.1.2 - Teorema -

Consideremos um A-método com erro local de discretização :

$$d_h(x'_o) = h^{q+1}\ t_h(x'_o) \tag{3.5 -a}$$

$$d_h(x'_j) = h^q\ t_h(x'_j) \quad , \quad j=1(1)m'_h \tag{3.5 -b}$$

e $t_h\colon I'_h \to \mathbb{R}^s$ uniformemente limitada para $h\in(o,h_o]$.

Então $\|d\|_h^A = O(h^{q+1})$ para $h\to 0$ se e somente se $\exists$ $c>0$ independente de h tal que:

$$\left|\sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell}\ p_k^T\ t_h(x'_\ell)\right| \le c, \quad k=1(1)s_1 \tag{3.6}$$

com $p_k\in\mathbb{R}^s$ como no lema 3.1.1.

DEM:

Da definição de $\|d\|_h^A$, usando (3.5-a/b) temos:

$$\|d\|_h^A = h^{q+1} \max_{0\le j\le m'_h} \left|\sum_{\ell=o}^{j} A^{j-\ell}\ t_h(x'_\ell)\right| .$$

Usando então o lema 3.1.1 concluimos a tese.

3.1.3 - Definição - (Condição de Ordem)

A relação (3.6) será chamada "condição de ordem".

Para muitas aplicações a condição de ordem (3.6) é desnecessàriamente muito geral, porém, conforme veremos ela pode ser simplificada através de algumas hipóteses adicionais:

a) - Seja $t_h(x'_o)\in\mathbb{R}^s$ e $t_h(x'_j) = g_h(x'_j)\ t$, $j=1(1)m'_h$,

onde $t\in\mathbb{R}^s$ é um vetor constante e x'_j e $g_h : I'_h \to \mathbb{R}$ é a discretização de uma função $g\neq o$ com derivada limitada em $[a,b]$.

b) - Seja $t_h(x'_o) \in \mathbb{R}^s$ e $t_h(x'_j) = g_h(x'_j)\ t$, $j=1(1)m'_h$,

$t \in \mathbb{R}^s$ vetor constante e x'_j , $g_h : I'_h \to \mathbb{R}$, e a matriz A satisfazendo a condição forte de raiz.

Obs.: A afirmação (a) exclue os A-métodos cuja função ϕ é descontínua (por exemplo os métodos cíclicos primitivos [12]). Na maioria dos métodos clássicos g é a (q+1)-ésima derivada da solução Y.

A hipótese (b) exclue os métodos fracamente estáveis.

3.1.4 - Teorema -

Sob as hipóteses (a) a condição de ordem (3.6) é equivalente à condição:

$$p^T t = o \quad \text{para todo } p^T = p^T A \tag{3.7-a}$$

DEM:

Seja $S_k = \left| \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell}\ p_k^T\ \ t_h(x'_\ell) \right|$ para $k=1(1)s_1$

Logo:

$$S_k = \left| \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell}\ g_h(x'_\ell)\ p_k^T\ t \right| = \left| p_k^T\ t \right| \ \left| \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell}\ g_h(x'_\ell) \right|$$

Para $\mu_k=1$ $$S_k = \left| p_k^T\ t \right| \ \left| \sum_{\ell=1}^{j} g_h(x'_\ell) \right| \tag{3.8}$$

Assim, $S_k \leq c$ para $c>o$ é independente de h e j se e sòmente se (3.7-a) se verifica.

Para $\mu_k \neq 1$ $$S_k = \left| p_k^T\ t \right| \ \left| \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell}\ g_h(x'_\ell) \right|$$

Mas:

$$S = \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell} \; g_h(x'_\ell) = \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell} \; g_h(x'_{\ell-1}) + h \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell} \; g'_h(\xi_\ell) =$$

$$= \mu_k \sum_{\ell=0}^{j-1} \mu_k^{j-\ell} \quad g_h(x'_\ell) + S^* =$$

$$= \mu_k (S + g_h(x'_o) - g_h(x'_j) + S^*)$$

com $S^* := h \sum_{\ell=1}^{j} \mu_k^{j-\ell} \quad g'_h(\xi_\ell)$.

Logo:

$$|S| = |1 - \mu_k|^{-1} \; |\mu_k| \; |g_h(x'_o) - g_h(x'_j) + S^*|$$

da limitação de g'_h concluimos a limitação de S^* .

3.1.5 - Teorema -

Sob as hipóteses (b), a condição de ordem (3.6) é equivalente a uma das condições abaixo, ou ambas:

$$p^T \; t = o \qquad \text{para todo } p^T = p^T \; A$$

$$\left| \sum_{\ell=1}^{j} g_h(x'_\ell) \right| \leq c, \quad c>0 \text{ constante.} \qquad (3.7\text{-b})$$

DEM:

Basta considerarmos a relação (3.8)

Obs.: O teorema 3.1.5 tem sido utilizado ([2] , [3]) para dar uma nova base teórica aos métodos cíclicos de ordem máxima de Donelson e Hansen [7].

3.1.6 - Teorema -

Sejam os estágios do método linear M-cíclico de passo k na forma (2.2) tendo ordem de consistência $q^{(r)}$, $r=1(1)M$, e valores iniciais de ordem $(q+1)$, $q = \min\limits_{1\le r\le M} q^{(r)}$.

Sejam as raízes de $P(\mu)=\det(\mu L-U)$, satisfazendo $\mu_1=1$ e $|\mu_i|< 1$, $i=2(1)s$.

