INSTITUTO DE CIÊNCIAS MATEMÁTICAS DE SÃO CARLOS

ICMSC-USP
PÓS-GRADUAÇÃO

**TÉCNICAS DE CORREÇÃO
PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS
DE VALOR INICIAL SEPARADAMENTE "STIFF"**

Celia Aparecida Zorzo Barcelos

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

SÃO CARLOS - SÃO PAULO
BRASIL

**TÉCNICAS DE CORREÇÃO
PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS
DE VALOR INICIAL SEPARADAMENTE "STIFF"**

Celia Aparecida Zorzo Barcelos

Orientadora: Profª Drª Marielza Jorge Favaro

Dissertação apresentada ao Instituto de
Ciências Matemáticas de São Carlos, da
Universidade de São Paulo, para obten-
ção do título de "Mestre em Matemática"

SÃO CARLOS

1982

TÉCNICAS DE CORREÇÃO PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA DE
PROBLEMAS DE VALOR INICIAL SEPARADAMENTE "STIFF"

CELIA APARECIDA ZORZO BARCELOS

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Departamento de Matemática

Orientadora: Profa. Dra. MARIELZA JORGE FAVARO

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Instituto de ciências matemáticas de São Carlos

"In memoriam" de meu Pai,
OFEREÇO.

Ao meu marido Jose Emilio,
Aos meus filhos Emilio e Daniel,
À minha mãe Natalina Zorzo,
Aos meus irmãos Sergio e Celso,

D E D I C O .

AGRADECIMENTOS

À Professora Dr^a Marielza Jorge Favaro, pela sugestão e orientação deste trabalho e pela amizade e dedicação.

Aos Profs, Drs. Odelar Leite Linhares, Luiz A. Favaro, Célia M. Finazzi de Andrade e Plácido Zoega Táboas meus especiais agradecimentos pelo constante apoio e incentivo durante todos esses anos.

Às Prof^{as}. Dr^a Neide M. Bertoldi Franco e Mônica Furkotter, pela amizade e apoio técnico e humano que sempre me dispensaram.

Ao meu irmão Sérgio Donizette Zorzo pelo constante incentivo e grande colaboração na parte computacional.

Aos amigos do Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos, pelo convívio e amizade.

Ao CNPq e FAPESP pela ajuda financeira através de bolsas de Iniciação Científica e Mestrado, desde o início de meus estudos.

À Universidade Federal de Uberlândia-UFU, pela concessão de auxílio para a publicação.

E a todos que, direta ou indiretamente, colaboraram para a realização deste trabalho.

ÍNDICE

	pag.
INTRODUÇÃO.....	01
CAPÍTULO 0: Prê-requisitos.	
0.1 - Problemas na computação numérica.....	04
0.2 - Resultados usados.....	05
CAPÍTULO 1: Método de passo múltiplo Linear Inverso.	
1.1 - Apresentação dos métodos.....	07
1.2 - Estabilidade dos métodos de passo múltiplo lineares inversos.....	10
1.3 - Especificação dos métodos de passo múltiplo lineares inversos.....	18
CAPÍTULO 2: Correção no espaço dominante - Técnicas "CDS".	
2.1 - Caso Linear.....	28
I - Projeção sobre o espaço subdominante.....	28
II - Minimização do gradiente.....	29
III- Projeção do gradiente sobre o espaço subdominan te.....	33
IV - Redução ao problema escalar.....	36
V - Técnica "CDS" especial.....	43
2.2 - Extensão a problemas não lineares.....	48
I - Projeção do gradiente no espaço subdominante...	49
II - Redução a escalar.....	50
III- Versão melhorada da Técnica Redução a Escalar..	52
IV - Técnica especial usando método inverso.....	54

CAPÍTULO 3 - Método Básico

3.1 - Sobre o método básico.....	55
3.2 - Interprojeção das técnicas "CDS".....	57
3.3 - Métodos de projeção mínima.....	66

CAPÍTULO 4 - Aplicações numéricas.

4.1 - Métodos usados.....	70
4.2 - Técnicas "CDS".....	71
4.3 - Implementação.....	72
4.4 - Exemplos.....	73
4.5 - Conclusões.....	82

Apêndice.....	83
---------------	----

Bibliografia.....	93
-------------------	----

INTRODUÇÃO

O problema de valor inicial

$$y' = f(x, y)$$

$$y, f \in R^m, x \in [a, b]$$

$$y(a) = \eta$$

causa sérias dificuldades computacionais se for "stiff". Vários autores tem estudado tais sistemas de equações diferenciais ordinárias, visto que estes problemas aparecem com frequência na prática. As técnicas de correção surgiram de um trabalho / proposto por Lambert [1975] no qual, considera o problema linear

$$y' = A(x)y + g(x)$$

$$y, g \in R^m, x \in [a, b]$$

$$y(a) = \eta$$

onde os autovalores $\lambda^{(i)}(x)$ de $A(x)$, ($A(x)$ uma matriz $m \times m$) satisfazem em algum intervalo I de x

$$(i) \quad \lambda^{(1)}(x) \text{ real e negativo}$$

$$(ii) \quad |\lambda^{(1)}(x)| \gg \max_{2 \leq i \leq m} |\lambda^{(i)}(x)|$$

O método proposto em [Lambert, 1975] consiste em / usar um método explícito de um passo, denominado método básico, para passar de x_{n+k-1} para x_{n+k} e então, aplicar uma correção $\xi_{n+k}^{(1)} c_{n+k}^{(1)}$, onde $c_{n+k}^{(1)}$ é o autovetor normalizado correspondente a $\lambda^{(1)}(x)$. Como o fator correção $\xi_{n+k}^{(1)}$ é uma função de $\lambda^{(1)}(x_{n+k})$, torna-se necessário calcular $\lambda^{(1)}(x)$ e $c^{(1)}(x)$ em cada ponto da discretização. O resultado dessa correção é que a restrição no comprimento de passo h imposta pela estabilidade é a mesma da exigida se $\lambda^{(1)}(x)$ não estivesse presente,

portanto, não será muito grande.

A seguir, surgiram os trabalhos de *Alfeld* e *Lambert* com novas técnicas de correção, adequadas para problemas não lineares.

O objetivo do nosso trabalho foi considerar generalizações da idéia inicial introduzida por *Lambert*. Dentro deste propósito procuramos formalizar a teoria das técnicas de correção, indicando inclusive, a escolha conveniente do método básico e analisando a estabilidade das técnicas "CDS":

$$\tilde{y}_{n+k} = B y_n$$

$$y_{n+k} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)}$$

Alguns resultados importantes para o desenvolvimento do trabalho foram considerados no capítulo 0. Em seguida, definimos os métodos de passo múltiplo lineares inversos [*Alfeld*, 1979/I], que foram aplicados na técnica (V.5) para problemas lineares (IV.1 para problemas não lineares). Estudamos a ordem, o erro constante, e o comportamento dos métodos quanto à estabilidade absoluta e a infinito-estabilidade (capítulo 1).

A ênfase deste capítulo 1 ficou com o Teorema 1.1, apresentando resultados sobre a ordem máxima dos métodos infinitamente estáveis e fortemente infinitamente estáveis. Acrescentamos ainda, uma lista de métodos de k - passos lineares inversos de ordem $k-2$, para $k = 3, 4, 5$ e 6 com parâmetros livres.

No capítulo 2, discutimos vários fatores de correção $\xi_{n+k}^{(i)}$ com análise da estabilidade das técnicas "CDS" [*Alfeld*; *Lambert*, 1977]. No final deste capítulo fizemos uma extensão a problemas não lineares.

No capítulo 3, estudamos os efeitos da não linearida-

dade, dos erros na aproximação do autosistema dominante e a variação do autosistema com a variável independente x (Interprojeção). Demos também, uma classe de métodos básicos, que diminuem o efeito da interprojeção [Alfeld, 1979/II].

Finalmente, no capítulo 4, apresentamos exemplos de sistemas lineares e não lineares, cujos resultados numéricos aparecem tabelados. Fornecemos, além disso, algumas conclusões de tais ilustrações e as listagens das implementações das técnicas.

CAPÍTULO 0 - Prê-requisitos

Neste capítulo fazemos um apanhado geral sobre o problema "stiff" em equações diferenciais ordinárias e apresentamos alguns resultados necessários.

0.1 - Problemas na computação numérica

Consideramos o problema de valor inicial

$$(0.1) \quad \begin{aligned} y' &= f(x, y) \\ y(a) &= \eta \end{aligned} \quad y, f \in \mathbb{R}^m, \quad x \in [a, b]$$

onde $f(x, y)$ é definida e contínua em

$$S = \{(x, y) / a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty\} \text{ a e b finitos.}$$

Se existir uma constante $L > 0$, tal que

$$|f(x, y) - f(x, y^*)| \leq L|y - y^*| \quad \forall x \in [a, b] \text{ e quaisquer } y \text{ e } y^* \in \mathbb{R},$$

então sabe-se [Lambert, 1973] que (0.1) tem uma única solução $y(x)$ contínua e diferenciável em $[a, b]$.

Sabemos que a solução existe e é única mas nem sempre é possível obtê-la em sua forma analítica. Quando isto acontece optamos pela discretização do problema que consiste em calcularmos o valor da solução $y(x)$ apenas em um conjunto de pontos discretos $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, daí calculamos $y_0, y_1, \dots, y_n$, que são aproximações para $y(x_0), y(x_1), \dots, y(x_n)$, respectivamente.

Se o problema (0.1) for "stiff", isto é, se os autovalores do Jacobiano $\frac{\partial f}{\partial y}$ estão amplamente distribuídos no semiplano-esquerdo, deparemos com sérias dificuldades computacionais. A presença de autovalores com parte real negativa muito grande, exige uma forte restrição no comprimento de passo se o método aplicado tem região de estabilidade absoluta finita. Por outro lado, se o método aplicado tem região de estabilidade absoluta infinita no semiplano-esquerdo (por exemplo: A-estabilidade [Dahlquist, 1963], $A(\alpha)$ -estabilidade [Odeon, 1971], $A(0)$ -estabilidade [Cryer, 1973],

"stiff"- estabilidade (Gear, 1971], inevitavelmente deparamos com um método implícito, o qual resulta em equações diferenciais implícitas que, se forem lineares, teremos problemas computacionais com inversão de matrizes e se forem não lineares, temos que resolvê-las não por iteração simples; a qual falha na convergência, mas por expansão de Newton.

Para ilustração, servimo-nos do seguinte exemplo:

$$y_1' = -y_1 + 10^8 y_3(1-y_1) \quad y_1(0) = 1$$

$$y_2' = 10y_2 + 3 \times 10^7 y_3(1-y_2) \quad y_2(0) = 0$$

$$y_3' = -y_1' - y_2' \quad y_3(0) = 0$$

cujos autovalores são $\lambda_1 = -3 \times 10^7 \rightarrow -4 \times 10^7$,

$\lambda_2 = -1 \rightarrow -8.6$ e $\lambda_3 = 0$ para $x \in [0,1]$.

Se vamos integrar numericamente pelo método de Runge - Kutta de 4ª ordem explícito, precisamos ter $h < 5 \times 10^{-8}$ que para percorrer o intervalo $[0,1]$ precisamos de 20.000.000 de passos. Isto ocorre porque a região de estabilidade absoluta do método de Runge - Kutta é limitada (contida num compacto), inadequada para problemas "stiff".

0.2 - Resultados usados

Consideremos $y' = Ay + g(x)$ $y, g \in \mathbb{R}^m$, A - matriz $m \times m$, cujos autovalores são $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$, assumidos distintos.

Sejam c_i os autovetores associados, então a solução fica: $y(x) = \sum_{i=1}^m k_i e^{\lambda_i x} c_i + \psi(x)$

Definição 0.1 - O sistema acima é "stiff" se

i) $\operatorname{Re} \lambda_i < 0 \quad i = 1, \dots, m$

ii) $(\max_{1 \leq i \leq m} |\lambda_i|) / (\min_{1 \leq i \leq m} |\lambda_i|) = S \gg 1$

S é dito razão de "stiffness".

Um sistema $y' = A(x)y + g(x)$ com coeficientes variáveis ou um sistema não linear $y' = f(x,y)$ é dito "stiff" em intervalo I , se para todo $x \in I$, os autovalores do Jacobiano $\frac{\partial f}{\partial y}$ satisfazem (i) e (ii).

Obs.01 - A condição (i) não é essencial para sistemas lineares com coeficientes variáveis e problemas não lineares.

02 - Neste trabalho vamos considerar problemas cuja "stiffness" acontece por causa de um conjunto (que suponhamos pequeno) de problemáticos autovalores $\lambda^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, s$ que são reais, negativos e bem separados do resto. Não exigimos, no entanto, que todos os autovalores tenham parte real negativa.

Sejam $c_n^{(i)} = c^{(i)}(x_n)$ e $d_n^{(i)} = d^{(i)}(x_n)$, $i = 1, 2, \dots, m$ os autovetores à direita e à esquerda de $A(x_n)$, ou seja

$$A(x_n)c_n^{(i)} = \lambda^{(i)}c_n^{(i)} \quad \text{e} \quad d_n^{(i)}A(x_n) = \lambda^{(i)}d_n^{(i)}$$

onde os $c_n^{(i)}$ são vetores coluna e os $d_n^{(i)}$ são vetores linha. Como $A(x_n)$ e $A^t(x_n)$ tem os mesmos autovalores, os $d_n^{(i)}$ podem ser interpretados também como $A^t(x_n)d_n^{(i)} = \lambda^{(i)}d_n^{(i)}$, onde $d_n^{(i)}$ agora é vetor coluna.

Vamos considerar a seguinte normalização

$$i) \quad \langle c_n^{(i)}, d_n^{(i)} \rangle = (c_n^{(i)})^T d_n^{(i)} = 1 \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$ii) \quad \|c_n^{(i)}\| = \langle c_n^{(i)}, c_n^{(i)} \rangle^{1/2} = 1 \quad i = 1, 2, \dots, m$$

(0.1.1) iii) A 1ª componente diferente de zero de $c_0^{(i)}$ é positiva

iv) Se $t c_n^{(i)}$ denota a t -ésima componente de $c_n^{(i)}$, $t = 1, 2, \dots, m$ e $\hat{t}^{(n)} c_n^{(i)}$ é a componente de $c_n^{(i)}$ com módulo máximo (a 1ª delas, se a máxima não for única) então

$$\text{sgn} \{ \hat{t}^{(n)} c_{n+1}^{(i)} \} = \text{sgn} \{ \hat{t}^{(n)} c_n^{(i)} \} \quad i = 1, 2, \dots, m$$

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

CAPÍTULO 1

Método de Passo Múltiplo Linear Inverso

Neste capítulo vamos estudar métodos para a solução numérica de um problema valor inicial de equações diferenciais ordinárias, que calculam uma aproximação para a derivada, e então, para a solução exata. Tais métodos foram introduzidos em [Alfeld, 1979/1].

Tais métodos devem ser aplicados para p.v.i. onde a solução exata é explicitamente dada em função de uma derivada.

1.1- Apresentação dos métodos

Consideremos o p.v.i.

$$(1.1.1) \quad \begin{array}{ll} F(x, y, y') = 0 & y(a) = \eta \\ y, F \in R^m & x \in [a, b] \end{array}$$

Casos especiais de (1.1.1) são

$$(1.1.2) \quad \begin{array}{ll} y' = f(x, y) & \\ y(a) = \eta & y, f \in R^m \quad x \in [a, b] \end{array}$$

e

$$(1.1.3) \quad \begin{array}{ll} y = g(x, y') & \\ y'(a) = w & y, g \in R^m \quad x \in [a, b] \end{array}$$

Nem sempre (1.1.2) pode ser transformado em (1.1.3).

Mas, para o desenvolvimento da teoria, em questão, vamos supor que (1.1.2) pode ser transformado em (1.1.3) e vice-versa.

Os problemas do tipo (1.1.2) podem ser resolvidos numericamente, usando um método de passo múltiplo linear explícito.

$$(1.1.4) \quad \sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j} \quad \alpha_k = 1$$

ver [Lambert, 1973]

Os problemas do tipo (1.1.3) podem ser resolvidos numericamente pelos métodos de passos múltiplo lineares inversos de

finidos por

Definição 1.1.1. - Um método de passo múltiplo linear inverso é da
do por

$$(1.1.5) \quad h^{-1} \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\alpha}_j y_{n+j} = \sum_{j=0}^k \hat{\beta}_j f_{n+j}$$

$$\text{onde } \hat{\beta}_k = 1 \quad \text{e} \quad y_{n+j} = g(x_{n+j}, f_{n+j})$$

Ao método (1.1.5) associamos o operador diferença:

$$(1.1.6) \quad T(z(x), h) = \sum_{j=0}^k (h^{-1} \hat{\alpha}_j z(x+jh) - \hat{\beta}_j z'(x+jh))$$

$$\text{com } \hat{\alpha}_k = 0$$

onde $z(x)$ é uma equação teste arbitrária, continuamente diferenciável.

Definição 1.1.2 - O Erro de Truncamento Local de um método de passo múltiplo linear inverso em x_{n+k} é definido por

$$T(y(x_n), h) = h^{-1} \hat{C}_0 y(x_n) + \hat{C}_1 y'(x_n) + \dots + \hat{C}_q h^{q-1} y^{(q)}(x_n) + \dots$$

onde $y(x)$ é a solução exata de (1.1.3), e

$$\hat{C}_0 = \hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2 + \dots + \hat{\alpha}_k = \sum_{j=0}^k \hat{\alpha}_j$$

$$\hat{C}_1 = \sum_{j=0}^k (j \hat{\alpha}_j - \hat{\beta}_j)$$

$$\hat{C}_q = \frac{1}{q!} \sum_{j=0}^k j^q \hat{\alpha}_j - \frac{1}{(q-1)!} \sum_{j=0}^k j^{q-1} \hat{\beta}_j$$

$$q = 1, 2, 3, \dots$$

$$\text{onde } 0^0 = 1 \quad \text{e} \quad \alpha_k = 0$$

Expandindo (1.1.6) em série de potências e agrupando os termos semelhantes, temos:

$$T(z(x), h) = \sum_{j=0}^k h^{-1} \hat{\alpha}_j z(x+jh) - \sum_{j=0}^k \hat{\beta}_j z'(x+jh)$$

$$\begin{aligned}
&= h^{-1} \hat{\alpha}_0 z(x) + h^{-1} \hat{\alpha}_1 z(x+h) + h^{-1} \hat{\alpha}_2 z(x+2h) + \dots \\
&+ h^{-1} \hat{\alpha}_k z(x+kh) - \hat{\beta}_0 z'(x) - \hat{\beta}_1 z'(x+h) - \hat{\beta}_2 z'(x+2h) - \\
&- \dots - \hat{\beta}_k z'(x+kh) =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= h^{-1} \hat{\alpha}_0 z(x) + h^{-1} \hat{\alpha}_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!} z^n(x) + \\
&+ h^{-1} \hat{\alpha}_2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2h}{n!} \right)^n z^n(x) + \dots + h^{-1} \hat{\alpha}_k \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{kh}{n!} \right)^n z^n(x) - \\
&- \hat{\beta}_0 z'(x) - \hat{\beta}_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!} z^{n-1}(x) - \dots - \\
&- \hat{\beta}_k \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{kh}{n!} \right)^n z^{n+1}(x) =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= h^{-1} \sum_{j=0}^k \hat{\alpha}_j z(x) + \left[\sum_{j=1}^k j \hat{\alpha}_j - \sum_{j=0}^k \hat{\beta}_j \right] z^{(1)}(x) + \\
&+ h \left[\frac{1}{2!} \sum_{j=1}^k j^2 \hat{\alpha}_j - \sum_{j=1}^k j \hat{\beta}_j \right] z^{(2)}(x) + \dots + \\
&+ h^{q-1} \left[\frac{1}{q!} \sum_{j=1}^k j^q \hat{\alpha}_j - \frac{1}{(q-1)!} \sum_{j=1}^k j^{q-1} \hat{\beta}_j \right] z^{(q)}(x) + \\
&+ \dots + \dots
\end{aligned}$$

Portanto

$$\begin{aligned}
T(z(x); h) &= h^{-1} \hat{C}_0 z(x) + \hat{C}_1 z^{(1)}(x) + h \hat{C}_2 z^{(2)}(x) + \dots + \\
&+ h^{q-1} \hat{C}_q z^{(q)}(x) + \dots
\end{aligned}$$

onde $z^0(x) = z(x)$ e $\hat{C}_0, \hat{C}_1, \dots, \hat{C}_q$ são definidos na definição 1.1.2.

A partir destas fórmulas, podemos definir a ordem do método sem envolver a solução do problema.

Definição 1.1.3 - Um método de passo múltiplo linear inverso é de ordem p se

$$\hat{C}_0 = \hat{C}_1 = \dots = \hat{C}_{p+1} = 0 \quad \text{e} \quad \hat{C}_{p+2} \neq 0$$

onde $\hat{C}_{p+2}$ é chamado Erro constante

Quando o método tem ordem $p \geq 1$ é dito ser consistente.

Pelos resultados anteriores, segue a seguinte proposição:

Proposição 1.1 - Um método de passo múltiplo linear inverso é de ordem p , se

$$T(y(x), h) = \hat{C}_{p+2} h^{p+1} y(x) + O(h^{p+2}) \quad , \quad \hat{C}_{p+2} \neq 0$$

Como para um método de passo múltiplo linear inverso, de k passos (1.1.5) temos $2k$ parâmetros livres ($\hat{\alpha}_j$ e $\hat{\beta}_j$), podemos esperar como ordem máxima $(2k - 2)$, pois se $\hat{C}_{2k} \neq 0$ e $\hat{C}_{2k-j} = 0$ para $j = 1, 2, \dots, 2k$ significa que o método tem ordem $2k - 2$.

1.2 - Estabilidade dos métodos de passo múltiplo lineares inversos

A estabilidade de um método de passo múltiplo linear inverso é governada pelo seu polinômio de estabilidade.

Para isto, vamos introduzir os polinômios característicos.

Definição 1.1.4 - Os polinômios

$$\rho(r) = \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\alpha}_j r^j \quad \text{e}$$

$$\sigma(r) = \sum_{j=0}^k \hat{\beta}_j r^j$$

são chamados, primeiro e segundo polinômio característico, respectivamente.

