

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Matemática

Eficiência Probabilística de Algoritmos Numéricos

Luiz Eduardo Ourique

Porto Alegre 1990

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Matemática como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Matemática pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Agradecimento

Agradeço pelo apoio e incentivo a
meu orientador, Prof. Mark Thompson.

Resumo

Seguindo as idéias de S. Smale, nesta dissertação estudamos a eficiência probabilística de algoritmos numéricos para equações diferenciais ordinárias. Especial atenção é dada a dois exemplos clássicos: os algoritmos de Runge-Kutta de dois e de quatro estágios, sendo a sua eficiência estimada em termos de medidas gaussianas. Em ambos os casos, são obtidas estimativas detalhadas que levam a uma expressão para a média do erro global.

Abstract

Following the ideas of S. Smale, we study the probabilistic efficiency of numerical algorithms in ordinary differential equations. Special attention is directed to two classical examples: the algorithms of Runge-Kutta of two and four stages with their efficiency estimated in terms of gaussian measures. In both these cases detailed estimates are given, leading to an expression for the mean global error.

ÍNDICE

Introdução	1
Notação	4
Capítulo 1. Tópicos sobre problemas lineares	
§1. Definições iniciais	5
§2. O conceito de eficiência	10
§3. O Teorema de Smale	13
§4. Quadraturas de Gauss	18
Capítulo 2. O erro em média de alguns algoritmos numéricos para equações diferenciais ordinárias	
§1. Definições iniciais	23
§2. O método de Runge-Kutta	25
§3. O erro no método de Runge-Kutta de 2 estágios	27
Capítulo 3. O algoritmo de Runge-Kutta de 4 estágios	
§1. Estimativa do erro global	35
Apêndice. Medidas em espaços de funções	44
Bibliografia	49

INTRODUÇÃO

O objetivo central deste trabalho é analisar a eficiência probabilística de algoritmos de resolução do problema de integração de funções no espaço de Hilbert $H_0^1[0,1]$, e do método de Runge-Kutta para resolução de Problema de Valores Iniciais para Equações Diferenciais Ordinárias simples de ordem 1.

No capítulo 1, nós mostramos os princípios gerais e os conceitos envolvidos nos algoritmos baseados no princípio de discretização do domínio onde o 'input' está definido, tendo como base o trabalho de Stroud [17] e Traub [18]. Nós enunciamos o Teorema de Smale (ver [13]), que mede a eficiência probabilística dos algoritmos clássicos de integração, em termos de uma medida gaussiana no espaço de funções H_0^1 . No caso geral, nós verificamos que o erro ocorrido, em média, por uma aproximação por 'splines' é minimal para o problema de integração $\int_0^1 f(x) dx$.

Supondo conhecido o valor de f em alguns pontos de $[0,1]$ (o vetor informação de $f = I(f)$), nós provamos que, na aproximação de integrais por quadraturas de ordem de exatidão igual a 1, o erro $e(I(f))$, em média, satisfaz

$$E_{\mu}(e(I(f))) \leq \frac{1}{8} \left[\int_0^1 |K_2(t)|^2 dt \right]^{1/2},$$

onde $K_2(t)$ é a função núcleo de Peano, e μ é uma medida gaussiana (veja [8]) definida em L^2 . De fato, esta estimativa depende da medida gaussiana escolhida. No caso de quadraturas com pesos, existem escolhas naturais (ver [8] e [18] para uma discussão detalhada).

No capítulo 2, nós definimos o Problema de Valores Iniciais-PVI para uma Equação Diferencial Ordinária simples de ordem 1 em $[0,1]$ e analisamos a eficiência do algoritmo de Runge-Kutta de 2 estágios (conhecido como método de Euler modificado). Nós supomos que o 'input' f e suas derivadas parciais de

ordem 1 são controladas por uma função $v \in H_0^1$, obtendo que o erro global de discretização ϵ_n em média é de ordem 1, mais precisamente

$$E_{\mu}(|\epsilon_n|^2) \leq 303h.$$

Nós analisamos no capítulo 3 o algoritmo clássico de Runge-Kutta de 4 estágios. Supondo que o 'input' do PVI e suas derivadas de ordem até 1 são controladas por uma função do tempo em H_0^1 , nós provamos que o erro global de discretização em média é de ordem 2, mais precisamente

$$E_{\mu}(|\epsilon_n|^2) \leq 153h^2.$$

O método pode ser generalizado aos esquemas de Runge-Kutta mais gerais. Em parte, o fator complicador é a forma do erro local (ver Butcher[1] e Stetter[15]). Observemos que na maioria dos livros-texto sobre o assunto, o 'input' por hipótese satisfaz uma condição global de Lipschitz; como a constante de Lipschitz pode ser arbitrariamente grande em alguma região do domínio, perde-se informação com tal restrição. Por isso, em nosso estudo substituímos esta hipótese pela dominação, no tempo, por uma uma função de controle em espaços escolhidos a priori. A constante de Lipschitz é substituída por funcionais locais e a globalização do erro obtida na forma funcional. A nossa hipótese permite simplificar a forma geral da estimativa sobre o erro.