Então, o método converge com ordem $(q+1)$ para todo $y\in \mathbb{C}^{q+2}[a,b]$, se $\operatorname{rank}(L-U,c) = s-1$, com:

$$c = \left(0,\ldots,0,\ c^{(1)}_{q+1},\ c^{(2)}_{q+1},\ldots,\ c^{(M)}_{q+1}\right)^T \in \mathbb{R}^s \quad \text{e}$$

$$c^{(r)}_{q+1} = \begin{cases} \text{constante de erro do r-ésimo estágio se } q^{(r)} = q \\ 0 \qquad\qquad \text{se } q^{(r)} > q \end{cases}$$

DEM:

Para o método linear M-cíclico de passo k na forma (2.2), sob as hipóteses acima, o erro local de discretização é da forma:

$$d_h(x_0) = z_0 - \xi(h);\ d_h(x_j) = h^q\, y^{(q+1)}(x_{Mj})\ t + O(h^{q+1})$$
$$j=1(1)m_h'$$

onde $t=L^{-1}c$.

Assim, a condição de ordem (3.7-a) toma a forma:

$$p^T L^{-1} c = 0.$$

Para $u^T = p^T L^{-1}$ temos: $u^T c = 0$ com $u^T(L-U) = 0$.

Esse sistema linear terá solução $u^T \neq 0$ se $\operatorname{rank}(L-U,c) \le s-1$.

Usando então os teoremas 3.1.2 e 3.1.4 concluímos a tese.

De uma maneira simples a condição de ordem resolve o problema de determinação da ordem de convergência de todos A-métodos que satisfazem (3.5-a/b) do teorema 3.1.2.

3.2 - Algumas Aplicações da Condição de Ordem

Conforme pudemos observar através de alguns exemplos apresentados em 3.1 existem A-métodos cuja ordem de convergência é maior do que a ordem de consistência.

Ainda, cabe aqui registrar que os elementos da soma em $\|d\|_h^A$ (definidos em 2.3) são $O(h^{q+1})$ acumulando-se tal que $\|d\|_h^A = O(h^q)$.

Porém, se uma condição de ordem estiver satisfeita estes erros se acumulam de uma forma mais conveniente, levando a $\|d\|_h^A = O(h^{q+1})$.

Vamos a seguir considerar através de alguns métodos numéricos os resultados apresentados em 3.1.

3.2.1 - Uma primeira questão que pode aqui ser considerada é a da existência ou não de métodos lineares de passo k que satisfaçam a uma condição de ordem.

Considerando tais métodos escritos na forma da definição 1.2.1 , com $\alpha_k = 1$, conforme vimos no exemplo 2.2.1, a sua representação na forma de um método $\hat{A}$ tem como matriz A a matriz de Frobenius:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & \\ -\alpha_0 & -\alpha_1 & -\alpha_2 & & -\alpha_{k-1} \end{pmatrix}$$

Ainda, $d_h(x_j) = h^q \ y^{(q+1)}(x_j) \ t + O(h^{q+1})$, com :

$$t = (0,0,\ldots,c_{q+1})^T \quad \text{e} \quad p^T = (p_1, p_2, \ldots, p_{n-1}, 1)$$

onde c_{q+1} é a constante de erro do método.

Daí concluimos que $\left(p^T\ t\right) = c_{q+1} \neq 0$ e portanto os métodos lineares de passo k não verificam a condição de ordem.

3.2.2 - Seja o método de Adams-Moulton de passo 3 escrito na representação seguinte:

$$z_j = \begin{pmatrix} y_j \\ hy'_j \\ h\ y'_{j-1} \\ h\ y'_{j-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \beta_2 & \beta_1 & \beta_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{j-1} \\ h\ y'_{j-1} \\ hy'_{j-2} \\ hy'_{j-3} \end{pmatrix} +$$

$$+ \quad h\ y'_j \begin{pmatrix} \beta_3 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = A\ z_{j-1} + h\ y'_j\ b \tag{3.9}$$

Consideremos a transformação $a_j = Tz_j$, onde :

$$\begin{pmatrix} y_j \\ h\ y'_j \\ \dfrac{h^2}{2!}\ y''_j \\ \dfrac{h^3}{3!}\ y'''_j \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3/4 & -1 & 1/4 \\ 0 & 1/6 & -1/3 & 1/6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_j \\ hy'_j \\ hy'_{j-1} \\ hy'_{j-2} \end{pmatrix} + O(h^4) \tag{3.10}$$

Aplicando essa transformação em (3.9) obtemos:

$$Tz_j = T\ A\ z_{j-1} + hy'_j\ T\ b = TAT^{-1}\ Tz_{j-1} + hy'_j\ T\ b =$$

$$= TAT^{-1}\ a_{j-1} + hy'_j\ T\ b$$

ou:

$$a_j = B\, a_{j-1} + hy'\bar{b}$$

com $B = T\,AT^{-1}$ e $\bar{b} = T\, b$

Para $\beta_3 = \frac{3}{8}$ obtemos :

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 5/8 & 2/8 & -1/8 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3/4 & -1/2 & 3/4 \\ 0 & -1/6 & -1/3 & 1/2 \end{pmatrix}$$

O método acima tem ordem de consistência 3 e os erros locais de discretização são da forma:

$$d_h^B(x_j) = \frac{h^3}{144}\, Y^{(4)}(x_j)\; t + O(h^4)$$

com $t = (-3,\ 0,\ 18,\ 20)^T$

Determinando p^T obtemos:

$$p^T = (1,\ 1/2,\ 1/6,\ 0\ )$$

Logo, $p^T\ t = 0$ o que nos garante a convergência do método com ordem 4.