Seja $\hat{R}_{n+k}$ o erro de arredondamento ocorrido na n -ésima aplicação do método. Então, seguindo um desenvolvimento análogo ao efetuado para métodos de passo múltiplo lineares, determinamos o seguinte polinômio:

$$(1.2.1) \quad \hat{\Pi}(r, \bar{h}) = \hat{p}(r) - \bar{h} \hat{o}(r) \quad \bar{h} \in C$$

denominado polinômio de estabilidade.

Motivados pela idéia de saber se o erro global cresce ou não com n , vamos definir estabilidade absoluta a partir do polinômio característico.

Definição 1.1.5 - Um método de passo múltiplo linear inverso é dito absolutamente estável para um dado $\bar{h} \in C$, se para aquele $\bar{h}$, as raízes r_s de (1.2.1) satisfazem

$$|r_s| < 1 \quad s = 1, 2, \dots, k$$

e é absolutamente instável, para aquele $\bar{h}$, em caso contrário.

Definição 1.1.6 - O conjunto $R = \{ \bar{h} \in C / (1.1.5) \text{ é absolutamente estável para } \bar{h} \}$ é chamado região de estabilidade absoluta. E o conjunto $C - R$ é chamado região de instabilidade absoluta.

E assim, formalizando os resultados, temos:

Proposição 1.2 - Dado $\bar{h} = h \lambda \in C$. Um método de passo múltiplo linear inverso é absolutamente estável se e somente se a solução numérica $\{y_n\}$ de $y' = \lambda y$; $y, \lambda \in C$ por (1.1.5) com comprimento de passo h , tende para zero quando n tende para infinito.

Dem.: Um método de passo múltiplo linear inverso aplicado à equação teste

$$y' = \lambda y \quad y, \lambda \in \mathbb{C}$$

dá como solução numérica

$$y_n = \sum_{j=1}^k \hat{\gamma}_j \hat{\xi}_j^n \quad \text{onde}$$

$\hat{\gamma}_j$ são constantes arbitrárias e $\hat{\xi}_j$ são as raízes do polinômio de estabilidade, daí

$$y_n \rightarrow 0 \iff |\hat{\xi}_j| < 1 \quad \forall j, j = 1, 2, \dots, k$$

Para $h\lambda = 0$, notemos que:

- a) se $\lambda = 0$, (1.1.5) não pode ser aplicado a $y' = \lambda y$; $y, \lambda \in \mathbb{C}$ porque esta última equação não pode ser transformada na forma (1.1.3).
- b) Se $h = 0$, (1.1.5) não faz sentido, pois então, teríamos $h^{-1} = \infty$

Deste modo, a maior área de aplicação dos métodos de passo múltiplo lineares inversos, é aquela que apresenta situações nas quais $h\lambda$ é grande e negativo. Assim, é importante que os zeros de $\hat{\Pi}(r, \bar{h})$ sejam, em módulo, menores do que um, para h suficientemente grande.

Como os zeros do polinômio $\hat{\Pi}(r, \bar{h})$ tendem para os zeros de $\hat{\sigma}(r)$ quando $|\bar{h}| \rightarrow \infty$ [Henrici, 1962], é de interesse considerar métodos (1.1.5) cujos polinômios característicos possuam somente zeros de módulo menor que 1 (polinômios de Schur).

Definição 1.1.7. Um método de passo múltiplo linear inverso é infinitamente - estável, se $\hat{\sigma}(r)$ é um polinômio de Schur.

O conceito de infinito - estabilidade é dual do conceito de zero - estabilidade, isto é, a primeira acontece quando $|h\lambda| \rightarrow \infty$ e a última quando $h\lambda \rightarrow 0$

Na prática, esta interpretação não é tão direta pois h não tende a infinito em um problema sobre um intervalo finito, e

λ é independente no problema de valor inicial. Mas consideremos a seguinte família de p.v.i.

$$y' = \lambda (y - z(x)) + z'(x) \quad \eta = z(a)$$

cuja solução exata $z(x)$ não depende de λ , que tende para infinito.

Se tomarmos λ tendendo para infinito (em módulo) a solução da equação teste $y' = \lambda y$, ($\lambda \in \mathbb{R}$) tende para zero mais rapidamente quanto maior for $-\lambda$.

Gostaríamos que esta propriedade pudesse ser aplicada aos métodos de passo múltiplo lineares inversos.

Se $\hat{\Pi}(r, \bar{h})$ tiver raízes longe do zero, quando $|\bar{h}| \rightarrow \infty$, a solução numérica $y_n = \sum_{j=1}^k \hat{\gamma}_j \hat{\xi}_j^n$, em geral, não tenderá para zero mais rápido que $\hat{\gamma}_j^n$, onde $\hat{\gamma}_j \neq 0$ é uma constante independente de h .

Se, no entanto, todas as raízes de $\hat{\Pi}(r, \bar{h})$ tendem para zero; quando $|\bar{h}| \rightarrow \infty$, então a velocidade que a solução numérica tenderá para zero, poderá ser bastante alta.

Como as raízes de $\hat{\Pi}(r, \bar{h})$ tendem às de $\hat{\sigma}(r)$ quando $\bar{h} \rightarrow \infty$, então, segue a seguinte definição:

Definição 1.1.8 - O método de passo múltiplo linear inverso (1.1.5), de k passos é dito fortemente infinitamente estável se $\hat{\sigma}(r) = r^k$.

Assim, um método fortemente infinitamente estável é do tipo

$$f_{n+k} = h^{-1} \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\alpha}_j y_{n+j}$$

A proposição seguinte, indica a ordem máxima de um método fortemente infinitamente estável.

Proposição 1.3 - A ordem máxima de um método de passo múltiplo linear inverso fortemente infinitamente - estável é $k - 2$.

A demonstração é imediata, pois se temos k parâmetros $\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_{k-1}$, livres, poderíamos no máximo conseguir $\hat{C}_0 = 0, \hat{C}_1 = 0, \dots, \hat{C}_k = 0$, isto é, a ordem máxima obtida seria $k - 2$.

Proposição 1.4 - Um método de passo múltiplo linear inverso fortemente infinitamente estável consistente tem número de passos $k \geq 3$.

Teorema 1.1.

a) Se $\hat{\sigma}(r)$ é um polinômio de grau k (com $\hat{\beta}_k = 1$) então, existe um único polinômio $\hat{\rho}(r)$ de grau $k-1$, tal que o método de passo múltiplo linear inverso definido por $\hat{\sigma}(r)$ e $\hat{\rho}(r)$ tem ordem pelo menos $k-2$.

b) A ordem máxima de um método de passo múltiplo linear inverso infinitamente - estável é $k-2$.

Dem.:

a) Seja a função $\Psi(\xi) = \hat{\rho}(\xi) - \ln'(\xi)\hat{\sigma}(\xi)$ associada ao método linear inverso. Então (1.1.5) é de ordem p se $\Psi(\xi)$ possui um zero de ordem exatamente $p+2$ em $\xi = 1$.

De fato, supomos que o operador diferença linear tenha ordem p . Então a expansão do operador é da $O(h^{p+1})$ para qualquer função suficientemente diferenciável.

Em particular para e^x , com $x_n = 0$, temos:

$$T(e^{x_n}, h) = h^{-1} \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\alpha}_j (e^h)^j - \sum_{j=0}^k \hat{\beta}_j (e^h)^j = O(h^{p+1})$$

assim,

$$\hat{\rho}(e^h) - h \hat{\sigma}(e^h) = O(h^{p+2})$$

colocando $\xi = e^h$, $h = \ln \xi$, temos:

$$\hat{\rho}(\xi) - \ln \xi \hat{\sigma}(\xi) = \Psi(\xi) = O(\xi^{p+2})$$

donde $\Psi(\xi)$ tem um zero de ordem $p+2$ em $\xi = 1$.

Reciprocamente, se $\Psi(\xi)$ tem um zero de ordem $p+2$ num ponto $\xi = 1$, então, $\Psi(\xi) = 0 (\xi^{p+2})$ e daí segue que $T(e^x, h) = 0 (h^{p+1})$. Como a ordem de (1.1.5) depende sômente dos coeficientes $\hat{\alpha}_j$ e $\hat{\beta}_j$, o método linear inverso é de ordem p .

Notemos que a função $\ell_n(\xi) \hat{\sigma}(\xi)$ é holomorfa em $\xi = 1$, ou seja, existem coeficientes q_j , $j = 0, 1, 2, \dots$, tal que:

$$\ell_n(\xi) \hat{\sigma}(\xi) = q_0 + q_1(\xi-1) + q_2(\xi-1)^2 + \dots$$

Se colocarmos

$$\hat{\rho}(\xi) = q_0 + q_1(\xi-1) + \dots + q_{k-1}(\xi-1)^{k-1}$$

a função $\Psi(\xi)$ terá um zero de ordem k em $\xi = 1$ e portanto (1.1.5) é de ordem $(k-2)$.

b) Seja $\hat{\sigma}(r)$ um polinômio de Schur. Vamos introduzir uma nova variável $z = x+iy$ pela transformação: $z = \frac{\xi-1}{\xi+1}$ e $\xi = \frac{1+z}{1-z}$

Esta transformação leva o disco $|\xi| < 1$, no semiplano esquerdo $\operatorname{Re} z < 0$, o círculo $|\xi| = 1$ sobre o eixo imaginário; o ponto $\xi = 1$ em $z = 0$ e o ponto $\xi = -1$ em $z = \infty$.

Consideremos as funções $r(z)$ e $s(z)$ definidas por:

$$r(z) = (1-z)^k \hat{\rho}\left(\frac{1+z}{1-z}\right)$$

$$s(z) = (1-z)^k \hat{\sigma}\left(\frac{1+z}{1-z}\right)$$

que são polinômios de grau menor ou igual a k .

Assim, $s(z) = a_0 + a_1 z + \dots + a_k z^k$, onde os a_j , $j = 0, 1, \dots, k$ são reais e como $\hat{\sigma}(\xi)$ é um polinômio de Schur as partes imaginárias de $s(z)$ são todas estritamente negativas e portanto todos os coeficientes de $s(z)$ são não nulos e de mesmo sinal [Henrici, 1962].

Definimos

$$p(z) = (1-z)^k \psi\left(\frac{1+z}{1-z}\right) = (1-z)^k \left[\hat{\rho}\left(\frac{1+z}{1-z}\right) - \ell_n\left(\frac{1+z}{1-z}\right) \hat{\sigma}\left(\frac{1+z}{1-z}\right) \right] =$$

$$= (1-z)^k \left[\frac{r(z)}{(1-z)^k} - \ell_n\left(\frac{1+z}{1-z}\right) \frac{s(z)}{(1-z)^k} \right]$$

$$p(z) = r(z) - \ell_n\left(\frac{1+z}{1-z}\right) s(z)$$

A função $p(z)$ tem um zero de ordem $p+2$ em $z=0$ se e só se $\psi(\xi)$ tem um zero de ordem $p+2$ em $\xi = 1$ e deste modo, como vimos na parte a, o método (1.1.5) é de ordem p .

Mas, se (1.1.5) é de ordem p , então:

$$r(z) = b_0 + b_1 z + b_2 z^2 + \dots + b_{p+1} z^{p+1}, \text{ onde}$$

$$\ell_n\left(\frac{1+z}{1-z}\right) s(z) = b_0 + b_1 z + b_2 z^2 + \dots \text{ (lembrando que}$$

$$\ell_n\left(\frac{1+z}{1-z}\right) s(z) \text{ é holomorfa em } z = 0 \text{ [Henrici, 1962]}$$

Como o grau de $r(z)$ não deve exceder $k-1$, para a existência de um método de passo múltiplo linear inverso de ordem $p > k-2$, deve-se ter $b_k = b_{k+1} = \dots = b_{p+1} = 0$.

Provaremos, então que, para um método linear inverso infinita

mente estável temos $b_k \neq 0$ e assim sua ordem máxima é $k - 2$. De fato,

$$\ln\left(\frac{1+z}{1-z}\right) s(z) = \sum_{i=0}^{\infty} b_i z^i = \left(\sum_{i=0}^{\infty} c_{2i+1} z^{2i+1}\right) \left(\sum_{j=0}^k a_j z^j\right)$$

pois, $\ln\left(\frac{1+z}{1-z}\right) = 2\left(z + \frac{1}{3} z^3 + \frac{1}{5} z^5 + \dots\right)$

Então,

$$b_0 = 0$$

$$b_1 = c_1 a_0$$

$$b_2 = c_1 a_1$$

$$b_3 = c_1 a_2 + c_3 a_0$$

$$b_4 = c_1 a_3 + c_3 a_1$$

.....

.....

$$b_{2i} = a_1 c_{2i-1} + a_3 c_{2i-3} + \dots + a_{2i-1} c_1$$

$$b_{2i+1} = a_0 c_{2i+1} + a_2 c_{2i-1} + a_4 c_{2i-3} + \dots + a_{2i} c_1$$

para $i = 1, 2, 3, \dots$, e $a_j = 0$ para $j > k$

Notemos que os c_{2i+1} , $i = 1, 2, 3, \dots$, são estritamente positivos.

Para isto, definimos:

$$\begin{aligned} \eta(z) &= \ln\left(\frac{1+z}{1-z}\right) = \sum_{j=0}^{\infty} c_{2j+1} z^{2j+1} = \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \left[\frac{n^{(2j+1)}(0)}{(2j+1)!} \right] z^{2j+1} \end{aligned}$$

$$\eta'(z) = \frac{2}{(1-z^2)} = \sum_{j=0}^{\infty} d_{2j} z^{2j} = \sum_{j=0}^{\infty} \left[\frac{n^{(2j+1)}(0)}{(2j)!} \right] z^{2j}$$

que é uma função par e holomorfa em $z = 0$

$$\begin{aligned}
 \text{De } (1-z^2)\eta'(z) &= (1-z^2) \sum_{j=0}^{\infty} d_{2j} z^{2j} = \\
 &= d_{20} + \sum_{j=0}^{\infty} [d_{2j+1} - d_{2j}] z^{2j+2} = 2
 \end{aligned}$$

segue, por indução que $d_{2j} = 2$, $j = 0, 1, 2, \dots$

Assim, obtemos:

$$2 = d_{2j} = \frac{\eta^{(2j+1)}(0)}{(2j)!}, \text{ daí}$$

$$\eta^{(2j+1)}(0) = 2(2j)! \text{ e portanto}$$

$$c_{2j+1} = \frac{2(2j)!}{(2j+1)!} = \frac{2}{2j+1}$$

Além disso, como vimos anteriormente, os a_j são não nulos e de mesmo sinal. Destes resultados segue que $b_k \neq 0$.

1.3 Especificação dos métodos de passo múltiplo lineares inversos

Aquí apresentaremos uma lista de métodos de K - passos lineares inversos de ordem $k-2$ para $k = 2, 3, 5, 6$ com parâmetros livres e $\bar{h} \in \mathbb{R}$.

Para o único método fortemente infinitamente estável (para cada k acima) é determinado o valor máximo $(h\lambda_{\min})$ de $-h\lambda$ para o qual os zeros do polinômio de estabilidade tem módulo maior ou igual a 1. Para determinarmos esse valor máximo de $-h\lambda$, observamos que se $\Pi(r, \bar{h}) = -\bar{h}r^n + a_{n-1}r^{n-1} + \dots + a_1r + a_0$ é o polinômio de estabilidade do método e r é a raiz de $\Pi(r, \bar{h})$, tal que

$$|r| \geq 1, \quad -\bar{h} \leq \sum_{i=0}^{n-1} |a_i| \text{ e assume o máximo nos métodos estudados,}$$

se $-\bar{h} = \sum_{i=0}^{n-1} |a_i| \Pi(-1, \bar{h}) = 0 \rightarrow \max \{-\bar{h}\} = \sum_{i=0}^{n-1} |a_i|$ para $|r| \geq 1$.

I - $k = 3$; $p = 1$, temos:

$$\sum_{j=0}^3 \hat{\beta}_j f_{n+j} = h^{-1} \sum_{j=0}^2 y_{n+j} \text{ com } \hat{\beta}_3 = 1$$

como $p = 1$, devemos ter

$$\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2 = 0$$

$$\hat{\alpha}_1 + 2\hat{\alpha}_2 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3$$

$$\hat{\alpha}_1 + 4\hat{\alpha}_2 = 2\hat{\beta}_1 + 4\hat{\beta}_2 + 6\hat{\beta}_3$$

Resolvendo as equações acima encontramos:

$$f_{n+3} = -\hat{\beta}_2 f_{n+2} - \hat{\beta}_1 f_{n+1} - \hat{\beta}_0 f_n + \frac{1}{2h} \{ (5+3\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_0) y_{n+2} + (-8-4\hat{\beta}_2 + 4\hat{\beta}_0) y_{n+1} + (3+\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_1 - 3\hat{\beta}_0) y_n \}$$

O erro constante $\hat{C}_3 = \frac{1}{3!} \sum_{j=0}^3 j^3 \hat{\alpha}_j - \frac{1}{2!} \sum_{j=0}^3 j^2 \hat{\beta}_j$, é

$$\hat{C}_3 = \frac{1}{6} [-11 - 2\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_1 - 2\hat{\beta}_0]$$

Para $k = 3$, o método inverso fortemente infinitamente estável é dado por:

$$f_{n+3} = \frac{1}{2h} \{ 5y_{n+2} - 8y_{n+1} + 3y_n \}$$

e para tal método $h\lambda_{\min} = 8$

II - $K = 4$; $p = 2$, temos

$$\sum_{j=0}^4 \hat{\beta}_j f_{n+j} = h^{-1} \sum_{j=0}^3 \hat{\alpha}_j y_{n+j} \text{ com } \hat{\beta}_4 = 1$$

Como $p = 2$, devemos ter

$$\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_3 = 0$$

$$\hat{\alpha}_1 + 2\hat{\alpha}_2 + 3\hat{\alpha}_3 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3 + \hat{\beta}_4$$

$$\hat{\alpha}_1 + 4\hat{\alpha}_2 + 9\hat{\alpha}_3 = 2\hat{\beta}_1 + 4\hat{\beta}_2 + 6\hat{\beta}_3 + 8\hat{\beta}_4$$

$$\hat{\alpha}_1 + 8\hat{\alpha}_2 + 27\hat{\alpha}_3 = 3\hat{\beta}_1 + 12\hat{\beta}_2 + 27\hat{\beta}_3 + 48\hat{\beta}_4$$

Resolvendo as equações acima temos

$$\begin{aligned} f_{n+4} = & -\hat{\beta}_3 f_{n+3} - \hat{\beta}_2 f_{n+2} - \hat{\beta}_1 f_{n+1} - \hat{\beta}_0 f_n + \\ & + \frac{1}{6h} \{ (26 + 11\hat{\beta}_3 + 2\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_0) y_{n+3} + \\ & + (-57 - 18\hat{\beta}_3 + 3\hat{\beta}_2 + 6\hat{\beta}_1 - 9\hat{\beta}_0) y_{n+2} + \\ & + (42 + 9\hat{\beta}_3 - 6\hat{\beta}_2 - 3\hat{\beta}_1 + 18\hat{\beta}_0) y_{n+1} + \\ & + (-11 - 2\hat{\beta}_3 + \hat{\beta}_2 - 2\hat{\beta}_1 - 11\hat{\beta}_0) y_n \} \end{aligned}$$

O erro constante $\hat{C}_4 = \frac{1}{12}(-25 - 3\hat{\beta}_3 + \hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_1 + 3\hat{\beta}_0)$

Para $k = 4$, o método inverso fortemente infinitamente estável é dado por:

$$f_{n+4} = \frac{1}{6h} \{ 26y_{n+3} - 57y_{n+2} + 42y_{n+1} - 11y_n \}$$

$$\text{e para tal método } h\lambda_{\min} = \frac{68}{3}$$

III - $k = 5$; $p = 3$, temos:

$$\sum_{j=0}^5 \hat{\beta}_j f_{n+j} = h^{-1} \sum_{j=0}^4 \hat{\alpha}_j y_{n+j}, \quad \hat{\beta}_5 = 1$$

$$\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_4 = 0$$

$$\hat{\alpha}_1 + 2\hat{\alpha}_2 + 3\hat{\alpha}_3 + 4\hat{\alpha}_4 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3 + \hat{\beta}_4 + \hat{\beta}_5$$

$$\hat{\alpha}_1 + 4\hat{\alpha}_2 + 9\hat{\alpha}_3 + 16\hat{\alpha}_4 = 2(\hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_2 + 3\hat{\beta}_3 + 4\hat{\beta}_4 + 5\hat{\beta}_5)$$

$$\hat{\alpha}_1 + 8\hat{\alpha}_2 + 27\hat{\alpha}_3 + 64\hat{\alpha}_4 = 3(\hat{\beta}_1 + 4\hat{\beta}_2 + 9\hat{\beta}_3 + 16\hat{\beta}_4 + 25\hat{\beta}_5)$$

$$\hat{\alpha}_1 + 16\hat{\alpha}_2 + 81\hat{\alpha}_3 + 256\hat{\alpha}_4 = 4(\hat{\beta}_1 + 8\hat{\beta}_2 + 27\hat{\beta}_3 + 64\hat{\beta}_4 + 125\hat{\beta}_5)$$

Resolvendo essas equações, temos

$$\begin{aligned} f_{n+5} = & -\hat{\beta}_4 f_{n+4} - \hat{\beta}_3 f_{n+3} - \hat{\beta}_2 f_{n+2} - \hat{\beta}_1 f_{n+1} - \hat{\beta}_0 f_n + \\ & + \frac{1}{12h} \{ (77 + 25\hat{\beta}_4 + 3\hat{\beta}_3 - \hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_1 - 3\hat{\beta}_0) y_{n+4} + \\ & + (-214 - 48\hat{\beta}_4 + 10\hat{\beta}_3 + 8\hat{\beta}_2 - 6\hat{\beta}_1 + 16\hat{\beta}_0) y_{n+3} + \\ & + (234 + 36\hat{\beta}_4 - 18\hat{\beta}_3 + 18\hat{\beta}_1 - 36\hat{\beta}_0) y_{n+2} + \\ & + (-122 - 16\hat{\beta}_4 + 6\hat{\beta}_3 - 8\hat{\beta}_2 - 10\hat{\beta}_1 + 48\hat{\beta}_0) y_{n+1} + \\ & + (25 + 3\hat{\beta}_4 - \hat{\beta}_3 + \hat{\beta}_2 - 3\hat{\beta}_1 - 25\hat{\beta}_0) y_n \} \end{aligned}$$

O erro constante $\hat{C}_5 = \frac{1}{5!} \sum_{j=0}^5 j^5 \hat{\alpha}_j - \frac{1}{4!} \sum_{j=0}^5 j^4 \hat{\beta}_j$, é

$$\hat{C}_5 = \frac{1}{60} \{ -137 - 12\hat{\beta}_4 + 3\hat{\beta}_3 - 2\hat{\beta}_2 + 3\hat{\beta}_1 + 12\hat{\beta}_0 \}$$

Para $K = 5$, o método passo múltiplo linear inverso fortemente in finitamente estável, é dado por

$$f_{n+5} = \frac{1}{12h} \{ 77y_{n+4} - 214y_{n+3} + 234y_{n+2} - 122y_{n+1} + 25y_n \}$$

e para tal método $h\lambda_{\min} = 56$

IV - $k = 6$; $p = 4$, temos:

$$\sum_{j=0}^6 \hat{\beta}_j f_{n+j} = h^{-1} \sum_{j=0}^5 \hat{\alpha}_j y_{n+j}, \text{ com } \hat{\beta}_6 = 1$$

$$\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_4 + \hat{\alpha}_5 = 0$$

$$\hat{\alpha}_1 + 2\hat{\alpha}_2 + 3\hat{\alpha}_3 + 4\hat{\alpha}_4 + 5\hat{\alpha}_5 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_3 + \hat{\beta}_4 + \hat{\beta}_5 + \hat{\beta}_6$$

$$\hat{\alpha}_1 + 4\hat{\alpha}_2 + 9\hat{\alpha}_3 + 16\hat{\alpha}_4 + 25\hat{\alpha}_5 = 2(\hat{\beta}_1 + 2\hat{\beta}_2 + 3\hat{\beta}_3 + 4\hat{\beta}_4 + 5\hat{\beta}_5 + 6\hat{\beta}_6)$$

$$\hat{\alpha}_1 + 8\hat{\alpha}_2 + 27\hat{\alpha}_3 + 64\hat{\alpha}_4 + 125\hat{\alpha}_5 = 3(\hat{\beta}_1 + 4\hat{\beta}_2 + 9\hat{\beta}_3 + 16\hat{\beta}_4 + 25\hat{\beta}_5 + 36\hat{\beta}_6)$$

$$\hat{\alpha}_1 + 16\hat{\alpha}_2 + 81\hat{\alpha}_3 + 256\hat{\alpha}_4 + 625\hat{\alpha}_5 = 4(\hat{\beta}_1 + 8\hat{\beta}_2 + 27\hat{\beta}_3 + 64\hat{\beta}_4 + 125\hat{\beta}_5 + 216\hat{\beta}_6)$$

$$\hat{\alpha}_1 + 32\hat{\alpha}_2 + 243\hat{\alpha}_3 + 1024\hat{\alpha}_4 + 3125\hat{\alpha}_5 = 5(\hat{\beta}_1 + 16\hat{\beta}_2 + 81\hat{\beta}_3 + 256\hat{\beta}_4 + 625\hat{\beta}_5 + 1296\hat{\beta}_6)$$

O erro constante $\bar{C}_6 = \frac{1}{6!} \sum_{j=0}^6 j^6 \hat{\alpha}_j - \frac{1}{5!} \sum_{j=0}^6 j^5 \hat{\beta}_j$, fica

$$\bar{C}_6 = \frac{1}{60} \{-147 - 10\hat{\beta}_5 + 2\hat{\beta}_4 - \hat{\beta}_3 + \hat{\beta}_2 - 2\hat{\beta}_1 + 10\hat{\beta}_0\}$$

Para $k = 6$, o método inverso fortemente infinitamente estável é dado por:

$$f_{n+6} = \frac{1}{60h} \{522y_{n+5} - 1755y_{n+4} + 2540y_{n+3} - 1980y_{n+2} + 810y_{n+1} + 137y_n\}$$

$$\text{e para tal método } h\lambda_{\min} = \frac{1936}{15}$$

CAPÍTULO 2

Correção no espaço dominante - Técnicas "C.D.S."

Neste capítulo vamos considerar generalizações da idéia proposta por Lambert [1975], ou seja, considerar correções no subespaço gerado pelos autovetores dominantes. Serão discutidos e comparados vários fatores correção. Tais técnicas "CDS" foram introduzidas por [Alfeld, 1977, 1979/I,II] e [Alfeld e Lambert, 1977].

2.1 - Caso Linear

Seja o problema de valor inicial

$$(2.1.1) \quad \begin{aligned} y' &= A(x)y + g(x) \\ y(a) &= \eta \end{aligned} \quad y, g \in R^m$$

onde $A(x)$ é uma matriz $m \times m$ e $\lambda^{(i)} = \lambda^{(i)}(x)$, $i = 1, 2, \dots, m$ são os autovalores de $A(x)$.

Definição 2.1.1 - A matriz $A(x)$ é dita separadamente "stiff" em um intervalo I de x , se

a) A é completa e

b) Existe uma constante inteira s , $1 \leq s < m$, tal que os $\lambda^{(i)}$, $i=1, 2, \dots, s$, são reais, distintos, negativos e

$$\min_{1 \leq i \leq s} |\lambda^{(i)}| \gg \max_{s+1 \leq i \leq m} |\lambda^{(i)}|$$

Obs. 1 - Uma matriz A é completa se o conjunto dos autovetores à direita geram R^m . Isto não implica que A é não singular.

Definição 2.1.2 - O problema de valor inicial (2.1.1) é separadamente "stiff", se a matriz $A(x)$ é separadamente "stiff" para todo $x \in I$.

Vamos considerar a seguinte técnica de correção no espaço dominante, denominada técnica "CDS":

$$2.1.2i \quad \tilde{y}_{n+k} = B y_n$$

$$2.1.2ii \quad y_{n+k} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)}$$

onde

- B é uma notação simbólica para a aplicação de um método linear explícito de k passos, que será chamado método básico.

- $c_{n+k}^{(i)}$ é o autovetor à direita correspondente a $\lambda_{n+k}^{(i)}$, e

- $\xi_{n+k}^{(i)}$ são os fatores correção, escalares que podem ser determinados por várias maneiras.

Assim, a técnica "CDS" consiste em aplicar o método básico para calcular a solução numérica de (2.1.1) de x_{n+k-1} a x_{n+k} e então, aplicar uma correção, antes de avançar para o próximo passo.

Sejam os autovetores $c_n^{(i)}$ e $d_n^{(i)}$ de $A(x_n)$ normalizados segundo (0.1.1).

Definição 2.1.3 - Os autosistemas dominante e subdominante de $A(x_n)$ são respectivamente definidos por $\{\lambda_n^{(i)}, c_n^{(i)}, d_n^{(i)} / i = 1, 2, \dots, s\}$ e $\{\lambda_n^{(i)}, c_n^{(i)}, d_n^{(i)} / i = s+1, s+2, \dots, m\}$. E os sub-espacos gerados por $\{c_n^{(i)} / i = 1, 2, \dots, s\}$ e $\{c_n^{(i)} / i = s+1, \dots, m\}$ são chamados respectivamente, espacos dominante e subdominante em x_n .

Temos que $\langle d^{(i)}(x), z(x) \rangle, z(x) \in R^m$, é a componente de $z(x)$ na direção de $c^{(i)}(x)$. De fato, como $z(x) \in R^m$ e $c^{(i)}(x)$, $i = 1, 2, \dots, m$ são linearmente independentes, implica que

$$z(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i c^{(i)}(x) \quad \text{e assim}$$

$$\langle d^{(j)}(x), z(x) \rangle = \sum_{i=1}^m \alpha_i \langle d^{(j)}(x), c^{(i)}(x) \rangle = \alpha_j$$

Nestas condições, a solução exata $y(x)$ de (2.1.1) e sua derivada podem ser escritas na forma

$$2.1.3i \quad y(x) = \sum_{i=1}^m \phi^{(i)}(x) c^{(i)}(x)$$

onde $\phi^{(i)}(x) = \langle d^{(i)}(x), y(x) \rangle$ é a componente de $y(x)$ na direção de $c^{(i)}(x)$ e

$$2.1.3ii \quad y'(x) = \sum_{i=1}^m \hat{\phi}^{(i)}(x) c^{(i)}(x) \quad \text{onde}$$

$\hat{\phi}^{(i)}(x) = \langle d^{(i)}(x), y'(x) \rangle$ é a componente de $y'(x)$ na direção de $c^{(i)}(x)$.

Definição 2.1.4 - Seja $v \in R^m$. Então $\gamma^{(i)} = \langle d^{(i)}(x), v \rangle$ são as componentes dominantes de v para $i = 1, 2, \dots, s$ e as componentes subdominantes de v para $i = s+1, \dots, m$.

Definição 2.1.5 - Uma técnica "CDS" é dita dominantemente estável se todas as soluções da equação diferença resultante em $\{y_n\}$ quando o método é aplicado à equação teste $y' = Ay$, com A , uma matriz constante separadamente "stiff", tendem a zero quando n tende a infinito, para todo h tal que $h\lambda^{(i)} \in R_B$, $i = s+1, s+2, \dots, m$. Onde R_B é a região de estabilidade absoluta do método básico.

Para método básico, vamos escolher um método do tipo racional, ou seja, métodos que satisfazem o seguinte:

Definição 2.1.6 - Um método variável discreto de k passos é dito racional, se quando aplicado à equação teste $y' = Ay$, com A , uma matriz constante, dá origem a uma equação diferença linear, de k passos, da forma

$$y_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} P_j(hA) y_{n+k-1-j}$$

onde $P_j(\cdot)$, $j = 0, 1, \dots, k-1$ são funções racionais.

Devemos notar que métodos do tipo Runge-Kutta, passo múltiplo, preditor-corretor são métodos racionais. Quando o método é explícito, as funções $P_j(\cdot)$ são polinômios.

O seguinte teorema propõe uma maneira mais simples de verificar a estabilidade dominante das técnicas "CDS".

Teorema 2.1.1 -

Uma técnica "CDS", com método básico do tipo racional, é dominantemente estável se e somente se $\langle d^{(i)}, y_n \rangle \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$ para $i = 1, 2, \dots, s$.

Dem.: Aplicando uma técnica "CDS", juntamente com um método racional de k passos à equação teste $y' = Ay$, sendo A uma matriz constante, separadamente "stiff", temos:

$$\tilde{y}_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} P_j(hA) y_{n+k-1-j}$$

$$y_{n+k} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c^{(i)}$$

$c^{(i)}$ não depende de n , pois A é constante.

A sendo completa, podemos escrever:

$$y_t = \sum_{i=1}^m \gamma_t^{(i)} c^{(i)} \quad \text{com } \gamma_t^{(i)} = \langle d^{(i)}, y_t \rangle, \quad t=0, 1, 2, \dots$$

Assim

$$\begin{aligned} y_{n+k} &= \sum_{i=1}^m \gamma_{n+k}^{(i)} c^{(i)} = \sum_{j=0}^{k-1} P_j(hA) y_{n+k-1-j} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c^{(i)} = \\ &= \sum_{j=0}^{k-1} P_j(hA) \left[\sum_{i=1}^m \gamma_{n+k-1-j}^{(i)} c^{(i)} \right] + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c^{(i)} = \\ &= \sum_{i=1}^m \left[\sum_{j=0}^{k-1} \gamma_{n+k-1-j}^{(i)} P_j(hA) \right] c^{(i)} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c^{(i)} \end{aligned}$$

Como $P_j(\cdot)$ é função racional

$$P_j(hA)c^{(i)} = P_j(hAc^{(i)}) = P_j(h\lambda^{(i)}c^{(i)}) = P_j(h\lambda^{(i)})c^{(i)}$$

então,

$$Y_{n+k} = \sum_{i=1}^m \left[\sum_{j=0}^{k-1} P_j(h\lambda^{(i)}) \gamma_{n+k-1-j}^{(i)} \right] c^{(i)} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c^{(i)}$$

$$\begin{aligned} Y_{n+k} &= \sum_{i=1}^s \gamma_{n+k}^{(i)} c^{(i)} + \sum_{i=s+1}^m \gamma_{n+k}^{(i)} c^{(i)} = \\ &= \sum_{i=1}^s \left[\sum_{j=0}^{k-1} P_j(h\lambda^{(i)}) \gamma_{n+k-1-j}^{(i)} + \xi_{n+k}^{(i)} \right] c^{(i)} + \\ &+ \sum_{i=s+1}^m \left[\sum_{j=0}^{k-1} P_j(h\lambda^{(i)}) \gamma_{n+k-1-j}^{(i)} \right] c^{(i)} \end{aligned}$$

Para $i = s+1, s+2, \dots, m$

$$(2.1.4) \quad \gamma_{n+k}^{(i)} = \sum_{j=0}^{k-1} P_j(h\lambda^{(i)}) \gamma_{n+k-1-j}^{(i)}$$

Considerando o método básico aplicado à equação teste $z' = \lambda z$ (λ um escalar complexo, constante), $z \in R^{(1)}$, temos

$$(2.1.5) \quad z_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} P_j(h\lambda) z_{n+k-1-j}$$

Sabe-se que:

Para todo z_0 , $z_n \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, se e somente se $h\lambda \in R_B$, onde R_B é a região de estabilidade absoluta do método básico.

Comparando (2.1.4) com (2.1.5), temos que, para $i=s+1, s+2, \dots, m$ $\gamma_{n+k}^{(i)} \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$ se e somente se $h\lambda^{(i)} \in R_B$ onde os $c^{(i)}$ / não dependem de n .

Portanto $y_{n+k} \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$ se e só se $h\lambda^{(i)} \in R_B$, $i=s+1, s+2, \dots, m$ e $\gamma_{n+k}^{(i)} = \langle d^{(i)}, y_{n+k} \rangle \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$ para $i = 1, 2, \dots, s$.

A escolha dos fatores correção $\xi_{n+k}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, s$ pode ser feita de várias maneiras; vamos discutir sobre cada uma.

1 - Projeção sobre o espaço subdominante

Sejam os

$$2.1.1 \quad \xi_{n+k}^{(i)} = - \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle \quad i = 1, 2, \dots, s$$

Com esta escolha, y_{n+k} terá componente nula em cada uma das direções dos autovetores dominantes.

Realmente, vejamos

$$\begin{aligned} y_{n+k} &= \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} = \\ &= \sum_{i=1}^m \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} = \\ &= \sum_{i=1}^s \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} + \sum_{i=s+1}^m \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} + \\ &= \sum_{i=1}^s - \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} \end{aligned}$$

Assim para $i = 1, 2, \dots, s$ a i -ésima componente de y_{n+k} é da forma

$$y_{n+k}^{(i)} = \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} - \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} = 0$$

Logo pelo teorema (2.1.1) segue que a técnica "CDS" - I é dominantemente estável.

Como em geral $y(x)$ não tem componentes nulas nas direções dominantes, existe um erro persistente da forma:

$$E_I = \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) - y_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} =$$

$$= \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) \rangle c_{n+k}^{(i)} - \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)}$$

como $\langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k} \rangle = 0$, então

$$2.1.2 \quad E_I = \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) \rangle c_{n+k}^{(i)} = \sum_{i=1}^S \phi^{(i)}(x_{n+k}) c_{n+k}^{(i)}$$

por (2.1.3i).

Este erro E_I , sobre o espaço dominante, não depende do método básico e nem do comprimento de passo, depende apenas do problema de valor inicial. E_I não será em geral pequeno, e por isto esta escolha I, para fator correção não é recomendada.

II - Minimização do gradiente

Uma interpretação de "stiff" é que a função f é mal condicionada em relação a y . Isto é se $y_n = y(x_n)$, encontramos, usando um método explícito que, enquanto y_{n+k} é uma aproximação aceitável para $y(x_{n+k})$, o valor $f(x_{n+k}, y_{n+k})$ é uma péssima aproximação para $f(x_{n+k}, y(x_{n+k}))$.

O método do gradiente mede a variação da função $f(x, y)$ estudada. Assim, se o gradiente tem módulo grande, curvas de nível (curvas integrais) da $f(x, y)$, próximas representam valores distantes da função.

Isto motiva a fazer uma correção que evita regiões de gradiente alto, assim tomamos os fatores correção que minimizam $\| f(x_{n+k}, y_{n+k}) \|$.

Sejam

$$f_{n+k} = f(x_{n+k}, y_{n+k}) \quad e$$

$$\tilde{f}_{n+k} = f(x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k})$$

Então,

$$\begin{aligned} f_{n+k} &= A(x_{n+k})y_{n+k} + g(x_{n+k}) = \\ &= A_{n+k}[\tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)}] + g(x_{n+k}) \\ &= A_{n+k} \tilde{y}_{n+k} + g(x_{n+k}) + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} A_{n+k} c_{n+k}^{(i)} = \\ &= \tilde{f}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \lambda_{n+k}^{(i)} \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} \end{aligned}$$

Assim

$$\phi = \|f_{n+k}\|^2 = \langle f_{n+k}, f_{n+k} \rangle = \langle \tilde{f}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \lambda_{n+k}^{(i)} \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)},$$

$$\tilde{f}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \lambda_{n+k}^{(i)} \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} \rangle = \langle \tilde{f}_{n+k}, \tilde{f}_{n+k} \rangle +$$

$$+ 2 \langle \tilde{f}_{n+k}, \sum_{i=1}^s \lambda_{n+k}^{(i)} \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} \rangle + \langle \sum_{i=1}^s \lambda_{n+k}^{(i)} \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)},$$

$$\sum_{j=1}^s \lambda_{n+k}^{(j)} \xi_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)} \rangle =$$

$$= \|\tilde{f}_{n+k}\|^2 + 2 \sum_{i=1}^s \lambda_{n+k}^{(i)} \xi_{n+k}^{(i)} \langle \tilde{f}_{n+k}, c_{n+k}^{(i)} \rangle +$$

$$+ \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s \lambda_{n+k}^{(i)} \lambda_{n+k}^{(j)} \xi_{n+k}^{(i)} \xi_{n+k}^{(j)} \langle c_{n+k}^{(i)}, c_{n+k}^{(j)} \rangle$$

Para $i = 1, 2, \dots, m$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi_{n+k}^{(i)}} = 2\lambda_{n+k}^{(i)} \langle \tilde{f}_{n+k}, c_{n+k}^{(i)} \rangle + 2\lambda_{n+k}^{(i)} \sum_{j=1}^s \lambda_{n+k}^{(j)} \xi_{n+k}^{(j)} \langle c_{n+k}^{(j)}, c_{n+k}^{(i)} \rangle = 0$$

logo,

$$2\lambda_{n+k}^{(i)} \sum_{j=1}^s \lambda_{n+k}^{(j)} \xi_{n+k}^{(j)} \langle c_{n+k}^{(j)}, c_{n+k}^{(i)} \rangle = -2\lambda_{n+k}^{(i)} \langle \tilde{f}_{n+k}, c_{n+k}^{(i)} \rangle$$

$$\sum_{j=1}^s \lambda_{n+k}^{(j)} \xi_{n+k}^{(j)} \langle c_{n+k}^{(j)}, c_{n+k}^{(i)} \rangle = -\langle \tilde{f}_{n+k}, c_{n+k}^{(i)} \rangle$$

$$i = 1, 2, \dots, s$$

ou seja

$$\langle c_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(1)} \rangle \lambda_{n+k}^{(1)} \xi_{n+k}^{(1)} + \dots + \langle c_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(s)} \rangle \lambda_{n+k}^{(s)} \xi_{n+k}^{(s)} = -\langle c_{n+k}^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle$$

$$\langle c_{n+k}^{(2)}, c_{n+k}^{(1)} \rangle \lambda_{n+k}^{(1)} \xi_{n+k}^{(1)} + \dots + \langle c_{n+k}^{(2)}, c_{n+k}^{(s)} \rangle \lambda_{n+k}^{(s)} \xi_{n+k}^{(s)} = -\langle c_{n+k}^{(2)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle$$

⋮

$$\langle c_{n+k}^{(s)}, c_{n+k}^{(1)} \rangle \lambda_{n+k}^{(1)} \xi_{n+k}^{(1)} + \dots + \langle c_{n+k}^{(s)}, c_{n+k}^{(s)} \rangle \lambda_{n+k}^{(s)} \xi_{n+k}^{(s)} = -\langle c_{n+k}^{(s)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle$$

ou

$$\begin{bmatrix} \langle c_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(1)} \rangle & \langle c_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(2)} \rangle & \langle c_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(s)} \rangle \\ \langle c_{n+k}^{(2)}, c_{n+k}^{(1)} \rangle & \langle c_{n+k}^{(2)}, c_{n+k}^{(2)} \rangle & \langle c_{n+k}^{(2)}, c_{n+k}^{(s)} \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle c_{n+k}^{(s)}, c_{n+k}^{(1)} \rangle & \langle c_{n+k}^{(s)}, c_{n+k}^{(2)} \rangle & \langle c_{n+k}^{(s)}, c_{n+k}^{(s)} \rangle \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \lambda_{n+k}^{(1)} \xi_{n+k}^{(1)} \\ \lambda_{n+k}^{(2)} \xi_{n+k}^{(2)} \\ \vdots \\ \lambda_{n+k}^{(s)} \xi_{n+k}^{(s)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\langle c_{n+k}^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle \\ -\langle c_{n+k}^{(2)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle \\ \vdots \\ -\langle c_{n+k}^{(s)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \langle c_{n+k}^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle \\ \langle c_{n+k}^{(2)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle \\ \vdots \\ \langle c_{n+k}^{(s)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle \end{bmatrix} = M \xi = - \tilde{F}$$

Resolvendo este sistema de s equações a s incógnitas determinamos os $\xi_{n+k}^{(i)}$, $i=1,2,\dots,s$ que minimizam ϕ . Nota-se que cada um dos s fatores correção depende de todos os autovetores dominantes, tal fato será denominado inderdependência.

No caso $s = 1$ $M \xi = - \tilde{F}$ é da forma:

$$\langle c_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(1)} \rangle \lambda_{n+k}^{(1)} \xi_{n+k}^{(1)} - \langle c_{n+k}^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle$$

Como $\langle c_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(1)} \rangle = 1$, vem

$$\text{II.1} \quad \xi_{n+k}^{(1)} = - \frac{\langle c_{n+k}^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(1)}}$$

conduzindo à técnica originalmente proposta por Lambert [1975].