3.2.3 - Seja o método linear 3-cíclico de passo 3, escrito na forma (2.2):

$$\begin{pmatrix} 33 & 0 & 0 \\ -144 & 125 & 0 \\ -306 & 531 & 58 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{3j} \\ y_{3j+1} \\ y_{3j+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 57 & -24 \\ 0 & -136 & 117 \\ 0 & 0 & 286 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{3j-3} \\ y_{3j-2} \\ y_{3j-1} \end{pmatrix} +$$

$$+ \quad h\,\phi_{3j}$$

Afim de verificar se a condição de ordem se verifica vamos utilizar o Teorema 3.1.6, isto é, vamos verificar se rank $(L-U,c) \leq 2$.

$$c = L\,t = \begin{pmatrix} c_{q+1}^{(1)} \\ c_{q+1}^{(2)} \\ c_{q+1}^{(3)} \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 33 \\ 261 \\ -225 \end{pmatrix} \quad , \quad a \neq 0$$

daí: $\quad (L-U,Lt) = \begin{pmatrix} 33 & -57 & 24 & 33a \\ -144 & 261 & -117 & 261a \\ -306 & 531 & -228 & -225a \end{pmatrix}$

As primeiras três colunas são linearmente dependentes, pois a sua soma é zero.

Além disso:

$$\begin{vmatrix} 33 & -57 & 33 \\ -144 & 261 & 261 \\ -306 & 531 & -225 \end{vmatrix} = 0 \quad , \text{ logo } \operatorname{rank}(L-U,c) \leq 2$$

Logo, como a ordem de consistência dos 3 níveis do método é 5 e a condição de ordem se verifica, podemos concluir que a ordem de convergência do método é 6.

3.2.4 - Consideremos o método com termos de correção apresentado em 2.2.3:

$$z_j = \begin{pmatrix} y_j \\ y_{j+1} \\ y_{j+2} \\ \bar{y}_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 11/30 & 19/30 \\ 0 & 0 & 11/30 & 19/30 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{j-1} \\ y_j \\ y_{j+1} \\ \bar{y}_j \end{pmatrix} + h\phi_j = Az_{j-1} + h\phi_j$$

cujos auto-valores são $\mu_1=1$, $\mu_2=\mu_3=\mu_4=0$ (logo fortemente estável) e os erros locais de discretização da forma:

$$d_h(x_j) = h^4\ Y^{(5)}(x_j)\ t + O(h^5)$$

com $t = (o,\ o,\ -19,\ 11)^T$

Determinando p^T obtemos: $(o,\ o,\ 11,\ 19)$.

Logo $p^T\ t = o$, assim o método tem ordem de convergência 5.

3.2.5 - Seja o método bloco-implícito com 2 estágios:

$$\begin{pmatrix} y_{2j-1} \\ y_{2j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{2j-3} \\ y_{21-2} \end{pmatrix} + \frac{h}{12} \begin{pmatrix} 5f_{2j-2} + 8f_{2j-1} - f_{2j} \\ 4f_{2j-2} + 16f_{2j-1} + 4f_{2j} \end{pmatrix}$$

$$\xi(h) = \begin{pmatrix} o \\ \eta_o \end{pmatrix}$$

Os erros locais de discretização são da forma:

$$d_h(x_j) = h^3\ c\ \ Y^{(4)}(x_{2j})\ t + O(h^4)$$

com $t^T = (c_4^{(1)}, o)$.

Como $p^T = (0,1)$ temos que $p^T t = 0$; então o método tem ordem de convergência 4.

Dos exemplos apresentados podemos concluir que a condição de ordem é fundamental não apenas como uma condição que certas classes de métodos de discretização satisfazem, mas principalmente pelo seu valor prático na determinação da ordem de convergência do método.

CAPÍTULO 4 - MÉTODOS EQUIVALENTES

Donelson e Hansen ao introduzir os métodos cíclicos [7] perceberam que se os polinômios característicos dos estágios do método fossem distintos entre si não seria possível aplicar o critério das raízes de Dahlquist. Assim, transformaram os métodos em formas "equivalentes", em que todos os níveis tivessem o mesmo polinômio característico, com o objetivo de possibilitar o estudo da estabilidade do método. Porém, não ficou bem definido o conceito de método equivalente.

Tal situação será melhor esclarecida com o desenvolvimento deste capítulo.

Sabemos que um A-método pode apresentar erro local de discretização distinto para discretizações distintas. Assim, quando existir necessidade de se identificar o erro local de discretização com relação a uma discretização Z_h anotá-lo-emos por $d_h^Z(x_j')$.

4.1 - Métodos Equivalentes

4.1.1 - Definição - (Métodos Equivalentes)

Dois métodos:

$$z_o = \zeta(h) \; : \quad z_j = A\, z_{j-1} + h\phi_A(x_j', z_{j-1}, z_j \; ; h) \qquad (4.1)$$

$$\omega_o = \eta(h) \; ; \quad \omega_j = B\omega_{j-1} + h\phi_B(x_j', \omega_{j-1}, \omega_j \; ; h) \qquad (4.2)$$

são ditos equivalentes se (4.2) é obtido de (4.1) mediante uma transformação $\omega_j = T.z_j$ $\; j=0(1)m_h'$, com $T \in \mathbb{R}(s,s)$ e $\det T \neq 0$.

Aparentemente, se (4.1) e (4.2) são equivalentes temos :

a) $B = T\,A\,T^{-1}$

b) $\phi_B(x'_{j-1},\ u,v;\ h) = T\ \phi_A(x'_{j-1},\ T^{-1}\,u,\ T^{-1}\,v;h)$

c) A e B possuem os mesmos divisores elementares.

Assim, métodos equivalentes apresentam as mesmas propriedades de estabilidade.

Porém, em muitos aspectos eles podem deferir consideravelmente , tais como: erro local de discretização, número de valores iniciais, técnicas de controle do erro, procedimentos de mudança do passo.

Seja $z_h\colon I'_h \to \mathbb{R}^s$ convergente com ordem p para uma discretização Z_h de Y, então podemos interpretar w_h com $w_j = Tz_j$ como uma aproximação de ordem p para qualquer discretização W_h de Y com :

$$W_j = T.\,Z_j + c_h(x'_j)\ h^r \qquad j=0(1)m'_h \tag{4.3}$$

onde $r \geq p$ e $c_h\colon I'_h \to \mathbb{R}^s$ limitada para $h \in (0,h_o]$.

Com relação a essa discretização o método (4.2) pode apresentar vantagens sobre (4.1). Esse aspecto representa a principal razão para a introdução do conceito de métodos equivalentes.

O erro local de discretização de (4.2) com relação à discretização W_j definida em (4.3) é da forma:

$$d_h^W(x'_j) = T.\,d_h^Z(x'_j) + [c_h(x'_j) - B\ c_h(x'_{j-1})]\,h^{p-1} + O(h^p) \tag{4.4}$$

onde $d_h^Z(x'_j)$ denota o erro local de discretização de (4.1).

De fato:

$$h\ d_h^W(x'_j) = W_j - BW_{j-1} - h\phi_B(x'_{j-1},\ W_{j-1}, W_j\ ;\ h) \ =$$

$$= TZ_j + c_h(x_j') \, h^p - B\,[T\,Z_{j-1} + c_h(x_{j-1}') \, h^p] -$$

$$- h \; T\phi_A(x_{j-1}', T^{-1} \, W_{j-1}, \; T^{-1} \, W_j \; ; h) \; =$$

$$= T \, Z_j - T \, A \, Z_{j-1} - hT \; \phi_A\Big(x_{j-1}', Z_{j-1} + T^{-1} \; c_h(x_{j-1}') \; h^p, \; Z_j +$$

$$+ T^{-1} c_h(x_j') \; h^p ; \; h\Big) + c_h(x_j') \; h^p - Bc_h(x_{j-1}') \quad h^p \quad =$$

$$= T[Z_j - A \, Z_{j-1} - h\phi_A(x_{j-1}', Z_{j-1}, Z_j ; \; h)] + [c_h(x_j') - Bc_h(x_{j-1}')]h^p +$$

$$+ O(h^p \; = T \; d_h^Z(x_j') + [c_h(x_j') - Bc_h(x_{j-1}')] \, h^p + O(h^{p+1})$$

4.1.2 - Teorema

Se dois métodos equivalentes tem ordem de consistência diferentes então o método de ordem mais baixa satisfaz a condição de ordem.

DEM:

Conforme (4.4) o erro local de discretização de (4.2) segundo $W_j = T \; Z_j + c_h(x_j') \; h^p$ é:

$$d_j^W(x_j') = T \; d_h^Z(x_j') + \Big(c_h(x_j') - Bc_h(x_{j-1}')\Big) \; h^{p-1} + O(h^p)$$

onde $d_j^Z(x_j') = O(h^p)$ denota o erro local de discretização de (4.1). (4.4) tem ordem $q=p-1$, entretanto, devido à sua construção, o método (4.2) converge para W_j com ordem p, se os valores iniciais tem ordem p.

Logo, de resultados anteriores concluimos que (4.2) deve satisfazer a condição de ordem.

Num esforço para reduzir os métodos de Adams-Moulton-Nordsieck de passo k=3 (exemplo 3.2.2) com ordem de consistência q=k, a métodos com ordem de consistência (k+1), Stetter [12, pag. 352], calculou $c_h(x'_j)$ tal que $t_h(x'_j) = c_h(x'_j) - Bc_h(x'_{j-1})$. Mas, apenas nesse caso especial temos a limitação dos $c_h(x'_j)$ e não no caso geral conforme veremos no teorema seguinte.

4.1.3 - Teorema -

Seja um Â-método tendo $d_h(x'_o) = t_h(x'_o)\ h^{q+1}$ e $d_h(x'_j) = t_h(x'_j)\ h^q$ $j=1(1)m'_h$, com $t_h: I'_h \to \mathbb{R}^s$ uniformemente limitado para $h \in (0,h_o]$.

Então existe um (único) $c_h: I'_h \to \mathbb{R}^s$ que é uniformemente limitado para $h \in (0,h_o]$ tal que:

$$c_h(x'_o) = t_h(x'_o);\ c_h(x'_j) - Ac_h(x'_{j-1}) = t_h(x'_j)\ ,\quad j=1(1)m'_h \tag{4.5}$$

se e sòmente se o método satisfaz a condição de ordem.

DEM:

$$(4.5) \Longleftrightarrow \sum_{\ell=0}^{j} A^{j-\ell}\ t_h(x'_\ell) = c_j(h), \qquad j=1(1)m'_h . \tag{4.6}$$

Usando então o lema 3.1.1 temos que c_j é limitado se e sòmente se a condição de ordem está satisfeita, o que completa a demonstração.

4.1.4 - Colorário

Se a condição de ordem se verifica, então existe uma descretização W_h tal que segundo essa discretização o método tem ordem de consistência (q+1).