Se $A(x)$ for simétrica, os autovetores $c_{n+k}^{(i)}$ são ortogonais. De fato se $A(x)$ for simétrica então $A(x) = A^t(x)$. Seja $d^{(i)}$ um autovetor à esquerda de $A(x)$, temos então: $d^{(i)} A(x) = \lambda^{(i)} d^{(i)}$, como A é simétrica $A^t(x) d^{(i)} = \lambda^{(i)} d^{(i)}$, daí $A d^{(i)} = \lambda^{(i)} d^{(i)}$, isto é, $d^{(i)}$ é um autovetor à direita de $A(x)$ correspondente a $\lambda^{(i)}$, logo $d^{(i)} = c^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, m$ e como $\langle c^{(i)}, d^{(j)} \rangle = 0$ para $i \neq j$

Vem, $\langle c^{(i)}, c^{(j)} \rangle = 0$ para $i \neq j$

Neste caso, da matriz $A(x)$ ser simétrica, a matriz M se torna identidade e a técnica não é interdependente, pois

$$\text{II.2} \quad \xi_{n+k}^{(i)} = - \frac{\langle c_{n+k}^{(i)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(i)}} \quad i = 1, \dots, s$$

Para uma matriz geral $A(x)$, os autovetores à direita $c^{(i)}$ são ortonormais aos autovetores à esquerda $d^{(j)}$, ou seja

$$\langle c^{(i)}, d^{(j)} \rangle = \delta_{ij}$$

Desde que isto aconteça é natural perguntar qual é a diferença se substituirmos nos produtos escalares o autovetor à direita pelo autovetor à esquerda. A resposta será dada na seguinte técnica.

III - Projeção do gradiente sobre o espaço subdominante

Aquí, os fatores correção são escolhidos não para minimizar a norma do gradiente, mas para remover inteiramente as componentes do gradiente nas direções dominantes, desde que estas componentes é que são responsáveis pelo mal condicionamento de $f(x, y)$.

Então para $i=1, 2, \dots, s$ colocamos

$$\langle d_{n+k}^{(i)}, f_{n+k} \rangle = 0$$

$$\text{como } f_{n+k} = \tilde{f}_{n+k} + \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} \lambda_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)}$$

$$\text{e } \langle d_{n+k}^{(i)}, c_{n+k}^{(j)} \rangle = \delta_{ij} \quad \text{vem}$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle d_{n+k}^{(i)}, f_{n+k} \rangle = \\ &= \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{f}_{n+k} + \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} \lambda_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)} \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \langle d_{n+k}^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle + \sum_{j=1}^s \lambda_{n+k}^{(j)} \xi_{n+k}^{(j)} \langle d_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(j)} \rangle = \\
&= \langle d_{n+k}^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle + \lambda_{n+k}^{(1)} \xi_{n+k}^{(1)}
\end{aligned}$$

Logo

$$\text{III.1} \quad \xi_{n+k}^{(1)} = - \frac{\langle d_{n+k}^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(1)}} \quad i = 1, 2, \dots, s$$

e agora a técnica não é interdependente. Aplicando à equação teste $y' = Ay$ com A uma matriz constante, separadamente "stiff", vem

$$\begin{aligned}
y_{n+k} &= \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)} = \\
&= \tilde{y}_{n+k} - \sum_{j=1}^s \frac{\langle d^{(j)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(j)}} c^{(j)} \quad j = 1, \dots, s
\end{aligned}$$

Como A é constante, d e c não dependem de n , fazendo $\tilde{f}_{n+k} = A\tilde{y}_{n+k}$, vem:

$$\begin{aligned}
\langle d^{(1)}, y_{n+k} \rangle &= \langle d^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle - \sum_{j=1}^s \frac{\langle d^{(j)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(j)}} \langle d^{(1)}, c^{(j)} \rangle = \\
&= \langle d^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle - \frac{\langle d^{(1)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(1)}} = \frac{\langle \lambda^{(1)} d^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle - \langle d^{(1)}, A\tilde{y}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(1)}} = \\
&= \frac{\langle A^t d^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle - \langle d^{(1)}, A\tilde{y}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(1)}} = \\
&= \frac{\langle d^{(1)}, A\tilde{y}_{n+k} \rangle - \langle d^{(1)}, A\tilde{y}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(1)}} = 0
\end{aligned}$$

Portanto $\langle d^{(1)}, y_{n+k} \rangle = 0$ para $i = 1, 2, \dots, s$ e pelo teorema (2.1.1) segue que esta técnica é dominantemente estável.

A escolha de III.1 para os fatores correção significa que f_n terá componentes nulas nas direções dominantes. Como

em geral, isto não acontece, para $f(x_n, y(x_n)) = y'(x_n)$ devemos esperar um erro persistente diferente de zero.

III.2 - Estudo do Erro persistente

Aplicando a técnica "CDS", com fatores correção

(III-1) ao p.v. inicial (2.1.1), temos:

$$\begin{aligned} y_{n+k} &= \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)} = \tilde{y}_{n+k} - \sum_{j=1}^s \frac{\langle d_{n+k}^{(j)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(j)}} c_{n+k}^{(j)} = \\ &= \tilde{y}_{n+k} - \sum_{j=1}^s \frac{\langle d_{n+k}^{(j)}, A_{n+k} \tilde{y}_{n+k} + g_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(j)}} c_{n+k}^{(j)} \end{aligned}$$

Deste modo,

$$\begin{aligned} \langle d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k} \rangle &= \langle d_{n+k}^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle - \sum_{j=1}^s \frac{\langle d_{n+k}^{(j)}, A_{n+k} \tilde{y}_{n+k} + g_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(j)}} \langle d_{n+k}^{(1)}, c_{n+k}^{(j)} \rangle = \\ &= \langle d_{n+k}^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle - \frac{\langle d_{n+k}^{(1)}, A_{n+k} \tilde{y}_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(1)}} - \frac{\langle d_{n+k}^{(1)}, g_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(1)}} = \\ &= \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(1)}} [\langle \lambda_{n+k}^{(1)} d_{n+k}^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle - \langle d_{n+k}^{(1)}, A_{n+k} \tilde{y}_{n+k} \rangle] - \frac{\langle d_{n+k}^{(1)}, g_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(1)}} = \\ &= \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(1)}} [\langle A_{n+k}^t d_{n+k}^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle - \langle d_{n+k}^{(1)}, A_{n+k} \tilde{y}_{n+k} \rangle] - \frac{\langle d_{n+k}^{(1)}, g_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(1)}} = \\ &= - \frac{\langle d_{n+k}^{(1)}, g_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(1)}} \end{aligned}$$

mas $g_{n+k} = y'(x_{n+k}) - A_{n+k} y(x_{n+k})$. Então

$$\begin{aligned} \langle d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k} \rangle &= \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(1)}} [-\langle d_{n+k}^{(1)}, y'(x_{n+k}) \rangle + \langle d_{n+k}^{(1)}, A_{n+k} y(x_{n+k}) \rangle] = \\ &= \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(1)}} [-\hat{\phi}^{(1)}(x_{n+k}) + \langle d_{n+k}^{(1)}, A_{n+k} y(x_{n+k}) \rangle] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(i)}} [-\hat{\phi}^{(i)}(x_{n+k}) + \langle A_{n+k}^t d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) \rangle] = \\
&= \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(i)}} [-\hat{\phi}^{(i)}(x_{n+k}) + \langle \lambda_{n+k}^{(i)} d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) \rangle] = \\
&= -\frac{1}{\lambda_{n+k}^{(i)}} \hat{\phi}^{(i)}(x_{n+k}) + \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) \rangle
\end{aligned}$$

Logo

$$\langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) - y_{n+k} \rangle = \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(i)}} \hat{\phi}^{(i)}(x_{n+k})$$

Assim, o erro persistente, é dado por:

$$\begin{aligned}
E_{III} &= \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) - y_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} = \\
&= \sum_{i=1}^S \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(i)}} \hat{\phi}^{(i)}(x_{n+k}) c_{n+k}^{(i)}. \text{ Portanto}
\end{aligned}$$

$$III.3 \quad E_{III} = \sum_{i=1}^S \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(i)}} \hat{\phi}^{(i)}(x_{n+k}) c_{n+k}^{(i)}$$

Vemos que aparecem autovalores dominantes no denominador e por isto E_{III} será, em geral, pequeno, a menos que $y(x)$ tenha um gradiente anormalmente alto. Como o erro persistente é independente do método básico e da discretização, não se acumulará sobre o espaço dominante à medida que os cálculos procedem.

IV - Redução ao problema escalar

A escolha dos fatores correção I.1

$(\xi_{n+k}^{(i)} = -\langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle)$ levou ao erro persistente I.2. Este erro poderia ser evitado se fosse possível fazer a seguinte escolha pa

ra os fatores correção

$$\text{IV.1} \quad \xi_{n+k}^{(1)} = - \langle d_{n+k}^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle + \phi^{(1)}(x_{n+k})$$

pois, daí, teríamos a i -ésima componente de y_{n+k} , da seguinte forma:

$$y_{n+k}^{(1)} = \langle d_{n+k}^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(1)} - \langle d_{n+k}^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(1)} + \phi^{(1)}(x_{n+k}) c_{n+k}^{(1)}$$

Logo

$$y_{n+k}^{(1)} = \phi^{(1)}(x_{n+k}) c_{n+k}^{(1)}$$

E o erro persistente seria dado por

$$\begin{aligned} E_{IV} &= \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) - y_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} = \\ &= \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) \rangle c_{n+k}^{(i)} - \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(i)} = \\ &= \sum_{i=1}^S \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k}) \rangle c_{n+k}^{(i)} - \sum_{i=1}^S \phi^{(i)}(x_{n+k}) c_{n+k}^{(i)} = \\ &= \sum_{i=1}^S \phi^{(i)}(x_{n+k}) c_{n+k}^{(i)} - \sum_{i=1}^S \phi^{(i)}(x_{n+k}) c_{n+k}^{(i)} = 0 \end{aligned}$$

Como, não conhecemos $\phi^{(i)}(x_{n+k})$, isto é, não conhecemos a componente de $y(x_{n+k})$ na direção de $c_{n+k}^{(i)}$, vamos tentar obtê-la aproximadamente.

Temos que

$$\phi^{(i)}(x) = \langle d^{(i)}(x), y(x) \rangle$$

Consideremos a seguinte função

$$\text{IV.2} \quad \psi_{n+k}^{(i)}(x) = \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x) \rangle$$

Então

$$\psi_{n+k}^{(1)}(x_{n+k}) = \phi^{(1)}(x_{n+k})$$

A função $\psi_{n+k}^{(1)}$ satisfaz o problema valor inicial

$$\psi_{n+k}^{(1)}(x) = \langle d_{n+k}^{(1)}, f(x, y(x)) \rangle$$

IV.3

$$\psi_{n+k}^{(1)}(x_{n+k-1}) = \langle d_{n+k}^{(1)}, y(x_{n+k-1}) \rangle$$

Vamos considerar agora um p.v.i. vizinho cuja solução $k_{n+k}^{(1)}$ seja uma aproximação para $\psi_{n+k}^{(1)}(x)$, isto é, devemos ter $k_{n+k}^{(1)}$ como aproximação da componente de $y(x)$ na direção de $c_{n+k}^{(1)}$ em $[x_{n+k-1}, x_{n+k}]$, ou seja

$$\text{IV.4} \quad k_{n+k}^{(1)}(x) = \langle d_{n+k}^{(1)}, y(x) \rangle \text{ em } [x_{n+k-1}, x_{n+k}]$$

Substituindo

$$\text{IV.5} \quad y(x) = y_{n+k-1} + (k_{n+k}^{(1)}(x) - \langle d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle c_{n+k}^{(1)})$$

na 1ª equação de IV.3 e $y(x_n)$ por y_n na 2ª equação de IV.3, temos:

$$\begin{aligned} \text{IV.6} \quad k_{n+k}^{(1)}(x) &= \langle d_{n+k}^{(1)}, f(x, y_{n+k-1} + (k_{n+k}^{(1)}(x) - \langle d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle c_{n+k}^{(1)})) \rangle \\ &\quad - \langle d_{n+k}^{(1)}, y_n \rangle c_{n+k}^{(1)} \end{aligned}$$

$$k_{n+k}^{(1)}(x_{n+k-1}) = \langle d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle$$

Uma expansão direta mostra que, se $y_n = y(x_n)$, temos

$$k_{n+k}^{(1)}(x_{n+k}) - \phi^{(1)}(x_{n+k}) = O(h^2)$$

Queremos que a técnica "CDS" seja dominantemente estável, vamos

aplicar a regra ao Trapézio, com comprimento de passo h , para somente um passo e tomarmos este resultado como aproximação de $k_{n+k}^{(i)}(x_{n+k})$, o qual denotaremos por $k_{n+k}^{(i)}$ e que será uma aproximação para $\phi^{(i)}(x_{n+k})$ em IV.1.

Resolvendo IV.6 pela regra do Trapézio, temos:

$$\begin{aligned} & \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k} \rangle - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle = \\ & = \langle d_{n+k}^{(i)}, \frac{h}{2} [f_{n+k} + f_{n+k-1}] \rangle \end{aligned}$$

Substituindo y_n por $y(x_n)$, temos:

$$\begin{aligned} & k_{n+k}^{(i)}(x_{n+k}) - \langle d_{n+k}^{(i)}, y(x_{n+k-1}) \rangle = \\ & = \langle d_{n+k}^{(i)}, \frac{h}{2} [A_{n+k} y(x_{n+k}) + g_{n+k} - A_{n+k-1} y(x_{n+k-1}) + \\ & \quad + g_{n+k-1}] \rangle \end{aligned}$$

por IV.5, temos:

$$\begin{aligned} & = \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, A_{n+k} [y_{n+k-1} + (k_{n+k}^{(i)}(x_{n+k}) - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle) c_{n+k}^{(i)} + \\ & \quad + g_{n+k}] \rangle + \\ & + \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, A_{n+k-1} [y_{n+k-1} + (k_{n+k}^{(i)}(x_{n+k-1}) - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle) c_{n+k}^{(i)} + \\ & \quad + g_{n+k-1}] \rangle = \\ & = \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, A_{n+k} [y_{n+k-1} + k_{n+k}^{(i)} - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle c_{n+k}^{(i)} + g_{n+k}] \rangle + \\ & + \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, A_{n+k-1} y_{n+k-1} + g_{n+k-1} \rangle \end{aligned}$$

Como $y_{n+k-1} - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle c_{n+k}^{(i)}$ é um vetor cuja componente é nula nas direções dominantes, o mesmo acontece para o vetor

$$A_{n+k} \{y_{n+k-1} - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle c_{n+k}^{(i)}\}$$

Portanto

$$\langle d_{n+k}^{(i)}, A_{n+k} \{y_{n+k-1} - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle c_{n+k}^{(i)}\} \rangle = 0$$

daí

$$\begin{aligned} k_{n+k}^{(i)} - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle &= \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, A_{n+k} k_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} + g_{n+k} \rangle + \\ &+ \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, A_{n+k-1} y_{n+k-1} + g_{n+k-1} \rangle \end{aligned}$$

Como $\lambda_{n+k}^{(i)}$ é o autovetor de A_{n+k} em relação a $c_{n+k}^{(i)}$, temos:

$$\begin{aligned} k_{n+k}^{(i)} - \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle &= \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, \lambda_{n+k}^{(i)} k_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} \rangle + \\ &+ \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, g_{n+k} \rangle + \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, A_{n+k-1} y_{n+k-1} + g_{n+k-1} \rangle = \\ &= \frac{h}{2} \{ \lambda_{n+k}^{(i)} k_{n+k}^{(i)} + \langle d_{n+k}^{(i)}, g_{n+k} + f(x_{n+k-1}, y_{n+k-1}) \rangle \} \end{aligned}$$

Logo

$$\begin{aligned} k_{n+k}^{(i)} - \frac{h}{2} \lambda_{n+k}^{(i)} k_{n+k}^{(i)} &= \langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle + \\ &= \frac{h}{2} \langle d_{n+k}^{(i)}, g_{n+k} + f(x_{n+k-1}, y_{n+k-1}) \rangle \end{aligned}$$

daí;

$$\text{IV.7} \quad k_{n+k}^{(i)} = \frac{\langle d_{n+k}^{(i)}, y_{n+k-1} + \frac{h}{2} (f_{n+k-1} + g_{n+k}) \rangle}{(1 - \frac{h}{2} \lambda_{n+k}^{(i)})}$$

para $i=1, 2, \dots, s$

Os fatores correção, são então, dados por

$$\text{IV.8} \quad \xi_{n+k}^{(i)} = - \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle + k_{n+k}^{(i)} \quad \text{para } i=1,2,\dots,s$$

Com esta escolha para fatores correção $\xi_{n+k}^{(i)}$, a técnica "CDS" resultante é dominantemente estável, consideremos $f = Ay$, então, (IV.7) se reduz a

$$k_{n+k}^{(i)} = k^{(i)} = \frac{\langle d^{(i)}, y_{n+k-1} + \frac{h}{2} A y_{n+k-1} \rangle}{(1 - \frac{h}{2} \lambda^{(i)})}$$

Substituindo y_{n+k-1} por $\sum_{j=1}^m \gamma_{n+k-1}^{(j)} c^{(j)}$

onde $\gamma_{n+k-1}^{(j)} = \langle d^{(j)}, y_{n+k-1} \rangle$, temos:

$$k^{(i)} = \frac{\langle d^{(i)}, \sum_{j=1}^m \gamma_{n+k-1}^{(j)} c^{(j)} \rangle + \langle d^{(i)}, \frac{h}{2} A \sum_{j=1}^m \gamma_{n+k-1}^{(j)} c^{(j)} \rangle}{1 - \frac{h}{2} \lambda^{(i)}} =$$

$$= \frac{\langle d^{(i)}, \sum_{j=1}^m \gamma_{n+k-1}^{(j)} c^{(j)} \rangle + \langle d^{(i)}, \frac{h}{2} \sum_{j=1}^m \gamma_{n+k-1}^{(j)} A c^{(j)} \rangle}{1 - \frac{h}{2} \lambda^{(i)}} =$$

$$= \frac{\langle d^{(i)}, \sum_{j=1}^m \gamma_{n+k-1}^{(j)} c^{(j)} \rangle + \langle d^{(i)}, \frac{h}{2} \sum_{j=1}^m \gamma_{n+k-1}^{(j)} \lambda^{(j)} c^{(j)} \rangle}{1 - \frac{h}{2} \lambda^{(i)}}$$

$$k^{(i)} = \frac{\langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle + \frac{h}{2} \gamma_{n+k-1}^{(i)} \lambda^{(i)}}{1 - \frac{h}{2} \lambda^{(i)}}$$

Como $\gamma_{n+k-1}^{(i)} = \langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle$, vem:

$$k^{(i)} = \frac{\langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle + \frac{h}{2} \lambda^{(i)} \langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle}{1 - \frac{h}{2} \lambda^{(i)}}$$

Portanto

$$\text{IV.9} \quad k^{(i)} = \frac{(1 + \frac{h}{2} \lambda^{(i)}) \langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle}{1 - \frac{h}{2} \lambda^{(i)}}$$

$$i = 1, 2, \dots, s$$

Então, a técnica "CDS", se reduz a

$$y_{n+k} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=1}^s (k^{(j)} - \langle d^{(j)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c^{(j)})$$

onde os $k^{(j)}$ são dados por IV.9.

Assim

$$\begin{aligned} \langle d^{(i)}, y_{n+k} \rangle &= \langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=1}^s (k^{(j)} - \langle d^{(j)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle c^{(j)}) \rangle = \\ &= \langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle + k^{(i)} - \langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle = k^{(i)} \end{aligned}$$

por IV.9, temos:

$$\langle d^{(i)}, y_{n+k} \rangle = \frac{(1 + \frac{h}{2} \lambda^{(i)})}{1 - \frac{h}{2} \lambda^{(i)}} \langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle$$

Daí, segue que

$$\langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle \rightarrow 0 \text{ quando } n \rightarrow \infty, i = 1, 2, \dots, s.$$

Logo a técnica "CDS" é dominantemente estável.

Obs.2 - Outras formas de redução a escalar são também possíveis, desde que $\phi^{(i)}(x) = \langle d^{(i)}(x), y(x) \rangle$.

Podemos considerar o problema de valor inicial

$$\phi^{(i)}(x) = \langle d^{(i)}(x), y(x) + \langle d^{(i)}(x), f(x, y(x)) \rangle$$

$$\phi^{(i)}(x_{n+k-1}) = \langle d_{n+k-1}^{(i)}, y(x_{n+k-1}) \rangle$$

no lugar do p.v.i. IV.6 e proceder como antes, usando diferenciação numérica para estimar as derivadas de $d^{(i)}(x)$.

V - Técnica "CDS" especial

As técnicas "CDS" especiais são técnicas que envolvem o cálculo de $f(x,y)$ através dos métodos Inversos, são baseadas em

$$\tilde{y}_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} (-\alpha_j y_{n+j} + h\beta_j f_{n+j})$$

V.1

$$\hat{f}_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} (-h^{-1} \hat{\alpha}_j y_{n+j} + \hat{\beta}_j f_{n+j})$$

e

$$y_{n+k} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)}$$

Escolhemos $\xi_{n+k}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, s$ tais que

$$\langle d_{n+k}^{(i)}, f(x_{n+k}, y_{n+k}) \rangle = \langle d_{n+k}^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle$$

V.2

como $f(x,y) = A(x)y + g(x)$, temos

$$\langle d_{n+k}^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle = \langle d_{n+k}^{(i)}, A(x_{n+k})y_{n+k} + g(x_{n+k}) \rangle =$$

$$= \langle d_{n+k}^{(i)}, A(x_{n+k})[\tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)}] \rangle + \langle d_{n+k}^{(i)}, g(x_{n+k}) \rangle$$

$$\langle d_{n+k}^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle - \langle d_{n+k}^{(i)}, g(x_{n+k}) \rangle = \langle d_{n+k}^{(i)}, A(x_{n+k}) \tilde{y}_{n+k} \rangle +$$

$$+ \langle d_{n+k}^{(i)}, A(x_{n+k}) \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)} \rangle$$

por 2.1.3.i, temos:

$$- \langle d_{n+k}^{(i)}, g(x_{n+k}) - \hat{f}_{n+k} \rangle = \langle d_{n+k}^{(i)}, A(x_{n+k}) \sum_{j=1}^m \langle d_{n+k}^{(j)}, \tilde{y}(x_{n+k}) \rangle c_{n+k}^{(j)} \rangle +$$

$$+ \langle d_{n+k}^{(i)}, \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} A(x_{n+k}) c_{n+k}^{(j)} \rangle =$$

$$= \langle d_{n+k}^{(i)}, \sum_{j=1}^m \langle d_{n+k}^{(j)}, \tilde{y}(x_{n+k}) \rangle A(x_{n+k}) c_{n+k}^{(j)} \rangle +$$

$$+ \langle d_{n+k}^{(i)}, \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} A(x_{n+k}) c_{n+k}^{(j)} \rangle =$$

$$= \langle d_{n+k}^{(i)}, \sum_{j=1}^m \langle d_{n+k}^{(j)}, \tilde{y}(x_{n+k}) \rangle \lambda_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)} \rangle +$$

$$+ \langle d_{n+k}^{(i)}, \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} \lambda_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)} \rangle =$$

$$= \lambda_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}(x_{n+k}) \rangle + \lambda_{n+k}^{(i)} \xi_{n+k}^{(i)}$$

Portanto:

$$V.3 \quad \xi_{n+k}^{(i)} = - \langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}(x_{n+k}) \rangle - \frac{\langle d_{n+k}^{(i)}, g(x_{n+k}) - \hat{f}_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(i)}}$$

Algumas propriedades desta técnica "CDS" especial V.1, são vistas nos teoremas:

Teorema V.1.