DEM:

Seja Z_h a discretização do A-método.

Usando (4.5) obtemos:

$$Z_j - c_j\, h^{q+1} = A\, Z_{j-1} + h\phi_A(x'_{j-1},\, Z_{j-1}, Z_j;\, h) - Ac_h(x'_{j-1})\, h^{q+1} =$$

$$= A(Z_{j-1} - c_h(x'_{j-1})\, h^{q+1}) + h\phi_A(x'_{j-1}, Z_{j-1}, Z_j; h)$$

$$W_j = A\, W_{j-1} + h\phi_B(x'_{j-1}, W_{j-1}, W_j; h) + h[\phi_A(x'_{j-1}, Z_{j-1}, Z_j; h) -$$

$$- \phi_B(x'_{j-1}, W_{j-1}, W_j; h)]$$

Logo, o método terá ordem de consistência (q+1) segundo a discretização $W_j = Z_j - c_h(x'_j)\, h^{q+1}$, $j=1(1)m'_h$, pois

$$|\phi_A(x'_{j-1}, Z_{j-1}, Z_j; h) - \phi_B(x'_{j-1}, W_{j-1}, W_j; h)| = O(h^{q+1})$$

devido a (b) da definição 2.1.2.

O teorema 4.1.3 e o corolário 4.1.4 dão uma nova interpretação da condição de ordem, bem como fornecem um critério fácil de se decidir se para um método dado com ordem de consistência q existe um método equivalente com ordem de consistência (q+1), sem a necessidade real de se determinar $c_h(x'_j)$.

4.2 - Exemplos

Ilustraremos, a seguir, alguns dos resultados anteriores.

4.2.1 - Seja o método de Adams-Moulton de passo k=3 com ordem p=4:

$$\begin{aligned} y_j &= y_{j-1} + \frac{h}{24}(9f_j + 19f_{j-1} - 5f_{j-2} + f_{j-3}) \qquad j=3(1)m'_h \\ y_o &= \eta_o,\ y_1 = \eta_1,\ y_2 = \eta_2 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Podemos escrevê-lo na forma:

$$z_2 = \zeta\ ;\ z_j = Az_{j-1} + hf_j b \quad ,\quad j=3(1)m'_h \tag{4.8}$$

com:

$$z_j = \begin{pmatrix} y_j \\ h\ f_j \\ h\ f_{j-1} \\ h\ f_{j-2} \end{pmatrix} \quad ; \quad \zeta = \begin{pmatrix} \eta_2 \\ h\ f(x_2,\eta_2) \\ h\ f(x_1,\eta_1) \\ h\ f(x_o,\eta_o) \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 19/24 & -5/24 & 1/24 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad b = \begin{pmatrix} 3/8 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Seja a transformação (3.10) :

$$Z_j = \begin{pmatrix} Y_j \\ h\ f(x_j,Y_j) \\ h\ f(x_{j-1},Y_{j-1}) \\ h\ f(x_{j-2},Y_{j-2}) \end{pmatrix} \quad ; \quad W_j = \begin{pmatrix} Y_j \\ h\ Y_j' \\ \frac{1}{2}h^2\ Y_j'' \\ \frac{1}{6}h^3\ Y_j''' \end{pmatrix} \quad T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3/4 & -1 & 1/4 \\ 0 & 1/6 & -1/3 & 1/6 \end{pmatrix}$$

Então: $W_j = T\ Z_j + O(h^4) \qquad j=2(1)m_h'$ (4.9)

Para $w_j = T\ z_j$, de (4.8) obtemos o método transformado:

$$w_j = B\ w_{j-1} + h\ f_j\ \ell \qquad j=3(1)m_h' \qquad (4.10)$$

com:

$$B=T\ A\ T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 5/8 & 2/8 & -1/8 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3/4 & -1/2 & 3/4 \\ 0 & -1/6 & -1/3 & 1/2 \end{pmatrix} \; ; \quad \ell = T\ b = \begin{pmatrix} 3/8 \\ 1 \\ 3/4 \\ 1/6 \end{pmatrix} \qquad (4.11)$$

O método (4.10) é conhecido como método de Adams-Moulton-Nordsieck (método A-M-N).

Devido à escolha especial de W_j a mudança de passo k para αh torna-se bastante simples, o que representa a vantagem principal do método.

Tal mudança de passo consiste na substituição de w_{j-1} por $C(\alpha)\ w_{j-1}$, obtendo:

$$w_{j+\alpha} = B\ C(\alpha)\ w_{j-1} + \alpha h\ f(x_{j-1}+\alpha h, y_j)\ \ell$$

como uma aproximação para $W_h(x_{j-1}+\alpha\ h)$, onde:

$$C(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha^3 \end{pmatrix} \qquad (4.12)$$

A representação (4.10) do método é bastante diferente em termos conceituais da notação de Gear [8, cap. 9], embora em ambos os casos é usada uma notação matricial.

O erro local de discretização de (4.10) é:

$$d_h^W\ (x_j) = h^3 Y^{(4)}(x_j)\ t$$

com $\quad t = \dfrac{1}{144} \; (-3,\ 0,\ 18,\ 20)^T.$

B tem os auto-valores $\mu_1=1$, $\mu_2=\mu_3=\mu_4 = 0$. Determinando um auto-vetor à esquerda para $\mu_1=1$ obtemos $\quad p^T=(1,\ 1/2,\ 1/6, 0)$.

Logo, o método satisfaz a condição de ordem pois $p^T\ t=0$ e então converge com ordem $(q+1)=4$

<u>Obs.</u>: Pode-se demonstrar que todos os métodos A-M-N de passo k e ordem (k+1) satisfazem a condição de ordem.