A técnica "CDS" V, juntamente com o método básico racional, e os

fatores correção dados por (V.3), é dominantemente estável, desde que $h\lambda^{(i)} \in R_p$, $i = 1, 2, \dots, s$, onde R_p é a região de estabilidade absoluta de (1.1.5).

Dem.:

Se (V.1) é aplicado à equação teste $y' = Ay$, com uma matriz A separadamente "stiff", constante, e com fatores correção dados por (V.3), então de (V.2), obtemos:

$$\langle d^{(i)}, f(x_{n+k}, y_{n+k}) \rangle = \langle d^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle$$

$$0 = \langle d^{(i)}, f(x_{n+k}, y_{n+k}) \rangle - \langle d^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle =$$

$$= \langle d^{(i)}, Ay_{n+k} \rangle - \langle d^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle$$

por 2.1.3.i e V.1, temos:

$$= \langle d^{(i)}, A \langle d^{(i)}, y_{n+k} \rangle c^{(i)} \rangle - \langle d^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle =$$

$$= \langle d^{(i)}, \langle d^{(i)}, y_{n+k} \rangle Ac^{(i)} \rangle - \langle d^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle =$$

$$= \lambda^{(i)} \langle d^{(i)}, y_{n+k} \rangle - \langle d^{(i)}, \sum_{j=0}^{k-1} (-h^{-1} \hat{\alpha}_j y_{n+j} + \hat{\beta}_j f_{n+j}) \rangle$$

Logo

$$\langle d^{(i)}, y_{n+k} \rangle = \frac{1}{\lambda^{(i)}} [\langle d^{(i)}, \sum_{j=0}^{k-1} (-h^{-1} \hat{\alpha}_j y_{n+j}) +$$

$$+ \langle d^{(i)}, \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\beta}_j f_{n+j} \rangle =$$

$$= \frac{1}{\lambda^{(i)}} [-h^{-1} \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\alpha}_j \langle d^{(i)}, y_{n+j} \rangle - \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\beta}_j \langle d^{(i)}, f_{n+j} \rangle]$$

Assim

$$\langle d^{(i)}, y_{n+k} \rangle = - \frac{1}{\lambda^{(i)}} [h^{-1} \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\alpha}_j \langle d^{(i)}, y_{n+j} \rangle - \sum_{j=0}^{k-1} \hat{\beta}_j \langle d^{(i)}, f_{n+j} \rangle]$$

Isto é, a i -ésima componente de y_{n+k} é obtida pela aplicação de (1.1.5) ao problema valor inicial com valores iniciais

$$\mu_u^{(i)} = \langle d^{(i)}, y_u \rangle \quad u = 0, 1, \dots, k-1$$

Então $\langle d^{(i)}, y_n \rangle = \mu_n \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$ para $i=1, \dots, s$, se

$$h\lambda^{(i)} \in R_p.$$

Portanto, pelo teor. 2.1.1 a técnica "CDS"-V é dominantemente estável.

Uma informação sobre a ordem das componentes dominantes do erro local é dada no:

Teorema V.2

Se o problema de valor inicial é dado por (2.1.1), então as componentes dominantes do erro local da técnica "CDS"-V.1 com fatores correção dado por V.3, são da $O(h^{q+1})$, onde q é a ordem do método de passo múltiplo linear inverso.

Dem.:

$$\text{Como } g(x) = y'(x) - A(x)y(x)$$

temos por (V.2)

$$\langle d_{n+k}^{(i)}, \hat{f}_{n+k} \rangle = \langle d_{n+k}^{(i)}, f_{n+k}^{(i)} \rangle = \langle d_{n+k}^{(i)}, A(x_{n+k})y_{n+k} + g(x_{n+k}) \rangle =$$

$$= \langle d_{n+k}^{(1)}, A(x_{n+k})y_{n+k} + y'(x_{n+k}) - A(x_{n+k})y(x_{n+k}) \rangle =$$

$$= \langle d_{n+k}^{(1)}, A(x_{n+k})y_{n+k} \rangle - \langle d_{n+k}^{(1)}, A(x_{n+k})y(x_{n+k}) \rangle + \langle d_{n+k}^{(1)}, y'(x_{n+k}) \rangle =$$

$$= \langle A^t(x_{n+k})d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k} \rangle - \langle A^t(x_{n+k})d_{n+k}^{(1)}, y(x_{n+k}) \rangle +$$

$$+ \langle d_{n+k}^{(1)}, y'(x_{n+k}) \rangle =$$

$$= \langle \lambda_{n+k}^{(1)} d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k} \rangle - \langle \lambda_{n+k}^{(1)} d_{n+k}^{(1)}, y(x_{n+k}) \rangle + \langle d_{n+k}^{(1)}, y'(x_{n+k}) \rangle =$$

$$= \lambda_{n+k}^{(1)} \langle d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k} \rangle - \lambda_{n+k}^{(1)} \langle d_{n+k}^{(1)}, y(x_{n+k}) \rangle + \langle d_{n+k}^{(1)}, y'(x_{n+k}) \rangle$$

Assim

$$\langle d_{n+k}^{(1)}, y_{n+k} \rangle = \langle d_{n+k}^{(1)}, y(x_{n+k}) \rangle +$$

$$+ \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(1)}} [\langle d_{n+k}^{(1)}, \hat{f}_{n+k} \rangle - \langle d_{n+k}^{(1)}, y'(x_{n+k}) \rangle]$$

Logo

$$\langle d_{n+k}^{(1)}, y(x_{n+k}) - y_{n+k} \rangle = - \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(1)}} [\langle d_{n+k}^{(1)}, \hat{f}_{n+k} - f(x_{n+k}, y_{n+k}) \rangle =$$

$$= O(h^{q+1})$$

pela definição de ordem.

2.2 - Extensão a problemas não lineares

Consideremos o p.v. inicial não linear

$$\begin{aligned} 2.2.1 \quad y' &= f(x, y) \\ y(a) &= \eta \end{aligned} \quad y, f \in \mathbb{R}^m$$

Definição 2.2.1 - O p.v. inicial (2.2.1) é separadamente "stiff" se a matriz

$$A = \frac{\partial f(x, y)}{\partial y}$$

for separadamente "stiff" para todo $(x, y(x))$ onde $x \in I = [a, b]$ e $y(x)$ é a solução exata de (2.2.1).

Uma expansão das técnicas "CDS" já descritas consiste em substituir o autosistema de $A(x)$ em (2.1.1) pelo autosistema da matriz Jacobiana $\frac{\partial f(x, y)}{\partial y}$ de (2.2.1), que é dado por

$$\{\lambda^{(i)}(x, y), c^{(i)}(x, y), d^{(i)}(x, y) / i = 1, 2, \dots, m\}$$

Se substituirmos o autosistema de $A(x)$ calculado em x_{n+k} pelo autosistema de $\frac{\partial f}{\partial y}$ calculado em (x_{n+k}, y_{n+k}) vamos introduzir complicações no cálculo de y_{n+k} , necessitando então de complicadas técnicas de iteração. Para evitar isto, usamos o autosistema calculado em $(x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k})$.

Vamos introduzir a seguinte notação

$$\tilde{\lambda}_n^{(i)} = \lambda^{(i)}(x_n, \tilde{y}_n)$$

$$\tilde{c}_n^{(i)} = c^{(i)}(x_n, \tilde{y}_n)$$

$$\tilde{d}_n^{(i)} = d^{(i)}(x_n, \tilde{y}_n)$$

$$i = 1, 2, \dots, m$$

Então a técnica "CDS", fica:

$$\tilde{y}_{n+k} = B y_n$$

2.2.2

$$y_{n+k} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \tilde{c}_{n+k}^{(i)}$$

1 - *Projeção do gradiente no espaço subdominante*

Para encontrar os fatores correção temos que resolver a seguinte equação:

$$I.1 \quad 0 = \langle \tilde{d}_{n+k}^{(i)}, f_{n+k} \rangle = \langle \tilde{d}_{n+k}^{(i)}, f(x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \tilde{c}_{n+k}^{(i)}) \rangle$$

$$i = 1, 2, \dots, s$$

Para isto usamos o seguinte método iterativo

$$[\xi_{n+k}^{(i)}]^{[0]} = \xi_{n+k-1}^{(i)}$$

$$I.2 \quad [\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t+1]} = [\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t]} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_{n+k}^{(i)}} \langle \tilde{d}_{n+k}^{(i)}, f(x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s [\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t]} \tilde{c}_{n+k}^{(i)}) \rangle$$

para $i = 1, 2, \dots, s$ e $t = 0, 1, 2, \dots$

Obs.3 - Se $\xi_{n+k-1}^{(i)}$ não for definido tomamos $\xi_{n+k-1}^{(i)} = 0$

4 - A convergência de I.2 é dada, não pela "stiffnes" do problema, mas pela razão de variação do autosistema.

5 - Se I.1 tem uma única solução então a convergência é obtida para um h suficientemente pequeno em relação à razão de variação do autosistema.

6 - Na prática, obtemos a convergência aproximadamente em 3 iterações.

Embora esta técnica "CDS" nos permite obter bons resultados para alguns problemas não lineares, não é uma técnica recomendada para um problema separadamente "stiff" em geral, pois podemos construir exemplos para os quais (I.1) não tem solução ou tem soluções múltiplas.

II - Redução à Escalar

O Desenvolvimento feito em (2.IV) é verdadeiro para o caso não linear até a equação (IV.6), mas não é possível ter explicitamente as equações dos fatores correção que correspondem a resolver o p.v.1. (IV.6) usando 1 passo da regra do trapézio, temos;

$$\begin{aligned} \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k} \rangle - \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle &= \\ &= \frac{h}{2} [\langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, f_{n+k} \rangle - \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, f_{n+k-1} \rangle] \end{aligned}$$

Usando (IV.5), temos

$$\begin{aligned} \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k} \rangle - \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle &= \\ &= \frac{h}{2} [\langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, f(x_{n+k}, y_{n+k-1} + (k_{n+k}^{(1)}(x_{n+k})) - \\ \text{II.1} \quad &- \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle \tilde{c}_{n+k}^{(1)} \rangle - \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, f(x_{n+k-1}, y_{n+k-1} + \\ &+ (k_{n+k}^{(1)}(x_{n+k-1}) - \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle \tilde{c}_{n+k}^{(1)}) \rangle] \end{aligned}$$

Tomando

$$F(x, z) = \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, f(x, y_{n+k-1} + (z - \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle \tilde{c}_{n+k}^{(1)}) \rangle$$

II.2

$$z \in \mathbb{R}^1$$

O problema valor inicial IV.6 da secção 1 fica ;

$$k_{n+k}^{(1)}(x) = F(x, k_{n+k}^{(1)}(x))$$

II.3

$$k_{n+k-1}^{(1)}(x_{n+k-1}) = \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle$$

Indicando por $k_{n+k}^{(1)}$ a aproximação de $k_{n+k}^{(1)}(x_{n+k})$, temos a seguinte equação não linear

$$\begin{aligned} \text{II.4} \quad k_{n+k}^{(1)} - \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle - \frac{h}{2} [F(x_{n+k}, k_{n+k}^{(1)}) + \\ + F(x_{n+k-1}, \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, y_{n+k-1} \rangle)] = \phi(k_{n+k}^{(1)}) = 0 \end{aligned}$$

O p.v.i. IV.3 é resolvido pelo seguinte processo iterativo

$$[k_{n+k}^{(1)}]^{[0]} = k_n^{(1)}$$

II.5

$$[k_{n+k}^{(1)}]^{[t+1]} = [k_{n+k}^{(1)}]^{[t]} - \phi(k_{n+k}^{(1)}) / (1 - \frac{h}{2} \tilde{\lambda}_{n+k}^{(1)})$$

para $i = 1, 2, \dots, s$ e $t = 0, 1, 2, \dots$

Obs. 7 - Aqui também a convergência de II.5 depende do raio de variação do autosistema e não da "stiffness" do problema.

8 - Vemos que ao contrário da iteração I.2 que é uma itera-

ção simultânea nas s incógnitas $\xi_{n+k}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, s$, II.5 pode ser feita separadamente para cada uma das incógnitas $k_{n+k}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, s$.

Esta técnica "CDS" falha em alguns problemas não lineares, pois o processo iterativo que gera o fator correção não converge, mesmo aumentando o número de iterações, (conforme verificamos no exemplo 6). Vamos ver então uma versão melhorada desta técnica "CDS", que para problemas lineares dá os mesmos resultados mas que é bastante superior para alguns problemas não lineares.

III - Versão Melhorada da Técnica Redução à Escalar

Consiste em aplicar a regra do trapêzio ao problema de valor inicial para depois tornar escalar, fazendo o produto escalar com os autovetores à esquerda correspondente ao autovalor dominante i.é, tomamos a regra do trapêzio

$$y_{n+k} - y_{n+k-1} = \frac{h}{2} [f(x_{n+k}, y_{n+k}) - f_{n+k-1}] \text{ e}$$

fazemos o seguinte produto escalar

$$\begin{aligned} & \langle \tilde{d}_{n+k}^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} - y_{n+k-1} \rangle = \\ & = \frac{h}{2} \langle \tilde{d}_{n+k}^{(i)}, f_{n+k-1} + f(x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=1}^s \xi_{n+k}^{(j)} c_{n+k}^{(j)}) \rangle \end{aligned}$$

$$i = 1, 2, \dots, s$$

Se $s = 1$, pela iteração de Newton, temos

$$[\xi_{n+k}^{(1)}]_{[t+1]} = [\xi_{n+k}^{(1)}]_{[t]} - \{ \langle \tilde{d}_{n+k}^{(1)}, \tilde{y}_{n+k} + [\xi_{n+k}^{(1)}]_{[t]} \tilde{c}_{n+k}^{(1)} - y_{n+k-1} -$$

$$\text{III.1} \quad - \frac{h}{2} (f_{n+k-1} + f(x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k} + [\xi_{n+k}^{(1)}]_{[t]} \tilde{c}_{n+k}^{(1)})) \rangle \}$$

$$\left\{ 1 - \frac{h}{2} \langle \tilde{d}_{n+k}, \frac{\partial f}{\partial y} (x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k} + [\xi_{n+k}^{(1)}]^{[t]} \tilde{c}_{n+k}^{(1)}) \rangle \right\}$$

$$t = 0, 1, 2, \dots$$

Tomando

$$y_{n+k}^{[t]} = \tilde{y}_{n+k} + [\xi_{n+k}^{(1)}]^{[t]} \tilde{c}_{n+k}^{(1)}$$

temos

$$[\xi_{n+k}^{(1)}]^{[t+1]} = [\xi_{n+k}^{(1)}]^{[t]} -$$

III.2

$$- \frac{\langle \tilde{d}_{n+k}, y_{n+k}^{[t]} - y_{n+k-1} - \frac{h}{2} (f_{n+k-1}, y_{n+k}^{[t]}) \rangle}{1 - \frac{h}{2} \tilde{\lambda}_{n+k}^{(t)}}$$

$$t = 0, 1, 2, \dots$$

Se $s > 1$, s iterações do tipo III.2 podem ser feitas, o que dá o seguinte método iterativo:

$$[\xi_{n+k}^{(i)}]^{[0]} = \xi_{n+k}^{(i)} \quad (= 0 \text{ se } \xi_{n+k}^{(i)} \text{ não é definido})$$

$$[\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t+1]} = [\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t]} -$$

$$\text{III.3} \quad - \frac{\langle \tilde{d}_{n+k}, y_{n+k}^{[t]} - y_{n+k-1} - \frac{h}{2} (f_{n+k-1} + f(x_{n+k}, y_{n+k}^{[t]}) \rangle}{1 - \frac{h}{2} \tilde{\lambda}_{n+k}^{(i)}}$$

$$i = 1, 2, \dots, s \quad \text{e} \quad t = 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{onde} \quad y_{n+k}^{[t]} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s [\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t]} \tilde{c}_{n+k}^{(i)}$$

IV - Técnica especial usando método Inverso

Calculamos $\xi_{n+k}^{(i)}$ pelo seguinte processo recursivo:

$$[\xi_{n+k}^{(i)}]^{[0]} = \xi_{n+k-1}^{(i)}$$

IV.1

$$[\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t+1]} = [\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t]} -$$

$$- \frac{1}{\lambda_{n+k}^{(i)}} \langle \tilde{d}_{n+k}^{(i)}, f(x_{n+k}, \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s [\xi_{n+k}^{(i)}]^{[t]} \tilde{c}_{n+k}^{(i)} - \hat{f}_{n+k} \rangle$$

CAPÍTULO 3 - Método Básico

Neste capítulo vamos estudar o método básico, seus efeitos sobre o erro, na técnica "CDS":

$$\tilde{y}_{n+k} = B y_n$$

3.0

$$y_{n+k} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)}$$

e também apresentar uma escolha conveniente destes métodos, a fim de diminuir o efeito da Interprojeção.

3.1 - Sobre o Método Básico

Experimentos numéricos tem mostrado que uma escolha mal feita do método básico, afeta os resultados computacionais.

Vamos fazer um desenvolvimento, que justifica a escolha do método básico como sendo um método de passo múltiplo (k - passos) linear explícito. Consideremos a equação teste $y' = Ay$.

Como o método básico é sempre escolhido como sendo um método racional, a técnica "CDS" fica

$$\tilde{y}_{n+k} = B y_n = \sum_{j=0}^{k-1} p_j(hA) y_{n+k-1-j}$$

$$y_{n+k} = \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)}$$

onde k é o número de passos do método básico, e os $p_j(hA)$ são polinômios, pois o método básico é explícito.

Vamos considerar a escolha III para fatores correção, ou seja

$$\xi_{n+k}^{(i)} = \frac{\langle d_{n+k}^{(i)}, \tilde{f}_{n+k} \rangle}{\lambda_{n+k}^{(i)}} \quad i = 1, 2, \dots, s$$

$$\begin{aligned} \text{Então} \quad \xi_{n+k}^{(i)} &= - \frac{\langle d^{(i)}, A \tilde{y}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(i)}} = \\ &= - \frac{\langle A^t d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(i)}} = - \frac{\langle \lambda^{(i)} d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(i)}} \end{aligned}$$

3.1.1

$$= - \frac{\langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle}{\lambda^{(i)}} \quad i = 1, 2, \dots, s$$

Como $\tilde{y}_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} P_j(hA) y_{n+k-1}$ onde $P_j(\cdot)$ são funções racionais, cujo denominador é sempre o mesmo. Seja $P(hA)$ esse denominador, então

$$P(hA) \tilde{y}_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} P_j^*(hA) y_{n+k-1}$$

Vemos que

$$\begin{aligned} \langle d^{(i)}, P(hA) \tilde{y}_{n+k} \rangle &= \langle d^{(i)}, [\gamma_0 I + \gamma_1 hA + \gamma_2 (hA)^2 + \dots] \tilde{y}_{n+k} \rangle \\ &= \gamma_0 \langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle + \gamma_1 h \lambda_1^1 \langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle + \gamma_2 h^2 \lambda_1^2 \langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle + \\ &+ \dots = P(h\lambda_1) \langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle \end{aligned}$$

Assim, por (3.1.1)

$$\begin{aligned} P(h\lambda^{(i)}) \xi_{n+k}^{(i)} &= - P(h\lambda^{(i)}) \langle d^{(i)}, \tilde{y}_{n+k} \rangle = \\ &= - \langle d^{(i)}, P(hA) \tilde{y}_{n+k} \rangle = - \langle d^{(i)}, \sum_{j=0}^{k-1} P_j^*(hA) y_{n+k-1} \rangle = \end{aligned}$$

$$= - \sum_{j=0}^{k-1} P_j^*(h\lambda^{(i)}) \langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle$$

Logo

$$\xi_{n+k}^{(i)} = - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{P_j^*(h\lambda^{(i)})}{P(h\lambda^{(i)})} \langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle =$$

$$= - \sum_{j=0}^{k-1} P_j(h\lambda^{(i)}) \langle d^{(i)}, y_{n+k-1} \rangle \quad i = 1, 2, \dots, s$$

Como para $i = 1, 2, \dots, s$ os $|\lambda^{(i)}|$ são grandes, é claro que, se os polinômios $P_j(\cdot)$ tem grau alto, podemos esperar fatores correção extremamente grandes, o que pode causar sensível aumento nos erros de arredondamento e resultar em overflow.

Notamos ainda que para um método de Runge-Kutta explícito de R-estágio, $k = 1$, $P_0(\cdot)$ tem grau R, para um método Preditor-Corretor no modo $P(EC)^lE$, $P_j(\cdot)$ tem grau $l+1$, e para um método linear explícito de k-passos, $P_j(\cdot)$, tem grau 1. Assim, dentre os métodos usuais, concluímos que a melhor escolha para o método básico é um método linear explícito de k-passos.

Poderemos escolher os outros fatores correção discutidos para encontrar argumentos semelhantes a favor dos métodos explícitos de k-passos.

Vamos estudar agora os efeitos do método básico sobre o erro.

3.2 - Interprojção das técnicas "CDS"

Consideremos a seguinte notação para as componentes da solução exata de (1.1.2) e de sua derivada.

$$3.2.1 \quad y(x) = \sum_{i=1}^m \phi^i(x) c^{(i)}(x, y(x))$$

onde $\phi^{(1)}(x) = \langle d^{(1)}(x, y(x)), y(x) \rangle$ e

$$y'(x) = \sum_{i=1}^m \hat{\phi}^{(i)}(x) c^{(i)}(x, y(x))$$

onde $\hat{\phi}^{(i)}(x) = \langle d^{(i)}(x, y(x)), y'(x) \rangle$

Como consequência imediata do teorema (2.1.1), temos o seguinte resultado:

Teorema 3.1.1.