4.2.2 - Mostremos a seguir que a escolha da transformação T (e portanto de W_h) permite reduzir o número de valores iniciais do método.

Consideremos novamente o método (4.7) porém agora com :

$$W_j = \begin{pmatrix} Y_j \\ Y_{j-1} \\ hf(x_j', Y_j) \\ hf(x_{j-1}', Y_{j-1}) \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -5/12 & -8/12 & 1/12 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Novamente temos : $\quad W_j = T\ Z_j + O(h^4) \quad , \quad j=2(1)m_h'$

Para $w_j = T.z_j$, de (4.8) obtemos:

$$w_j = B\ w_{j-1} + h\ f_j\ \ell \qquad , \ j=3(1)m_h' \tag{4.13}$$

com

$$B=T\,A\,T^{-1}=\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 1 & 3/24 \\ 1/2 & 1/2 & 1/3 & 5/24 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \ell=T\,b=\begin{pmatrix} 3/8 \\ -1/24 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

O método (4.13) necessita apenas dois valores iniciais e com a mudança conveniente dos índices tem a forma :

$$\begin{aligned} y_j &= \frac{1}{2}\, y_{j-1} + \frac{1}{2}\, \bar{y}_{j-2} + \frac{h}{24}(9f_j + 24f_{j-1} + 3f_{j-2}) \\ \bar{y}_{j-1} &= \frac{1}{2} y_{j-1} + \frac{1}{2}\, \bar{y}_{j-2} + \frac{h}{24}(-f_j + 8f_{j-1} + 5f_{j-2}), \quad j=2(1)m_h'-1 \qquad (4.14) \\ y_o &= \bar{y}_o = \eta_o \quad ; \quad y_1 = \eta_1(h). \end{aligned}$$

A cada passo, y_{j-1} é corrigido antes da execução do próximo passo. Os erros locais de discretização de (4.14) são :

$$d_h(x_j') = h^3\; Y^{(4)}(\zeta(x_j'))\; t \quad , \qquad j=1(1)(m_h'-1)$$

com $t = \frac{1}{48}(-1,\ 1,\ 0,\ 0)^T$ e $a < \zeta < b$.

Assim, sua ordem de consistência é $q=3$ e o auto-vetor à esquerda para $\mu=1$ é $p^T=(3,3,5,1)$. Logo, $p^T\ t = 0$, o que nos permite concluir que o método converge com ordem 4 pois é verificada uma condição de ordem.

Por um raciocínio análogo podemos construir métodos de passo k com ordem 2k, através de uma transformação sobre métodos de Adams-Moulton com (2k-1) passos e ordem 2k. Tais métodos contêm (k-1) "passos de correção" mas que não exigem avaliações adicionais da função. Esta possibilidade foi primeiro indicada por Gear [8, pág. 151].

CAPÍTULO 5 - ESTABILIZAÇÃO NA MUDANÇA DE PASSO

5.1 - Mudança no passo de integração

Vamos aqui considerar resumidamente o problema da mudança do tamanho do passo durante o processo de integração, ao trabalharmos com métodos numéricos para a obtenção de solução discretizada de (1.1).

Atualmente, os melhores códigos que trabalham com métodos lineares de passo k ou métodos de Runge-Kutta apresentam testes que permitem variar o tamanho do passo de integração a cada passo dado.

Porém, conforme veremos, ao mudarmos o tamanho do passo de h para αh, $\alpha \in \mathbb{R}$, durante o processo de integração, alteramos a fórmula que estávamos considerando passando então para uma nova fórmula que geralmente não preserva a estabilidade.

Para ilustração consideremos o método BDF de Gear de passo 3 e ordem 3.

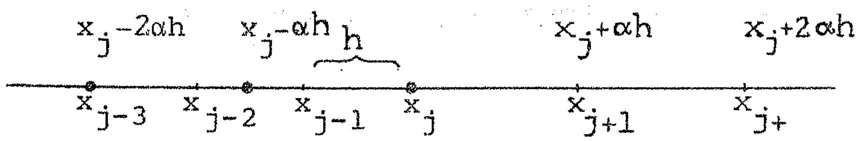
$$y_j - \frac{18}{11} y_{j-1} + \frac{9}{11} y_{j-2} - \frac{2}{11} y_{j-3} = \frac{6}{11} h.f_j \quad j=1(1)m_h' \qquad (5.1)$$

Se durante todo o processo de integração o tamanho h do passo não for alterado utilizamos para a determinação de y_j os três últimos valores calculados y_{j-1}, y_{j-2} e y_{j-3}. Porém, se ao avançarmos de x_{j-1} para x_j o tamanho do passo foi alterado para 2h necessitamos não mais dos três últimos valores calculados mas sim de y_{j-1}, y_{j-3} e y_{j-5}.

Nesta situação particular os valores anteriores necessários já haviam sido calculados, porém, dependendo do valor de α podemos necessitar de valores anteriores que não estão entre os já calculados, ou mesmo tendo sido calculados podem não estar armazenados à disposição do código.

Essas observações, entre outras, nos levam a considerar aqui algumas das técnicas mais utilizadas para a obtenção dos valores anteriores.

Consideremos determinados através de (5.1) os valores y_{j-i} para os pontos x_{j-i}, $i=0(1)3$, igualmente espaçados de h. Desejamos determinar y_{j+1} com $x_{j+1} = x_j+\alpha h$, conforme o esquema seguinte com $\alpha = 3/2$:



(5.2)

Logo, necessitamos para a determinação de y_{j+1} por (5.1) de valores aproximados em $x_j, x_j-\alpha h$, $x_j-2\alpha h$.