Se o método básico na técnica "CDS" (3.0) é de k-passos, linear explícito com comprimento de passo h e se os fatores correção são calculados por qualquer uma das técnicas descritas no capítulo II, então todas as soluções numéricas de y_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, da equação teste separadamente "stiff" $y' = Ay$, obtidas pela técnica "CDS" (3.0) tendem para zero quando n tende para infinito, desde que $h\lambda^{(i)} \in R_B$, $i = s+1, s+2, \dots, m$ onde R_B é a região de estabilidade absoluta do método básico. Este teorema sugere que um fator importante na escolha do método básico é a amplitude de sua região de estabilidade.

Seja (3.0) aplicado a um problema de valor inicial separadamente "stiff".

Definição 3.1.1.

Para $n = 0, 1, 2, \dots$ e $i = 1, 2, \dots, s$, definimos

$$3.2.2 \quad \Delta c_n^{(i)} = c_n^{(i)} - \tilde{c}_n^{(i)}$$

onde Δ significa diferenças, mas não é identificado com o operador diferenças progressivas. Esses vetores (3.2.2) são os erros nas aproximações dos autovetores dominantes à direita, devido ao fato de $\tilde{c}_n^{(i)}$ ser calculado em $(x_n, \tilde{y}_n)$ ao invés de (x_n, y_n) , e aos erros arredondamento e truncamento que ocorrem nos métodos numéricos usa-

dos para calcular o autosistema,

Definição 3.1.2.

$$3.2.3 \quad y(x_n) = \sum_{i=1}^m \phi_n^{(i)} c_n^{(i)} \quad e$$

$$3.2.4 \quad y'(x_n) = \sum_{i=1}^m \hat{\phi}_n^{(i)} c_n^{(i)}, \text{ definimos}$$

$$3.2.5 \quad \Delta \phi_n^{(i)} = \phi_n^{(i)} - \langle d_n^{(i)}, y_n \rangle$$

$$3.2.6 \quad \Delta \hat{\phi}_n^{(i)} = \hat{\phi}_n^{(i)} - \langle d_n^{(i)}, f_n \rangle$$

para $i = 1, 2, \dots, n$, que são as componentes aproximadas dos erros globais, nas aproximações de $y(x_n)$ e $y'(x_n)$.

Tomamos agora n fixo.

Definição 3.1.3.

Para $t = 1, 2, \dots, s$

$$3.2.7 \quad \Delta \xi_{n+k}^{(t)} = \langle d_{n+k}^{(t)}, y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k} \rangle - \xi_{n+k}^{(t)}$$

isto é, $\Delta \xi_{n+k}^{(t)}$ é a diferença entre os fatores correção "ideais", que podem tornar as componentes do erro global zero.

Definição 3.1.4.

O erro global na aproximação $\tilde{y}_{n+k}$ é dado por

$$3.2.8 \quad \Delta B y_n = y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k}$$

Por (3.0), (3.2.2), (3.2.5) e (3.2.7), as componentes dominantes do erro global em y_{n+k} são dados por:

$$\begin{aligned}
\Delta\phi_{n+k}^{(r)} &= \phi_{n+k}^{(r)} - \langle d_{n+k}^{(r)}, y_{n+k} \rangle = \\
&= \phi_{n+k}^{(r)} - \langle d_{n+k}^{(r)}, \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \tilde{c}_{n+k}^{(i)} \rangle = \\
&= \langle d_{n+k}^{(r)}, y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k} \rangle - \langle d_{n+k}^{(r)}, \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} (c_{n+k}^{(i)} - \Delta c_{n+k}^{(i)}) \rangle = \\
&= \langle d_{n+k}^{(r)}, y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k} \rangle - \langle d_{n+k}^{(r)}, \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} c_{n+k}^{(i)} \rangle + \\
&+ \langle d_{n+k}^{(r)}, \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle = \\
&= \langle d_{n+k}^{(r)}, y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k} \rangle - \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, c_{n+k}^{(i)} \rangle + \\
&= \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle = \\
&= \langle d_{n+k}^{(r)}, y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k} \rangle - \xi_{n+k}^{(r)} + \\
&+ \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle = \\
&= \Delta\xi_{n+k}^{(r)} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle
\end{aligned}$$

Portanto para $r \leq s$ temos:

$$3.2.9 \quad \Delta\phi_{n+k}^{(r)} = \Delta\xi_{n+k}^{(r)} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle$$

De maneira, análoga, obtemos para as componentes subdominantes do erro global, com $r = s+1, s+2, \dots, m$.

$$\Delta\phi_{n+k}^{(r)} = \phi_{n+k}^{(r)} - \langle d_{n+k}^{(r)}, y_{n+k} \rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \phi_{n+k}^{(r)} - \langle d_{n+k}^{(r)}, \tilde{y}_{n+k} + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \tilde{c}_{n+k}^{(i)} \rangle = \\
&= \langle d_{n+k}^{(r)}, y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k} \rangle - \\
&\quad - \langle d_{n+k}^{(r)}, \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} (c_{n+k}^{(i)} - \Delta c_{n+k}^{(i)}) \rangle = \\
&= \langle d_{n+k}^{(r)}, y(x_{n+k}) - \tilde{y}_{n+k} \rangle + \\
&\quad + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle
\end{aligned}$$

Portanto

$$3.2.10 \quad \Delta \phi_{n+k}^{(r)} = \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta B y_n \rangle + \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle$$

para $r = s+1, s+2, \dots, m$

Como exemplo, consideremos o caso em que o método básico é o método de passo múltiplo linear explícito:

$$3.2.11 \quad y_{n+k} = - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j}$$

cujo erro de truncamento local é:

$$3.2.12 \quad \ell_{n+k} = y(x_{n+k}) + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y(x_{n+j}) - h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j y'(x_{n+j})$$

Usando os resultados anteriores, obtemos:

$$3.2.13 \quad \Delta By_n = \ell_{n+k} - \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m (\alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(i)} - h \beta_j \hat{\phi}_{n+j}^{(i)}) c_{n+j}^{(i)}$$

De fato:

$$\begin{aligned} \ell_{n+k} &= \Delta By_n + \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y(x_{n+j}) - h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j y'(x_{n+j}) = \\ &= \Delta By_n + \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \sum_{i=1}^m \phi_{n+j}^{(i)} c_{n+j}^{(i)} - h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j \sum_{i=1}^m \hat{\phi}_{n+j}^{(i)} c_{n+j}^{(i)} = \\ &= \Delta By_n + \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \sum_{i=1}^m (\Delta \phi_{n+j}^{(i)} + \langle d_{n+j}^{(i)}, y_{n+j} \rangle c_{n+j}^{(i)} - \\ &- h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j \sum_{i=1}^m (\Delta \hat{\phi}_{n+j}^{(i)} + \langle d_{n+j}^{(i)}, f_{n+j} \rangle) c_{n+j}^{(i)} = \\ &= \Delta By_n + \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m \alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(i)} c_{n+j}^{(i)} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j y_{n+j} - \\ &- h \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m \beta_j \Delta \hat{\phi}_{n+j}^{(i)} c_{n+j}^{(i)} - h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j} = \\ &= \Delta By_n + \tilde{y}_{n+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m \alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(i)} c_{n+j}^{(i)} - \\ &- h \sum_{j=1}^{k-1} \sum_{i=1}^m \beta_j \Delta \hat{\phi}_{n+j}^{(i)} c_{n+j}^{(i)} - y_{n+k} = \end{aligned}$$

$$= \Delta B y_n + \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m \alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(i)} c_{n+j}^{(i)} -$$

$$- h \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m \beta_j \hat{\phi}_{n+j}^{(i)} c_{n+j}^{(i)}$$

pois $y_{n+k} = \bar{y}_{n+k}$ no espaço subdominante.

Vamos fazer agora, um desenvolvimento em $\langle d_{n+r}^{(r)}, \Delta B y_n \rangle$ usando estes últimos resultados, para ilustrar as diversas influências no erro subdominante global.

$$\text{Colocando} \quad \Delta_j^* c_{n+k}^{(i)} = c_{n+k}^{(i)} - c_{n+j}^{(i)} \quad 3.2.14$$

e substituindo em 3.2.13, temos:

$$\langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta B y_n \rangle =$$

$$= \langle d_{n+k}^{(r)}, \ell_{n+k} - \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m (\alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(i)} - h \beta_j \hat{\phi}_{n+j}^{(i)}) (c_{n+k}^{(i)} - \Delta_j^* c_{n+k}^{(i)}) \rangle$$

$$= \langle d_{n+k}^{(r)}, \ell_{n+k} \rangle - \sum_{j=0}^{k-1} (\alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(r)} - h \beta_j \hat{\phi}_{n+j}^{(r)}) +$$

$$+ \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m (\alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(i)} - h \beta_j \hat{\phi}_{n+j}^{(i)}) \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta_j^* c_{n+k}^{(i)} \rangle$$

E então, substituindo em 3.2.10, segue

$$\Delta \phi_{n+k}^{(r)} = \langle d_{n+k}^{(r)}, \ell_{n+k} \rangle - \sum_{j=0}^{k-1} (\alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(r)} - h \beta_j \hat{\phi}_{n+j}^{(r)}) +$$

3.2.15

$$+ \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=1}^m (\alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(i)} - h \beta_j \hat{\phi}_{n+j}^{(i)}) \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta_j^* c_{n+k}^{(i)} \rangle +$$

$$+ \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle$$

para $r = s+1, s+2, \dots, m$

que é o erro subdominante global se o método básico é dado por 3.2.11.

Definição 3.1.5

"Sensibilidade" das técnicas "CDS", é a influência dos termos

$$(1) \quad \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle \quad r = 1, 2, \dots, m$$

sobre o erro global.

As expressões (3.2.9), (3.2.10) e (3.2.15) mostram as influências, por diversas causas, sobre o erro global. Vamos fazer um comentário sobre cada parcela em particular.

$$(1) \quad \sum_{i=1}^s \xi_{n+k}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta c_{n+k}^{(i)} \rangle \quad r = 1, 2, \dots, m$$

Estes termos influenciam as componentes dominantes e subdominantes do erro global, são devidos à impossibilidade de se calcular o autosistema exatamente. No caso linear, onde o autosistema dominante depende apenas de x , $\Delta c_{n+k}^{(1)}$ não desaparece por causa dos erros de arredondamento e truncamento, do método numérico aplicado para determinar o autosistema (por exemplo, o método das potências). A norma do autovetor à esquerda será grande se o autoproblema associado a $A(x_{n+k}, y_{n+k})$ for mal condicionado.

Os fatores correção devem ser pequenos (em módulo) pois são diretamente proporcionais ao erro e esses fatores corre-

ção $\xi_{n+k}^{(1)}$ dependem da escolha do método básico. Como os erros no autosistema esquerdo são pequenos no caso linear e podem ser controlados no caso não linear, fazendo a diferença $c^{(1)}(x_{n+k}, y_{n+k}) - c_{n+k}^{(1)}$, após calcular y_{n+k} por (3.0), "sensibilidade" das técnicas "CDS" não apresentará sérias dificuldades quando o autoproblema for razoavelmente bem condicionado e o método básico devidamente escolhido.

O termo (2) $\Delta \xi_{n+k}^{(r)}$, $r = 1, 2, \dots, s$, somente contribui para (3.2.9). Depende da escolha do fator correção.

A contribuição dos termos

(3) $\langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta B y_n \rangle$ $r = s+1, s+2, \dots, m$, são apenas para o erro subdominante, representam a $c_{n+k}^{(r)}$ - componentes do erro de truncamento local do método básico e são devidos aos erros causados pelo fato do método básico não ser aplicado nos valores anteriores exatos, desempenham o mesmo papel que, $\Delta \xi_{n+k}^{(r)}$, sobre o erro dominante.

Em (4), (5) e (6) consideramos B como (3.2.11).

Os termos (4) $\langle d_{n+k}^{(r)}, l_{n+k} \rangle$ $r = s+1, s+2, \dots, m$ contribuindo para o erro subdominante (3.2.15), são as $c_{n+k}^{(r)}$ - componentes do erro de truncamento local do método básico, que são pequenas se a solução exata é uniforme.

Uma outra contribuição para (3.2.15) é dada por

$$(5) \quad \sum_{j=0}^{k-1} (\alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(r)} - h \beta_j \hat{\phi}_{n+j}^{(r)})$$

$$r = s+1, s+2, \dots, m$$

que representa o erro devido aos erros nos valores anteriores e pelo fato do método básico ser aplicado nas componentes individuais da solução numérica.

Vamos nos referir como *interprojeção* à contribui

ção dos termos

$$(6) \quad \sum_{i=1}^m \sum_{j=0}^{k-1} [(\alpha_j \Delta \phi_{n+j}^{(i)} - h \beta_j \Delta \hat{\phi}_{n+j}^{(i)}) \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta_j^* c_{n+k}^{(i)} \rangle]$$

$r = s+1, s+2, \dots, m$, sobre o erro subdominante (3.2.15). Se dá pelo fato do autosistema não ser constante. É a projeção parcial dos erros anteriores, inclusive os dominantes sobre o espaço subdominante. A interprojeção provém da relação entre as componentes dominantes e subdominantes da solução numérica, por meio do método básico. Pela interprojeção, os erros dominantes em y_{n+j} (que são aumentados quando calculamos $f(x_{n+j}, y_{n+j})$ pelo mal-condicionamento de $f(x, y)$), são parcialmente projetados no espaço subdominante, o que é indesejável.

Para diminuir o efeito da interprojeção vamos estudar uns métodos básicos especiais. Diminuimos também este efeito tomando uma técnica "CDS" cujos erros dominantes em y_{n+j} são tão pequenos que os erros dominantes em f_{n+j} são ainda toleráveis e a projeção sobre o espaço subdominante não aumenta muito o erro subdominante.

3.3 - Métodos de projeção mínima

Neste parágrafo vamos estudar métodos básicos que diminuam o efeito da Interprojeção.

Observando as componentes de (3.2.15) vemos que o primeiro termo representa o erro de truncamento local, o segundo a propagação de erro do método de passo múltiplo linear. O 4º termo é devido à "sensibilidade" da técnica "CDS" e não vamos levá-lo em consideração aqui. O 3º termo representa a influência da interprojeção e pode ser grande se $\Delta_j^* c_{n+k}^{(i)} = c_{n+k}^{(i)} - c_{n+j}^{(i)} \neq 0$, isto

é, se o autosistema não for constante.

Como $[\hat{\Delta}\phi_{n+j}^{(i)}]$ se iguala aproximadamente (exatamente no caso linear) a $[\lambda_{n+j}^{(i)} \Delta\phi_{n+j}^{(r)}]$ e é muito maior que $|\Delta\phi_{n+j}^{(r)}|$, para $i = 1, 2, \dots, s$, então a maior contribuição para $\Delta\phi_n^{(r)}$, quando $\langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta_j^* c_{n+k}^{(i)} \rangle$ é suficientemente grande é dada por

$$3.3.1 \quad \rho = h \sum_{i=1}^s \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j \hat{\Delta}\phi_{n+j}^{(i)} \langle d_{n+k}^{(r)}, \Delta_j^* c_{n+k}^{(i)} \rangle$$

$$r = s+1, s+2, \dots, m$$

Suponhamos que

$\hat{\Delta}\phi_{n+j}^{(i)} = \hat{\Delta}\phi^{(i)}(x_{n+j})$. Então (3.3.1) fica

$$(3.3.2) \quad \rho(x_{n+k}) = h \sum_{i=1}^s \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j \rho^{(i)}(x_{n+j})$$

onde

$$\rho^{(i)}(x_{n+j}) = \hat{\Delta}\phi^{(i)}(x_{n+j}) \langle d^{(r)}(x_{n+k}), c^{(i)}(x_{n+k}) - c^{(i)}(x_{n+j}) \rangle$$

aqui os autovetores dependem apenas de x (se o problema for não linear, tomamos $c^i(x) = c^i(x, y(x))$).

Suponhamos também que $\rho^{(i)}(x)$ pode ser expandido em torno de x_{n+k} , então para q suficientemente grande obtemos:

$$\rho(h) = h \sum_{i=1}^s \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j \left[\sum_{t=0}^q \frac{h^t}{t!} (j-k)^t \frac{d^t}{dx^t} \rho^{(i)}(x_{n+k}) + O(h^{q+1}) \right]$$

$$= h \sum_{t=1}^q \sum_{i=1}^s \frac{h^t}{t!} \frac{d^t}{dx^t} \rho^{(i)}(x_{n+k}) \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j (j-k)^t + O(h^{q+2})$$

a soma em t , inicia em $t = 1$ pois $\rho^{(i)}(x_{n+k}) = 0$

Uma equivalência para as definições de ordem e erro

constante de um método linear de passo múltiplo é dada pela

Definição 3.3.1 - Um método de passo múltiplo linear explícito

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j} \quad \text{com } \alpha_k = 1$$

é dito não-projetante de grau q , se

$$\sum_{j=0}^{k-1} \beta_j (j-k)^t = 0 \quad \text{para } t = 1, 2, \dots, q$$

O termo $\sum_{j=0}^{k-1} \beta_j (j-k)^{q+1} = \gamma \neq 0$ é chamado projeção

constante do método de passo múltiplo linear explícito.

Entre dois métodos lineares de passo múltiplo não projetáveis de mesmo grau, escolhemos o de menor projeção constante, desde que outros fatores como estabilidade, exatidão, etc, são comparáveis para ambos os métodos.

Definição 3.3.2 - Um método linear de k -passos é dito de projeção mínima se sua ordem for maior ou igual a k e não projetante de grau $k-1$.

O seguinte teorema dá uma expressão explícita para os coeficientes de um método linear de passo múltiplo de projeção mínima.

Teorema 3.1 - Para $k \geq 2$, o método linear de k -passos de projeção mínima é definido pelas equações:

$$3.4 \quad \beta_j = (-1)^j \binom{k}{j} \quad j = 0, 1, \dots, k-1$$

$$3.5 \quad \alpha_j = -\beta_j / (k-j) \quad j = 0, 1, \dots, k-1$$

$$3.6 \quad \alpha_k = -\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \neq 0$$

onde $\binom{k}{j} = \frac{k!}{j!(k-j)!}$ e os coeficientes acima são normalizados a fim de tornar $\alpha_k = 1$.

A prova será aqui omitida. Pode ser encontrada em [Alfeld, 1977].

CAPÍTULO 4

Aplicações Numéricas

Neste capítulo são fornecidos alguns resultados numéricos, a fim de ilustrar o desenvolvimento teórico deste trabalho, e mostrar a viabilidade prática dos métodos estudados.

4.1 - Métodos usados

Como método básico para a técnica "CDS" usamos dois métodos, ambos de ordem 4, que foram implementados com passo constante $h = 0.1$.

Métodos Básicos

Método 1 - Usamos o método de Adams-Bashforth de 4ª ordem explícito

$$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{h}{24} \{55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n\}$$

Método 2 - Método de projeção mínima de 4ª ordem

$$\begin{aligned} y_{n+4} = & 1.91999984 y_{n+3} - 143999994 y_{n+2} + \\ & + 0.63999999 y_{n+1} - 0.11999999 y_n + \\ & + h \{1.91999984 f_{n+3} - 2.87999988 f_{n+2} + \\ & 1.91999984 f_{n+1} - 0.47999996 f_n\} \end{aligned}$$

Usamos também 2 métodos de passo múltiplo lineares inversos de 4-passos, sendo o segundo, fortemente infinitamente está-

vel, na técnica "CDS" especial usando método inverso.

Método 3 -

$$f_{n+4} = -f_{n+2} + \frac{h}{6} \{28y_{n+3} - 54y_{n+2} + 36y_{n+1} - 10y_n\}$$

Método 4 -

$$f_{n+4} = \frac{h}{6} \{26y_{n+3} - 57y_{n+2} + 42y_{n+1} - 11y_n\}$$

4.2 - Técnicas "CDS"

Para problemas lineares usamos as seguintes técnicas

"CDS":

II - Minimização do gradiente

Onde o fator correção é dado por (II.1), página 32.

III - Projeção do gradiente no espaço subdominante

Onde o fator correção é dado por (III.1), página 34.

IV - Redução à Escalar

Onde o fator correção é dado por (IV.8), página 41.

V - Técnica "CDS" especial

Onde o fator correção é dado por (V.3), página 44.

A técnica I - Projeção do gradiente sobre o espaço subdominante não foi usada na ilustração pois apresentou resultados bastante insatisfatórios, chegando a dar "overflow" na maioria dos problemas testados.

Para problemas não lineares usamos as técnicas:

I - Projeção do gradiente no espaço subdominante

Onde os fatores correção são dados por (I.2), página 49.

II - Redução à Escalar

Onde os fatores correção são dados por (II.5), página 51.

III - Versão melhorada da Redução à Escalar

Onde os fatores correção são dados por (III.2), página 53.

IV - Técnica especial usando método Inverso

Onde os fatores correção são dados por (IV.1), página 54.

4.3 - Implementação

A implementação que fizemos é bastante simples, sem qualquer sofisticação computacional.

Usamos um computador PDP11/45 do I.C.M.S.C., sistema RSX - 11M e as rotinas elaboradas em FORTRAN IV Plus.

Os valores iniciais foram tomados exatos, a menos do exemplo 7 onde os k valores iniciais foram determinados pelo

método de Euler [Lambert, 1973] e a previsão da solução exata foi feita pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem explícito [Lambert, 1973].

Para determinarmos o autovalor dominante e os autovetores direito e esquerdo usamos o método das potências calculado em cada passo, que apresentou muitos bons resultados, pois os problemas de equações diferenciais separadamente "stiff" apresentam os autovalores dominante bastante grande (em módulo), e a convergência foi alcançada em poucos passos.

4.4 - Exemplos

Nos exemplos abaixo, tabelamos o máximo erro dominante (E.D) e o máximo erro subdominante (E.S) nos intervalos testados, onde

$$E.D = \max | \langle d_{n+k}^{(1)}, y(x_{n+k}) - y_{n+k} \rangle | \quad e$$

$$E.S = \max \| y(x_{n+k}) - y_{n+k} - \langle d_{n+k}^{(1)}, y(x_{n+k}) - y_{n+k} \rangle c_{n+k}^{(1)} \|_{\infty}$$

Usamos como comprimento de passo $h = 0.1$.

Nos exemplos 2 e 5 foi usado o método linear inverso fortemente infinitamente estável (método 4), nos demais o método 3.

Exemplo 1

$$y_1' = -2000.5y_1 + 999.75y_2 + 1000.25$$

$$y_1(0) = 0$$

$$y_2' = y_1 - y_2$$

$$y_2(0) = -2$$

cujos autovalores são $\lambda_1 = -2000.5$ e $\lambda_2 = -0.5$

e a solução exata é dada por

$$y_1(x) = -1.49998875 e^{-0.5x} + 0.499875 e^{-2000.5x} + 1$$

$$y_2(x) = -2.99975 e^{-0.5x} - 0.00025 e^{-2000.5x} + 1$$

Intervalo tabelado [0.4,10]

Técnica "CDS"	Método de Projeção mínima		Método Adams Bashforth	
	E.D.	E.S.	E.D.	E.S.
II	0.259×10^{-3}	0.457×10^{-5}	0.259×10^{-3}	0.202×10^{-5}
III	0.839×10^{-5}	0.457×10^{-5}	0.839×10^{-5}	0.202×10^{-5}
IV	0.170×10^{-4}	0.457×10^{-5}	0.170×10^{-4}	0.202×10^{-5}
V	0.177×10^{-4}	0.457×10^{-5}	0.177×10^{-4}	0.202×10^{-5}

Exemplo 2

$$y'(x) = \lambda y(x) - \lambda \cos(x) - \sin x$$

$$y'(0) = 0$$

cujo autovalor é $\lambda_1 = -10^4$ e a solução exata é $y(x) = \cos x$

Intervalo tabelado[0,3]

Técnica "CDS"	Método de projeção mínima		Método de Adams Bashforth	
	E.D.	E.S.	E.D.	E.S.
II	0.999×10^{-4}	0	0.999×10^{-4}	0
III	0.999×10^{-4}	0	0.999×10^{-4}	0
IV	0.107×10^{-6}	0	0.107×10^{-6}	0
V	0.203×10^{-6}	0	0.203×10^{-6}	0

Exemplo 3

$y'(x) = A(x) (z(x)-y) + z'(x)$

$y(0) = (0,0,1)^T$

com

$$A(x) = \frac{1}{R-1} \begin{bmatrix} \alpha R - \beta & \beta - \alpha & \frac{\beta - \alpha}{R} \\ (\gamma - \beta)R & \beta R - \gamma & \beta - \gamma \\ (\alpha - \gamma)R^2 & (\gamma - \alpha)R & \gamma R - \alpha \end{bmatrix}$$

com $\alpha = -10^7$ $\beta = -1$ $\gamma = -2$

e $R = -2 + 1.5 \text{ sen}(Tx)$ com $T = 0.9234567$

cujos autovalores são $\lambda_1 = -10^7$ $\lambda_2 = -2$ e $\lambda_3 = -1$

e a solução exata é dada por $y(x) = (\text{sen } x, \text{sen}(\frac{Tx}{4}), e^{-x})^T$

Técnica "CDS"	Método de projeção mínima		Método de Adams Bashforth	
	E.D.	E.S.	E.D.	E.S.
I	0.105×10^{-6}	0.375×10^{-2}	0.105×10^{-6}	0.537×10^{-2}
II	0.194×10^{-6}	0.621×10^{-2}	0.194×10^{-6}	0.812×10^{-2}
III	0.108×10^{-8}	0.351×10^{-2}	0.108×10^{-8}	0.351×10^{-2}
IV	0.209×10^{-6}	0.646×10^{-2}	0.209×10^{-6}	0.103×10^{-1}

Exemplo 4 $y_1'(x) = -41y_1(x)+59y_2(x) - g(x)$ $y_1(0) = 9.9$
 $y_2'(x) = 40 y_1(x)-60y_2(x) + g(x)$ $y_2(0) = 0$
 com $g(x) = 2x^3(x^2 - 50x - 2)e^{-x^2}$

cujos autovalores são : $\lambda_1 = -100$ e $\lambda_2 = -1$
e a solução exata é dado por $y_1(x) = 4e^{-100x} + 5.9e^{-x} + x^4e^{-x^2}$
 $y_2(x) = -4e^{-100x} + 4e^{-x} - x^4e^{-x^2}$

Intervalo tabelado[3,6]

Técnica "CDS"	Método de projeção mínima		Método de Adams Bashforth	
	E.D.	E.S.	E.D.	E.S.
II	0.550×10^{-3}	0.903×10^{-5}	0.550×10^{-3}	0.393×10^{-5}
III	0.101×10^{-3}	0.903×10^{-5}	0.101×10^{-3}	0.393×10^{-5}
IV	0.424×10^{-5}	0.903×10^{-5}	0.424×10^{-5}	0.393×10^{-5}
V	0.660×10^{-3}	0.903×10^{-5}	0.660×10^{-3}	0.393×10^{-5}

Exemplo 5 $y'(x) = A(x)(y-z(x) + z'(x))$ com $y(0) = (-2, 6, 10)^T$

com $A(x) = \frac{1}{R-1} \begin{bmatrix} \alpha R - \beta & \beta - \alpha & (\beta - \alpha)\sqrt{v(x)} \\ (\gamma - \beta)R & \beta R - \gamma & \beta - \gamma \\ (\alpha - \gamma)R^2 & (\gamma - \alpha)R & \gamma R - \alpha \end{bmatrix}$ com $R = R(x) = \frac{45x}{23} - 5$
 $\alpha = -10^6$
 $\beta = -1$
 $\gamma = -2$

cujos autovalores são $\lambda_1 = -10^6$ $\lambda_2 = -2$ e $\lambda_3 = -1$

e cuja solução exata é $y(x) = z(x) = e^{x/10}(-2, 6, 10)^T$

Intervalo tabelado [0, 2]

Técnica "CDS"	Método de projeção mínima		Método de Adams Bashforth	
	E.D.	E.S.	E.D.	E.S.
I	0.115×10^{-5}	0.302×10^{-2}	0.116×10^{-5}	0.177×10^{-1}
II	0.465×10^{-6}	0.141×10^{-2}	0.465×10^{-6}	0.526×10^{-2}
III	0.105×10^{-10}	0.277×10^{-5}	0.105×10^{-10}	0.267×10^{-6}
IV	0.166×10^{-10}	0.272×10^{-5}	0.183×10^{-10}	0.182×10^{-6}

Se no exemplo 5 tomarmos $\lambda_1 = -10^3$, isto é tomamos $\alpha = -10^3$ temos os seguintes resultados

Técnica "CDS"	Método de projecção mínima		Método de Adams Bashforth	
	E.D.	E.S.	E.D.	E.S.
II	0.115×10^{-2}	0.310×10^{-2}	0.116×10^{-2}	0.174×10^{-1}
III	0.465×10^{-3}	0.144×10^{-2}	0.465×10^{-3}	0.516×10^{-2}
IV	0.667×10^{-8}	0.270×10^{-5}	0.667×10^{-8}	0.148×10^{-6}
V	0.927×10^{-9}	0.272×10^{-5}	0.158×10^{-8}	0.328×10^{-7}

Exemplo 6

$$y' = u(x,y) - u(x,z(x)) + z'(x)$$

$$y(0) = \frac{1}{3}(1,1,1)^T$$

$$\left(\begin{array}{l} \frac{1}{3} \alpha y_1^3 + w(x)y_2 - w(x)y_3 \\ \frac{1}{3} \beta y_2^2 + w(x)y_3 \\ \frac{1}{3} \gamma y_3^3 \end{array} \right)$$

onde $u(x,y) =$

$$\text{com } y = (y_1, y_2, y_3)^T$$

$$\alpha = -10^4$$

$$\beta = -1/2$$

$$\gamma = -1/3$$

$$w(x) = -160(x-1.25)$$

cujas soluções exatas são $y(x) = z(x) = \frac{1}{3}e^{x/10}(1,1,1)^T$

e os autovalores do Jacobiano são $\lambda_1 = \alpha y_1^2$, $\lambda_2 = \beta y_2^2$ e $\lambda_3 = \gamma y_3^2$

Intervalo tabelado [0,2]

Técnica "CDS"	Método de Projeção mínima		Método de Adams Bashforth	
	E.D.	E.S.	E.D.	E.S.
I	0.292×10^{-4}	0.318×10^{-5}	0.292×10^{-4}	0.151×10^{-7}
II	falho	falho	falho	falho
III	0.477×10^{-9}	0.318×10^{-5}	0.477×10^{-9}	0.151×10^{-7}
IV	0.225×10^{-9}	0.318×10^{-5}	0.603×10^{-10}	0.151×10^{-7}

Exemplo 7

$$y_1' = 0.2(y_2 - y_1)$$
$$y_2' = 10y_1 - (60 - 0.125y_3)y_2 + 0.125y_3$$
$$y_3' = 1$$

$$y_1(0) = 0$$
$$y_2(0) = 0$$
$$y_3(0) = 0$$

cujos autovalores são $\lambda_1 = -61 \rightarrow -58$ $\lambda_2 = -0.17 \rightarrow -0.012$ e $\lambda_3 = 0$

Intervalo tabelado [0,10]

Técnica "CDS"	Método de Projeção mínima		Método de Adams Bashforth	
	E.D.	E.S.	E.D.	E.S.
I	0.889×10^{-5}	0.193×10^0	0.846×10^{-5}	0.452×10^{-5}
II	0.506×10^{-2}	0.193×10^0	0.431×10^{-2}	0.452×10^{-5}
III	0.219×10^{-2}	0.194×10^0	0.218×10^{-2}	0.452×10^{-5}
IV	0.473×10^{-2}	0.193×10^0	0.473×10^{-2}	0.451×10^{-5}

4.5 - CONCLUSÕES

Essas técnicas "CDS" [Alfeld, Lambert, 1977], são algo de novo no contexto "stiff", visto que calculam o autosistema dominante em cada passo da discretização, evitando inversão de matrizes e outros problemas computacionais que são associados a problemas "stiff". O esforço computacional para encontrar o auto-sistema dominante diminui, quando "stiffness" aumenta. Mais ainda, as componentes dominantes do erro local diminuem quando "stiffness" aumenta. [Como vemos no exemplo 5].

Nos exemplos numéricos, as técnicas "CDS" que apresentaram melhores resultados foram a técnica redução à escalar e a técnica especial usando os métodos passo múltiplo lineares inversos. Para os problemas não lineares, os melhores resultados ficaram com as técnicas redução à escalar, versão melhorada da redução à escalar e a técnica especial usando método inverso.

Quanto ao método básico, os métodos de projeção mínima funcionam razoavelmente bem quando o autosistema dominante não é constante, pois diminuem os efeitos da interprojeção, isto é, diminuem os erros sobre o espaço subdominante. Existe muito pouco estudo teórico sobre o método básico, o que abre espaço para novos estudos, para melhorar ainda mais os resultados obtidos através das técnicas "CDS".

APÊNDICE - Listagem dos programas usados:

Damos a seguir a listagem dos programas usados e por último, os coeficientes dos met.de projeção mínima (teor. 3.1).

```

C  CALCULO DA MATRIZ TRANSPOSTA
  SUBROUTINE TRANP(A,AT,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION A(3,3),AT(3,3)
    DO 1 I=1,N
      DO 1 J=1,N
1     AT(I,J)=A(J,I)
      RETURN
    END
  
```

```

C  CALCULO DO PRODUTO DE UM ESCALAR POR UM VETOR
  SUBROUTINE ESCA(S,X,Y,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION X(3),Y(3)
    DO 1 I=1,N
1     Y(I)=S*X(I)
      RETURN
    END
  
```

```

C  MATRIZ IDENTIDADE
  SUBROUTINE IDE(IDENT,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DOUBLE PRECISION IDENT(3,3)
    DO 1 I=1,N
      DO 1 J=1,N
1     IDENT(I,J)=0.
      DO 2 I=1,N
2     IDENT(I,I)=1.
      RETURN
    END
  
```

```

C  IGUALDADE DE DUAS MATRIZES
  SUBROUTINE IGUAL(A,D,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION A(3,3),D(3,3)
    DO 1 I=1,N
      DO 1 J=1,N
1     D(I,J)=A(I,J)
      RETURN
    END
  
```

```

C  MULTIPLICACAO DE DUAS MATRIZES
  SUBROUTINE MULT(A,U,T,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION A(3,3),U(3,3),T(3,3)
    DO 2 I=1,N
      DO 2 J=1,N
        T(I,J)=0.
      DO 2 K=1,N
2     T(I,J)=A(I,K)*U(K,J)+T(I,J)
      RETURN
    END
  
```

```

C  MULTIPLICACAO DE UM VETOR POR UMA MATRIZ
  SUBROUTINE VETOR(A,Y,Z,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION A(3,3),Y(3),Z(3)
    DO 1 I=1,N
1     Z(I)=0.
      DO 2 I=1,N
      DO 2 J=1,N
2     Z(I)=A(I,J)*Y(J)+Z(I)
      RETURN
    END
  
```

```

C  CALCULO DO COMPRIMENTO DE UM VETOR
  SUBROUTINE COMPR(X,S,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION X(3)
    SOM=0.
    DO 1 I=1,N
1     SOM=SOM+X(I)*X(I)
    S=DSQRT(SOM)
    RETURN
  END
  
```

```

C   PRODUTO DE UM ESCALAR POR UMA MATRIZ
      SUBROUTINE PRODT(S,A,B,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION A(3,3),B(3,3)
      DO 1 I=1,N
      DO 1 J=1,N
1    B(I,J)=S*A(I,J)
      RETURN
      END

C   SUBTRACAO DE DUAS MATRIZES
      SUBROUTINE SURTR(A,B,C,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION A(3,3),B(3,3),C(3,3)
      DO 1 I=1,N
      DO 1 J=1,N
1    C(I,J)=A(I,J)-B(I,J)
      RETURN
      END

C   CALCULO DA MATRIZ A DO P.V.I. LINEAR  $Y' = A(X)Y(X) + G(X)$ 
C   ESTA MATRIZ DEVE SER MODIFICADA EM CADA PROBLEMA
      SUBROUTINE MAT1(A,X)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION A(3,3)
      R=45*X/23-5
      ALFA=-10.E5
      BETA=-1.
      GAMA=-2.
      A(1,1)=(ALFA*R-BETA)/(R-1)
      A(1,2)=(BETA-ALFA)/(R-1)
      A(1,3)=(BETA-ALFA)/(R*(R-1))
      A(2,1)=(GAMA-BETA)*R/(R-1)
      A(2,2)=(BETA*R-GAMA)/(R-1)
      A(2,3)=(BETA-GAMA)/(R-1)
      A(3,1)=(ALFA-GAMA)*R**2/(R-1)
      A(3,2)=(GAMA-ALFA)*R/(R-1)
      A(3,3)=(GAMA*R-ALFA)/(R-1)
      RETURN
      END

C   SE O P.V.I. FOR NAO LINEAR  $Y'(X)=F(X,Y(X))$ , CONSIDERAMOS O
C   JACORTIANO DE  $F(X,Y(X))$ 
C   DEVE SER MODIFICADO PARA CADA P.V.I. A SER RESOLVIDO
      SUBROUTINE MATNL(A,X,Y)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION A(3,3),Y(3)
      R=-160.*(X-1.25)
      ALFA=-10.E+03
      BETA=-1./2
      GAMA=-1./3
      A(1,1)=ALFA*Y(1)**2
      A(1,2)=R
      A(1,3)=-R
      A(2,1)=0.
      A(2,2)=BETA*Y(2)**2
      A(2,3)=R
      A(3,1)=0.
      A(3,2)=0.
      A(3,3)=GAMA*Y(3)**2
      RETURN
      END

```

```

C  CALCULO DO MAIOR AUTOVALOR E DOS AUTOVETORES DIREITO E ESQUERDO
C  CORRESPONDENTE AO MAIOR AUTOVALOR, ATRAVES DO MET. DAS POTENCIAAS
  SUBROUTINE AUTVA(LAMBDA,U,A,X,MMAX,NORT,EPS,VZERO,N)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  DOUBLE PRECISION L,LZERO,LAMRD(3),IDENT(1,3)
  DIMENSION A(3,3),B(3,3),U(3,3),V(3,3),VZERO(3),Y(3)
  CALL IDE(IDENT,N)
  CALL IGUAL(IDENT,R,N)
  MODIFICAMOS O VETOR INICIAL DE MODO QUE ELE SEJA ORTOGONAL A TODOS
  OS AUTOVETORES CALCULADOS ANTERIORMENTE
  CALL VETOR(B,VZERO,V,N)
  CALL COMPR(V,LZERO,N)
  CALCULO DAS ITERACOES SUCESSIVAS DO METODO DAS POTENCIAS
  DO 3 M=1,MMAX
  C  PERIODICAMENTE RE-ORTOGONOLIZAMOS O VETOR V
  IF((M/NORT)*NORT-M)2,1,2
  1  CALL VETOR(B,V,Y,N)
  CALL COMPR(Y,L,N)
  CALL ESCA(1./L,Y,V,N)
  2  CALL VETOR(A,V,Y,N)
  CALL COMPR(Y,L,N)
  CALL ESCA(1./L,Y,V,N)
  C  TESTE DE CONVERGENCIA
  IF(DABS((L-LZERO)/LZERO)-EPS)4,3,3
  3  LZERO=L
  4  CALL VETOR(A,V,Y,N)
  C  VAMOS ESTABELECEER O SINAL DO AUTOVALOR CALCULADO
  DO 7 K=1,N
  IF(DABS(V(K))-0.1E-07)7,7,5
  5  IF(V(K)*Y(K))6,8,8
  6  L=-L
  GO TO 8
  7  CONTINUE
  8  LAMBDA(1)=L
  DO 9 K=1,N
  U(K,1)=V(K)
  RETURN
  END

```

```

C  VETOR SOLUCAO DA EQ.DIFERENCIAL, USADA PARA COMPARAR OS RESUL-
C  TADOS OBTIDOS. E MUDADA PARA CADA PROBLEMA
  SUBROUTINE VETZ(Z,X)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  DIMENSION Z(3)
  RI=1./3*DEXP(X/10)
  DO 1 I=1,3
  1  Z(I)=RI
  RETURN
  END

```

```

C  CALCULO DA DERIVADA DO VETOR SOLUCAO Z(X)
  SUBROUTINE VETDZ(DZ,X)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  DIMENSION DZ(3)
  RID=0.1/3*DEXP(X/10)
  DO 1 I=1,3
  1  DZ(I)=RID
  RETURN
  END

```

```

  SUBROUTINE CALCU(U,X,Y)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  DIMENSION U(3),Y(3)
  H=-160.*(X-1.25)
  ALFA=-10.0+03
  BETA =-1./2
  GAMA=-1./3
  U(1)=1./3*ALFA*Y(1)**3+R*Y(2)-R*Y(3)
  U(2)=1./3*BETA*Y(2)**3+R*Y(3)
  U(3)=1./3*GAMA*Y(3)**3
  RETURN
  END

```

```

C
C  CALCULO DA FUNCAO F(X,Y(X)), ONDE F(X,Y(X)) E A EQUACAO DIFERENCIAL "STIFF"
C  A SER RESOLVIDA
  SUBROUTINE CALC(F,X,Y,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION F(3),Y(3),UY(3),UZ(3),Z(3),DZ(3)
    CALL VETZ(Z,X)
    CALL VETDZ(DZ,X)
    CALL CALC(UY,X,Y)
    CALL CALC(UZ,X,Z)
    DO 10 I=1,N
      F(I)=UY(I)-UZ(I)+DZ(I)
    RETURN
  END

```

```

C
C  CALCULO DO PRODUTO ESCALAR DE DOIS VETORES
  SUBROUTINE PRESC(PE,C,D,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION C(3),D(3)
    PE=0.
    DO 1 I=1,N
      PE=PE+C(I)*D(I)
    RETURN
  END

```

C CALCULO DA FUNCAO G(X), DO PROBLEMA DE VALOR INICIAL $F(X,Y) = A(X)Y + G(X)$

```

  SUBROUTINE CALCG(G,X,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION G(3)
    DIMENSION A(3,3),Z(3),DZ(3)
    CALL MAT1(A,X)
    CALL VETZ(Z,X)
    CALL VETDZ(DZ,X)
    DO 1 I=1,N
      AUX=0.
      DO 2 J=1,N
        AUX=AUX-A(I,J)*Z(J)
      G(I)=AUX+DZ(I)
    CONTINUE
    RETURN
  END

```

C CALCULO DOS DIVERSOS FATORES CORRECAO
C PARA PROBLEMAS E.D.O. LINEARES SEPARADAMENTE "STIFF"

```

C
C  FATOR CORRECAO USANDO F(X,Y) CALCULADA POR UM MET. INVERSO
  SUBROUTINE KSI(QS1,G4,F4,RAUT,Y4,D4,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION F4(3),Y4(3),G4(3),DIF(3),D4(3)
    DO 1 I=1,N
      DIF(I)=F4(I)-G4(I)
      CALL PPESC(Q1,D4,Y4,N)
      CALL PRESC(Q2,D4,DIF,N)
      QS14=-Q1+Q2/RAUT
    RETURN
  END

```

```

C
C  FATOR CORRECAO - PROJECAO DO GRADIENTE
  SUBROUTINE KSI1(QS1,D4,Y4,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    DIMENSION D4(3),Y4(3)
    CALL PRESC(Q,D4,Y4,N)
    QS1=-Q
    RETURN
  END