Para isso interpolamos os pontos (x_{j-i}, y_{j-i}), $i=0(1)3$, e através do polinômio interpolador obtido determinamos em $x_j-\alpha h$ e $x_j-2\alpha h$ respectivamente $\bar{y}_{j-1}$ e $\bar{y}_{j-2}$.

Aplicamos então (5.1) duas vezes com passo αh e determinamos y_{j+1} e y_{j+2}, procurando assim manter a estabilidade do método.

Porém, conforme veremos no parágrafo seguinte, essa técnica nem sempre mantém a estabilidade do método.

Uma mudança de passo h para αh implica na aplicação de um método multinível (método com mais de um estágio), embora isso possa não transparecer explicitamente.

No exemplo em questão teremos o seguinte método multinível:

$$y_{j+1} + \alpha_3 y_j + \alpha_2 y_{j-1} + \alpha_1 y_{j-2} + \alpha_0 y_{j-3} = \frac{6}{11}\alpha h f_{j+1} \qquad (5.3.a)$$

$$y_{j+2} + \beta_3 y_{j+1} + \beta_2 y_j + \beta_1 y_{j-1} + \beta_o y_{j-2} = \frac{6}{11}\alpha h f_{j+2} \qquad (5.3\text{-}b)$$

onde α_i e β_i , $i=0(1)3$, devem ser determinados convenientemente afim de procurar garantir a ordem 3.

Uma outra técnica de obtenção de valores anteriores que merece ser mencionada é a da obtenção dos valores necessários através de métodos de passo um, por exemplo métodos de Runge-Kutta. .

No caso considerado em (5.2) temos $\bar{y}_{j-2} = y_{j-3}$ e podemos determinar $\bar{y}_{j-1}$ por :

$$\bar{y}_{j-1} = y_{j-2} + h\,\Phi(x_{j-2}, y_{j-2}; h) \qquad (5.4)$$

Considerando então (5.1) obtemos (para $\alpha = 3/2$) :

$$y_{j+1} - \frac{18}{11} y_j + \frac{9}{11}\bar{y}_{j-1} - \frac{2}{11} y_{j-3} = \frac{6}{11}\alpha h\, f_{j+1} \qquad (5.5\text{-}a)$$

$$y_{j+2} - \frac{18}{11} y_{j+1} + \frac{9}{11} y_j - \frac{2}{11}\bar{y}_{j-1} = \frac{6}{11}\alpha h\, f_{j+2} \qquad (5.5\text{-}b)$$

Substituindo (5.4) em (5.5-a/b) obtemos respectivamente (5.6-a) e (5.6-b):

$$z_{j+1} = A_1\, z_j + h\Phi_1 \qquad (5.6\text{-}a)$$

$$z_{j+2} = A_2\, z_{j+1} + h\Phi_2 \qquad (5.6\text{-}b)$$

com:

$$z_{j+i} = (y_{j+i},\ y_{j+i-1},\ y_{j+i-2},\ y_{j+i-3})^T \ , \ i=0(1)2$$

$$A_1 = \begin{pmatrix} \frac{18}{11} & 0 & -\frac{9}{11} & \frac{2}{11} \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad A_2 = \begin{pmatrix} \frac{18}{11} & -\frac{9}{11} & 0 & \frac{2}{11} \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} \frac{6}{11}\alpha f_{j+1} - \frac{9}{11}\Phi \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \Phi_2 = \begin{pmatrix} \frac{6}{11}\alpha f_{j+2} + \frac{2}{11}\Phi \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

5.2 - A Estabilização na Mudança do Passo

Neste parágrafo vamos analisar os efeitos da mudança do tamanho do passo de integração na estabilidade do método.

Conforme vimos no parágrafo anterior, mudar o tamanho do passo de h para αh durante o processo de integração com um método de discretização na forma 4.1, corresponde à aplicação de um método multinível cujos estágios são da forma:

$$z_j = A_j\ z_{j-1} + h\Phi\ (x'_{j-1},\ z_{j-1},\ z_j;\ h) \qquad j=k(1)m'_h \qquad (5.7)$$

com os pontos $x_j^!$ sobre a malha não equidistante:

$$I_h^* = \{x_j \ x_{j+1} = x_j + \alpha_j \ h, \ x_{k-1} = a + (k-1) \ h, \ j = (k-1) \ (1) \ m_h(\alpha)\}$$

A_j e ϕ dependem, normalmente, dos α_j.

Isto nas permite afirmar que os métodos multi-nível são de interesse também para a teoria clássica.

Usando um método linear de passo k (ou um método equivalente) para integrar num ponto $x_k \in I_h^*$ podemos escrever:

$$z_j = \prod_{n=k}^{j} A_n(\alpha_n) z_{k-1} + hG_j \tag{5.8}$$

onde G_j depende de Φ_n, f_n, α_n e A_n, $n=k(1)j$.

Assim, para haver a convergência do processo de integração (5.8) devemos ter:

$$\left\| \prod_{n=k}^{j} A_n(\alpha_n) \right\| \leq C \quad , \qquad C > 0 \tag{5.9}$$

<u>Obs.:</u> A condição (10.3) generaliza o critério das raízes apresentado na definição 4.2.

<u>Definição 5.1</u> :

O método (5.8) é dito estável se para qualquer sequência $\{\alpha_j\}$ e $h \in (0,h_o)$ com $\sum_{j=1}^{m_h} (\alpha_j h) = (b-a)$ e condição (5.9) se verifique.