```

```

C      FATOR CORRECAO - PROJ.DO GRADIENTE NO ESP.SUBDOMINANTE.
      SUBROUTINE KSI3(QSI43,RAUT,Y4,D4,FTIL,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION Y4(3),D4(3),FTIL(3)
      CALL PRESC(Q1,D4,FTIL,N)
      QSI43=-Q1/RAUT
      RETURN
      END

C      FATOR CORRECAO - MINIMIZACAO DO GRADIENTE.
      SUBROUTINE KSI2(QSI42,RAUT,C4,FTIL,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION C4(3),FTIL(3)
      CALL PRESC(Q1,C4,FTIL,N)
      QSI42=-Q1/RAUT
      RETURN
      END

C      FATOR CORRECAO - REDUCAO A ESCALAR
      SUBROUTINE KSI4(QSI,D4,Y3,F3,G4,RAUT,H,Y4,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION D4(3),Y3(3),F3(3),G4(3),Y4(3),VETOR(3)
      DO 1 I=1,N
      VETOR(I)=Y3(I)+H/2.*(F3(I)+G4(I))
      CALL PRESC(Q1,D4,VETOR,N)
      CKN=Q1/(1.-H/2.*RAUT)
      CALL PRESC(Q,D4,Y4,N)
      QSI=-Q+CKN
      RETURN
      END

C      CALCULO DOS FATORES CORRECAO PARA PROBLEMAS NAO LINEARES

C      MET.PROJECAO DO GRADIENTE NO ESPACO SUBDOMINANTE.
      SUBROUTINE KSI3(QSI,RAUT,X4,D4,C4,Y4,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION D4(3),C4(3),Y4(3),FN(3),YIT(3)
      QSI=0.
      DO 10 IT=1,3
      DO 5 I=1,N
      YIT(I)=Y4(I)+QSI*C4(I)
      CALL CALCF(FN,X4,YIT,N)
      CALL PRESC(Q,D4,FN,N)
      QSI=QSI-Q/RAUT
      CONTINUE
      RETURN
      END

C      SUBROTINAS USADAS NO CALCULO DOS FATORES CORRECAO REDUCAO AD ESCALAR

      SUBROUTINE FUNC(F,D4,Y3,Z,C4,X,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION D4(3),Y3(3),C4(3),YIT(3),FSCA(3)
      CALL PRESC(Q,D4,Y3,N)
      ZAUX=Z-Q
      DO 10 I=1,N
      YIT(I)=Y3(I)+ZAUX*C4(I)
      CALL CALCF(FSCA,X,YIT,N)
      CALL PRESC(F,D4,FSCA,N)
      RETURN
      END

      SUBROUTINE FUNFI(FIT,QKN,D4,Y3,C4,X4,X3,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION D4(3),Y3(3),C4(3)
      CALL PRESC(Q,D4,Y3,N)
      CALL FUNC(FX,D4,Y3,QKN,C4,X4,N)
      CALL FUNC(FY,D4,Y3,Q,C4,X3,N)
      FIT=QKN-Q-0.5*H*(FX+FY)
      RETURN
      END

```

```

      SUBROUTINE CALD3(OKN,A,X3,Y3,RAUT,U,MMAX,NORT,EPS,VZERO,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION A(3,3),Y3(3),U(3,3),VZERO(3),C3(3),AT(3,3),UE(3,3),
      *DE(3),D3(3)
      CALL MATNL(A,X3,Y3)
      CALL AUTVA(RAUT,U,A,X3,MMAX,NORT,EPS,VZERO,N)
      DO 1 I=1,N
      1  C3(I)=U(I,1)
      CALL TRANP(A,AT,N)
      CALL AUTVA(RAUT,UE,AT,X3,MMAX,NORT,EPS,VZERO,N)
      DO 2 I=1,N
      2  DE(I)=UE(I,1)
      CALL PRESC(Q,DE,C3,N)
      DO 3 I=1,N
      3  D3(I)=DE(I)/Q
      CALL PRESC(OKN,D3,Y3,N)
      RETURN
      END

```

C CALCULO DOS FATORES CORRECAO USANDO A TECNICA REDUCAO AO ESCALAR

```

      SUBROUTINE KSIN4(QSI,X3,X4,Y3,Y4,C4,D4,A,U,MMAX,NORT,
      *EPS,VZERO,RAUT,H,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION A(3,3),Y3(3),U(3,3),VZERO(3),D4(3),C4(3),Y4(3)
      CALL CALD3(OKN,A,X3,Y3,RAUT,U,MMAX,NORT,EPS,VZERO,N)
      DO 10 IT=1,30
      CALL FUNFI(FIT,OKN,D4,Y3,C4,X4,X3,N)
      OKN=OKN-FIT/(1-0.5*H*RAUT)
      10 CONTINUE
      CALL PRESC(Q,D4,Y4,N)
      QSI=-Q+OKN
      RETURN
      END

```

C CALCULO DO FATOR CORRECAO USANDO A VERSAO MELHORADA DA TECNICA REDUCAO A ESCALAR

```

      SUBROUTINE REDU(QSI,Y3,Y4,X3,X4,C4,D4,RAUT,H,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION Y3(3),Y4(3),D4(3),YIT(3),C4(3),FY(3),FYIT(3)
      QSI=Q.
      DO 10 IT=1,3
      DO 1 I=1,N
      1  YIT(I)=Y4(I)+QSI*C4(I)
      CALL CALCF(FY,X3,Y3,N)
      CALL CALCF(FYIT,X4,YIT,N)
      DO 2 I=1,N
      2  YIT(I)=YIT(I)-Y3(I)-(H/2)*(FY(I)+FYIT(I))
      CALL PRESC(Q,D4,YIT,N)
      10 QSI=QSI-Q/(1-H/2*RAUT)
      RETURN
      END

```

C CALCULO DO FATOR CORRECAO USANDO METODO INVERSO PARA O CALCULO DE F(X,Y)

```

      SUBROUTINE KSIN5(QSI,D4,C4,Y4,Y3,Y2,Y1,Y0,X4,RAUT,H,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      DIMENSION D4(3),C4(3),YIT(3),FN(3),FTIL(3),Y4(3),Y3(3),Y2(3),
      *Y1(3),Y0(3)
      QSI=Q.
      DO 10 IT=1,6
      DO 1 I=1,N
      1  YIT(I)=Y4(I)+QSI*C4(I)
      CALL CALCF(FN,X4,YIT,N)
      DO 2 I=1,N
      2  FTIL(I)=(26*Y3(I)-57*Y2(I)+42*Y1(I)-11*Y0(I))/(6*H)
      DO 3 I=1,N
      3  FN(I)=FN(I)-FTIL(I)
      CALL PRESC(Q,D4,FN,N)
      10 QSI=QSI-Q/RAUT
      RETURN
      END

```

```

C. CALCULO DO ERRO DOMINANTE = MDC , ERRO SUBDOMINANTE = ES
C. E DA DIFERENCA ENTRE O VALOR EXATO E O VALOR APROXIMADO DA SOL.
SUBROUTINE CMDC(MDC,D4,YE4,Z,C4,ES,DIF,N)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION MDC
DIMENSION D4(3),LK(3),C4(3),YE4(3),Z(3),DIF(3)
DO 1 I=1,N
1 DIF(I)=Z(I)-YE4(I)
CALL PRESC(Q,D4,DIF,N)
DO 2 I=1,N
2 ER(I)=DIF(I)-Q*C4(I)
CALL CUMPR(ER,ES,N)
MDC=DABS(Q)
RETURN
END

```

```

C. CALCULO DOS FATORES CORRECAO PARA PROBLEMAS LINEARES
SUBROUTINE LINEAR(IKSI,QSI43,X4,Y4,D4,C4,RAUT,Y2,Y1,Y0,Y3,
*F2,F3,H,N,PASSO)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
INTEGER PASSO
DIMENSION FTIL(3),Y4(3),D4(3),C4(3),Y3(3),Y0(3),Y1(3),Y2(3),
*F3(3),G4(3),F2(3)
GO TO (205,210,215,220,225)IKSI
205 IF(PASSO,NE. 1) GO TO 207
WRITE(5,206)
206 FORMAT(10X,'TECNICA "CDS" = PROJECAO NO ESPACO SUBDOMINANTE',///)
WRITE(5,1)
1 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,
*'ERRO SUBDOMINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
207 CALL CALCF(FTIL,X4,Y4,N)
CALL KSI1(QSI43,D4,Y4,N)
RETURN
210 IF(PASSO,NE. 1) GO TO 212
WRITE(5,211)
211 FORMAT(//,10X,'TECNICA "CDS" = MINIMIZACAO DO GRADIENTE',///)
WRITE(5,2)
2 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,
*'ERRO SUBDOMINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
212 CALL CALCF(FTIL,X4,Y4,N)
CALL KSI2(QSI43,RAUT,C4,FTIL,N)
RETURN
215 IF(PASSO,NE. 1) GO TO 217
WRITE(5,216)
216 FORMAT(//,10X,'TECNICA "CDS" = PROJ. DO GRADIENTE NO ESP.SUBDO
*MINANTE',///)
WRITE(5,3)
3 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,
*'ERRO SUBDOMINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
217 CALL CALCF(FTIL,X4,Y4,N)
CALL KSI3(QSI43,RAUT,Y4,D4,FTIL,N)
RETURN
220 IF (PASSO,NE. 1) GO TO 222
WRITE(5,221)
221 FORMAT(//,10X,'TECNICA "CDS" = REDUCAO A ESCALAR',///)
WRITE(5,4)
4 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,
*'ERRO SUBDOMINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
222 CALL CALCG(G4,X4,N)
CALL KSI4(QSI43,D4,Y3,F3,G4,RAUT,H,Y4,N)
RETURN
225 IF(PASSO,NE. 1) GO TO 227
WRITE(5,226)
226 FORMAT(//,10X,'TECNICA "CDS" = TECNICA ESPECIAL USANDO
*CALCULO DA FUNCAO POR METODO INVERSO',///)
WRITE(5,5)
5 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,
*'ERRO SUBDOMINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
227 DO 228 I=1,N
228 FTIL(I)=(1./(6*H))*(26.*Y3(I)-57.*Y2(I)+42.*Y1(I)-11.*Y0(I))-F2(I)
CALL CALCG(G4,X4,N)
CALL KSI(QSI43,G4,FTIL,RAUT,Y4,D4,H)
RETURN
END

```



```

C  CALCULO DOS FATORES CORRECAO PARA PROBLEMAS NAO LINEARES
SUBROUTINE MATLI(IKSI,QSI43,X3,X4,Y4,D4,C4,RAUT,Y2,Y1,Y0,Y3,
*F2,F3,A,U,MMAH,H,NORT,EPS,VZERO,N,PASSO)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
INTEGER PASSO
DIMENSION FTIL(3),Y4(3),D4(3),C4(3),Y3(3),Y2(3),Y1(3),Y0(3),
*F1(3),F2(3),A(3,3),U(3,3),VZERO(3)
GO TO (305,310,315,320)IKSI
305 IF(PASSO.NE. 1) GO TO 308
WRITE(5,306)
306 FORMAT(//,10X,'TECNICA "CDS" = VERSAO MELHORADA DA REDUCAO A
*ESCALAR',//)
WRITE(5,307)
307 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,'ERRO SUBDO-
*MINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
308 CALL REDU(QSI43,Y3,Y4,X3,X4,C4,D4,RAUT,H,N)
RETURN
310 IF(PASSO.NE. 1) GO TO 313
WRITE(5,311)
311 FORMAT(//,10X,'TECNICA "CDS" = TECNICA ESPECIAL USANDO
*CALCULO DA FUNCAO POR MET.INVERSO',//)
WRITE(5,312)
312 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,
*'ERRO SUBDOMINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
313 CALL KSIN5(QSI43,D4,C4,Y4,Y3,Y2,Y1,Y0,X4,RAUT,H,N)
RETURN
315 IF(PASSO.NE. 1) GO TO 318
WRITE(5,316)
316 FORMAT(//,10X,'TECNICA "CDS" = PROJECAO DO GRADIENTE NO ESPACO
*SUBDOMINANTE',//)
WRITE(5,317)
317 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,
*'ERRO SUBDOMINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
318 CALL KSIN3(QSI43,RAUT,X4,D4,C4,Y4,N)
RETURN
320 IF(PASSO.NE. 1) GO TO 323
WRITE(5,321)
321 FORMAT(//,10X,'TECNICA "CDS" = REDUCAO AO ESCALAR',//)
WRITE(5,322)
322 FORMAT(10X,'XN',15X,'YN',25X,'ERRO DOMINANTE',10X,
*'ERRO SUBDOMINANTE',10X,'ERRO ABSOLUTO')
323 CALL KSIN4(QSI43,X3,X4,Y3,Y4,C4,D4,A,U,MMAH,NORT,
*EPS,VZERO,RAUT,H,N)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE METOD(IMET,Y4,Y3,Y2,Y1,Y0,F3,F2,F1,F0,H,N,PASSO)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
INTEGER PASSO
DIMENSION Y4(3),Y3(3),Y2(3),Y1(3),Y0(3),F3(3),F2(3),F1(3),F0(3)
GO TO (105,115)IMET
105 IF(PASSO.NE. 1) GO TO 107
WRITE(5,106)
106 FORMAT(//,10X,'METODO BASICO = METODO DE PROJECAO MINIMA',//)
107 DO 108 I=1,N
108 Y4(I)=(1./25)*(48.*Y3(I)-36.*Y2(I)+16.*Y1(I)-3.*Y0(I)+
1 H*(48.*F3(I)-72.*F2(I)+4H.*F1(I)-12.*F0(I)))
RETURN
115 IF(PASSO.NE. 1) GO TO 117
WRITE(5,116)
116 FORMAT(//,10X,'METODO BASICO = MET. ADAMS BASFORTH ',//)
117 DO 118 I=1,N
118 Y4(I)=Y3(I)+(55.*F3(I)-59.*F2(I)+37.*F1(I)-9.*F0(I))*H/24.
RETURN
END

```

C ..PROGRAMA PRINCIPAL

```

C  AS SUBROTINAS MATI OU MATNL, CACF E VETZ DEVEM SE MODIFICADAS PARA CADA
C  PROBLEMA, POIS DEPENDEM DA EQUACAO DIFERENCIAL A SER RESOLVIDA.
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
INTEGER PASSO
DOUBLE PRECISION MD,MAOSI,LAMBDA(3),MDC
DIMENSION F0(3),F1(3),F2(3),F3(3),Y0(3),Y1(3),Y2(3),Y3(3),Y4(3)
DIMENSION A(3,3),U(3,3),UE(3,3),YE4(3),G4(3),D4(3),AT(3,3)
DIMENSION DIF(3),ERRO(3)
DIMENSION VZERO(3),FTIL(3),YN(3),DE(3),C4(3),Z(3)
TYPE RFSP(1)
CALL ASSIGN(4,'TII')
CALL ASSIGN(2,'DAOS.NOV')
CALL ASSIGN(5,'SY:OUT.DAT')

```

```

      WRITE(4,1)
      FORMAT(' A EQUACAO DIFERENCIAL E' LINEAR? (RESPONDA S PARA
      'SIM E N PARA NAU' )
      READ(4,2)RESP
      FORMAT(A1)
      READ(2,3)N
      FORMAT(I3)
      READ(2,4)MMAX,NORT,EPS,X10,XN
      FORMAT(2I3,3F10,0)
      READ(2,5)(VZERO(I),I=1,N)
      FORMAT(3F10,0)

      DO 120 IKSI=1,4
      DO 110 IMET=1,2
      H=0.1
      X11=X10+H
      X12=X11+H
      X13=X12+H
C.. CALCULO DOS VALORES INICIAIS
      CALL VETZ(Y0,X10)
      CALL VETZ(Y1,X11)
      CALL VETZ(Y2,X12)
      CALL VETZ(Y3,X13)
      WRITE(5,6)H
      FORMAT('1',///,10X, 'COMPRIMENTO DE PASSO H =',F5.3,///)
      KP=(XN-X10)/H-1
      DO 100 PASSO=1,KP
      X0=(PASSO-1)*H+X10
      X1=X0+H
      X2=X1+H
      X3=X2+H
      CALL CALCF(F0,X0,Y0,N)
      CALL CALCF(F1,X1,Y1,N)
      CALL CALCF(F2,X2,Y2,N)
      CALL CALCF(F3,X3,Y3,N)
      CALL METOD(IMET,Y4,Y3,Y2,Y1,Y0,F3,F2,F1,F0,H,N,PASSO)
      X4= X3+H
      IF(RESPI) .EQ. 'N') GO TO 10
      CALL MAT1(A,X4)
      GO TO 20
10    CALL MATNL(A,X4,Y4)
C.. CALCULO DO MAIOR AUTOVALOR, DO AUTOVETOR 'A DIREITA PELO METODO DAS
C.. POTENCIAS
20    CALL AUTVA(LAMB,U,A,X4,MMAX,NORT,EPS,VZERO,N)
      DO 30 I=1,N
      C4(I)=U(I,1)
30    C.. CALCULO DO AUTOVETOR 'A ESQUERDA REFERENTE AO MAIOR AUTOVALOR
      CALL TRANP(A,AT,N)
      CALL AUTVA(LAMB,UE,AT,X4,MMAX,NORT,EPS,VZERO,N)
      DO 40 I=1,N
      DE(I)=UE(I,1)
40    DE(I)=UE(I,1)
C.. ORTOGONALIZACAO DOS AUTOVECTORES 'A DIREITA (C4) E 'A ESQUERDA (D4)
      CALL PRESC(Q,DE,C4,N)
      DO 50 I=1,N
      D4(I)=DE(I)/Q
50    IF(RESPI) .EQ. 'N') GO TO 60
      CALL LINEAR(IKSI,OSI43,X4,Y4,D4,C4,LAMB(I),Y2,Y1,Y0,Y3,F2,
      *F3,H,N,PASSO)
      GO TO 70
60    CALL NAOLI(IKSI,OSI43,X3,X4,Y4,D4,C4,LAMB(I),Y2,Y1,Y0,Y3,F2,
      *F3,A,U,MMAX,H,NORT,EPS,VZERO,N,PASSO)
70    DO 80 I=1,N
80    YE4(I)=Y4(I)+OSI43*U(I,1)
      CALL VETZ(YN,X4)
      IF(((PASSO-1)/2)*2-(PASSO-1))81,82,81
81    GO TO 89
C.. CALCULO DOS ERROS DOMINANTES E SUBDOMINANTES
82    CALL CMDC(MDC,D4,YE4,YN,C4,ES,DIF,N)
      IM=0
      DO 89 J=1,N
      IF(IM-1)83,87,83
83    IM=1
      DO 85 I=1,N
85    ERRO(I)=DABS(DIF(I))
      WRITE(5,86)X4,YE4(J),MDC,ES,ERRO(J)
86    FORMAT(//,9X,F4,2,10X,E14.7,16X,E14.7,10X,E14.7,15X,E14.7)
      GO TO 89
87    WRITE(5,88)YE4(J),ERRO(J)
88    FORMAT(23X,E14.7,69X,E14.7)
89    CONTINUE
      DO 90 I=1,N
      Y0(I)=Y1(I)
      Y1(I)=Y2(I)
      Y2(I)=Y3(I)
90    Y3(I)=YE4(I)
100   CONTINUE
110   CONTINUE
120   CONTINUE
      CALL EXIT
      END

```

Coefficientes dos Métodos de Projeção Mínima.

	K	J	1	2	3	4	5	6	7	8
A(J)	2		0.33333314	-1.33333337	1.00000000					
B(J)			-0.66666669	1.33333337						
A(J)	3		-0.18181819	0.81818181	-1.63636363	1.00000000				
B(J)			0.54545456	-1.63636363	1.63636363					
A(J)	4		0.11999999	-0.63999999	1.43999994	-1.91999984	1.00000000			
B(J)			-0.47999996	1.91999984	-2.87999988	1.91999984				
A(J)	5		-0.08759125	0.54744524	-1.45985401	2.18978095	-2.18978095	1.00000000		
B(J)			0.43795621	-2.18978095	4.37956190	-4.37956190	2.18978095			
A(J)	6		0.06802722	-0.48979598	1.53061235	-2.72108865	3.06122470	-2.44897985	1.00000000	
B(J)			-0.40816331	2.44897985	-6.12244940	8.16326618	-6.12244940	2.44897985		
A(J)	7		-0.05509642	0.44995403	-1.61983454	3.37465525	-4.49954081	4.04958630	-2.69972420	1.00000000
B(J)			0.38567489	-2.69972420	8.09917259	-13.49862099	13.49862099	-8.09917259	2.69972420	

BIBLIOGRAFIA

ALFELD, P., "An improved version of the reduction to scalar CDS method for the numerical solution of separably stiff initial value problems", *math. Comp.*, v.33, 1979/III, pp. 535 - 539.

_____, "A method of skipping the transient phase in the solution of separably stiff ordinary initial value problems", *math. Comp.*, v.35, 1980, pp. 1173 - 1176.

_____, "A special class of explicit linear multistep methods as basic methods for the correction in the dominante space technique", *math. Comp.*, v.33, 1979/II, pp.1195 - 1212.

_____, "Correction in the dominant space: A new technique for the numerical solution of certain stiff initial value problems, Ph.D. Thesis, University of Dundee, 1977.

_____, "Inverse linear methods for the numerical solution of initial value problems of ordinary differential equations", *Math. Comp.*, v.33, 1979/I, pp. 111 - 124.

ALFELD, P. and LAMBERT, J.D., "Correction in the dominante space: A numerical technique for a certain class of stiff initial value problems", *math. Comp.* v.31, 1977, pp. 922 - 938.

CRYER, C.W., "A new class of highly - stable methods: Ao - stable methods", *BIT*, v.13, 1973, pp. 153 - 159.

DAHLQUIST, G.G., "A special stability problem for linear multistep methods", *BIT*, v.3, 1963, pp. 27 - 43.

_____, "Problems related to the numerical treatment of stiff differential systems", ACM.Proc. International Computing Symposium, North-Holland, Amsterdam, 1974.

ENRIGHT, W. E., HULL T.E. and LINDBERG, B., "Comparing numerical methods for stiff systems of o.d.e.s.", BIT, v.15, 1975, pp.10-48.

GEAR, C.W., "Numerical initial value problems in ordinary differential equations", Prentice - Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1971.

HENRICI, P., "Discrete variable methods in ordinary Differential equations", Wiley, New York, 1962.

HULL, T.E.; ENRIGHT, W.H.; FELLEN, B.M. and SEDGWICK, A.E., Comparing numerical methods for ordinary differential equations, SIAM J. Numer. Anal., v.4, 1972, pp. 603 - 637.

LAMBERT, J.D., Computational methods in ordinary differential equations, Wiley, New York, 1973.

_____, "The numerical integration of a special class of stiff differential systems", Proc. Fifth Manitoba, conf. on numerical mathematics, Univ. de Manitoba, Oct. 1975.

_____, "Safe point methods for separably stiff systems of ordinary differential equations", SIAM J. Numer. anal., v.18, 1981, pp. 83 - 101.

ODEON, L., "An experimental and theoretical analysis of the SAPS method for stiff ordinary differential equations". Dept. of Information Processing, Royal Inst. of Tech. Stockholm, Rep. Na 71.28, 1971.

WIDLUND, O.B., "A note on unconditionably stable linear multistep methods", BIT, v. 7, 1967, pp. 65-70.