Normalmente $A_n = A$ para n_i passos e $A_n \neq A$ para m_i passos. A matriz gerada pelo produto das m_i matrizes em que $A_n \neq A$ denomina-se matriz de mudança de passo.

Devemos então pensar em procedimentos que nos levem à verificação da condição (5.9).

Um deles seria impor restrições ao fator de correção α_j, porém , em termos práticos isto não seria de interesse.

Um outro seria mudarmos o passo de tal forma que para qualquer escolha de α_j tivessemos:

$$\| \prod_{n=k}^{j} A_n \| = \| B^{\ell} \| \leq c \quad \text{para algum } \ell.$$

Para isso podemos apontar duas soluções:

(a_1) - fazer com que as matrizes na fase de mudança sejam iguais a A, o que nos leva ao enquadramento do estudo da estabilidade na teoria clássica.

(a_2) - efetuar após cada mudança de passo r passos com um B-método tal que:

$$B^r A^m = B^r \ , \quad m \in \mathbb{N}.$$

Afim de ilustrar a solução apresentada em (a_1) consideremos novamente o método BDF de Gear (5.1), que tem ordem 3.
Consideremos a situação em que tendo integrado em x_j vamos integrar em x_{j+1} e x_{j+2} com passo αh, utilizando as fórmulas:

$$y_{j+1} - \frac{18}{11} y_j + \frac{9}{11} y_{j-1} - \frac{2}{11} y_{j-2} = \alpha h(\beta_3 f_{j+1} + \beta_2 f_j + \beta_1 f_{j-1} + \beta_0 f_{j-2}) \qquad (5.10\text{-a})$$

$$y_{j+2} - \frac{18}{11} y_{j+1} + \frac{9}{11} y_j - \frac{2}{11} y_{j-1} = \alpha h(\gamma_3 f_{j+2} + \gamma_2 f_{j+1} + \gamma_1 f_j + \gamma_0 f_{j-1}) \qquad (5.10\text{-b})$$

Os coeficientes β_i e γ_i , i=0(1)3 são determinados de modo a que (5.10-a/b) tenham ordem 3.

Assim procedendo a matriz A_n, em ambos os estágios, é a matriz A do método e a estabilidade fica garantida recorrendo à teoria clássica.

Isto é, aplicando o teorema 2.3.8 com $k_2 = \alpha\ \beta_3$ L, L a constante de

Lipschitz de f, o método poderia convergir com ordem 3 se $|\alpha_j \beta_3 L D h| < 1$ para todo α_j. Porém, esta condição pode, em certos problemas, impor restrições sobre α_j e no caso stiff sérias restrições sobre h.

Seja agora (4.1) a forma Nordsieck de algum método linear de passo k. Neste caso, conforme vimos em 4.2.1 temos que

$Z_j = (Y_j, hY_j', \frac{1}{2} h^2 Y_j'', \ldots, \frac{1}{k!} h^k Y_j^{(k)})^T$, logo as mudanças de passo h para αh são efetuadas simplesmente substituindo-se A por $C(\alpha).A$ onde $C(\alpha)$ é a matriz definida em (4.12).

De (4.12) podemos concluir que se B é a matriz do método A-M-N temos:

$$B^k = \begin{pmatrix} 1 & b_{11}^{(k)} & b_{12}^{(k)} & \ldots & b_{1k}^{(k)} \\ 0 & & & & \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & 0 & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & & \end{pmatrix}$$

Logo, $B^k A^m = B^k$ para todo $m \in \mathbb{N}$, o que nos permite concluir que todo método linear de passo k na forma Nordsieck é estabilizado com mudança de passo se esta for seguida por k passos A-M-N com o novo passo. Entretanto, essa medida destroi a estabilidade stiff do método.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1]- Albrecht, P. - Discretization methods, 9-th Brasilian Mathematical Coll., P. Caldas-Br., 1973.

[2]- _ - On the order of Composite Multistep Methods for Ordinary Differential Equations, Numer. Math. 29, 1978, 381-396.

[3]- _ - Explicit optimal stability functionals and their application to cyclic discretization methods, Computing 19, 1978, 233-249.

[4]- _ - Die numerische Behandlung gewöhnlicher Differentialgleichungen, Hanser, München, 1979.

[5]- _ - Survey of results on composite integration methods for ordinary differential equations, specially cyclic methods, Information Processing 80, 1980, 711-716.

[6]- Butcher,J - The order of differential equation methods. Proc. Conf. Numer. Sol. O.D.Es., Lecture Notes in Math., vol. 362, 1974, 72-75.

[7]- Donelson,J. e Hansen,E. - Cyclic composite multistep predictor-corrector methods, SIAM J. Num. Analysis, 8, 1971, 137-157.

[8]- Gear,C.W. - Numerical initial value problems in ordinary differential equations, Prentice-Hall, 1971, N.Y.

[9]- Henrici,P. - Discrete variable methods in ordinary differential equations, John Wiley and Sons., 1962.

[10]- Lambert,J.D. - Computational methods in ordinary differential equations, John Wiley and Sons., 4a. ed., 1979.

[11]- Spijker,M.N. - On the structure of error estimates for finite-difference methods, Numer. Math. 18, 1971, 73-100.

[12]- Stetter,H.J. - Analysis of discretization methods for ordinary differential equations, Springer, Berlin, 1973.

[13]- Watts,H.A. & Shampine, L.F. - A-stable block-implicit one-step methods, BIT12, 252-266, 1972.