Observemos que nossas hipóteses não são vazias, considerando o seguinte exemplo:

$$y' = \lambda f(t, y) \quad , \quad y(0) = 1 \tag{1}$$

onde $f(t, y) = y \int_0^t \Psi(s) ds$ e Ψ é uma função a ser determinada. A

solução de (1) é:

$$y(t) = \exp \left\{ \lambda \int_0^t \int_0^s \Psi(\sigma) d\sigma ds \right\}. \quad (2)$$

Para cada $v \in H_0^1[0,1]$ queremos demonstrar a existência de λ, Ψ tais que

$$\lambda y \Psi + \lambda y \int_0^t \Psi + \lambda \int_0^t \Psi \leq |v|. \quad (3)$$

A solução da equação de Volterra

$$\Psi + 2\lambda \int_0^t \Psi = \frac{|v|}{2} \quad (4)$$

é dada por $\Psi = \left[1 + 2\lambda \int_0^t \right]^{-1} \left[\frac{|v(\cdot)|}{2} \right]$, para $0 < \lambda < 1/2$.

Observamos que de (4)

$$\begin{aligned} \frac{|v|}{2} = \Psi + 2\lambda \int_0^t \Psi &\geq \lambda \Psi + 2\lambda \int_0^t \Psi \geq \\ &\geq \lambda \Psi + \lambda \int_0^t \Psi + \lambda y^{-1} \int_0^t \Psi. \end{aligned} \quad (5)$$

Utilizando (5), segue-se que:

$$\lambda y \Psi + \lambda y \int_0^t \Psi + \lambda \int_0^t \Psi \leq \frac{|v|}{2} y. \quad (6)$$

Agora, escolhendo λ suficientemente pequeno, podemos assegurar que

$$y = \exp \left[\lambda \int_0^t \int_0^s \left[1 + 2\lambda \int_0^u \right]^{-1} \left[\frac{|v(\cdot)|}{2} \right] \right] \leq 2,$$

uniformemente para $t \in [0,1]$, estabelecendo (3).

Então, demonstramos que para uma classe de funções λf temos a correspondência com as funções $v \in H_0^1$ em termos das quais nossas hipóteses foram formuladas.

NOTAÇÃO

$C[a, b]$ espaço das funções reais definidas e contínuas no intervalo $[a, b]$

$\|u\|_2 = \left[\int_a^b |u(s)|^2 ds \right]^{1/2}$ norma de u no intervalo $I=[a, b]$

$\|u\|_{1,2} = \left[\int_a^b |u'(s)|^2 ds \right]^{1/2}$ norma de u' no intervalo $I=[a, b]$

$L^2[a, b]$ espaço das funções para as quais $\|u\|_2$ é finito.

$H_0^1 = \{f \in C[0, 1] / f(0) = 0, f^{(1)}$ está definida q.s. e $\int_0^1 |f^{(1)}|^2 < \infty\}$

$H_0^2 = \{f \in C[0, 1] / f(0) = f'(0) = 0, f^{(2)}$ está definida q.s. e $\int_0^1 |f^{(2)}| < \infty\}$

$W_2^m = \{f \in C[0, 1] / f^{(m-1)}$ é abs. cont. e $f^{(m)} \in L^2[0, 1]\}$

$S(f) = \int_a^b w(x) f(x) dx$ problema de integração com peso $w(x)$

$I(f) = [f(x_1), \dots, f(x_n)]$ vetor informação de f
 $\varphi(I(f))$ algoritmo com informação $I(f)$
 $e(I(f))$ erro de um algoritmo com informação $I(f)$

$Q^n(f) = A_1 f(x_1) + \dots + A_n f(x_n)$ quadratura com n pontos

$e_m(t) = \int_a^b K_m(t) f^{(m)}(t) dt$ erro de Peano para uma quadratura de uma função no espaço W_2^m .

e_v erro local de discretização

CAPÍTULO 1

Tópicos sobre problemas lineares

§1. Definições Iniciais

Seja X um espaço de Banach. Considere um operador S , linear ou não, definido por

$$\begin{aligned} S : X &\longrightarrow R & (1.1.1) \\ f &\longrightarrow \alpha = S(f) \end{aligned}$$

Seja $\epsilon > 0$; nosso objetivo é descobrir uma ϵ -aproximação $x=x(f)$, $x \in R$, para $\alpha = S(f)$, isto é, que satisfaça para $f \in X$

$$|x - \alpha| < \epsilon, \quad (1.1.2)$$

Nós chamaremos S o operador solução, f o elemento problema e α o elemento solução. É claro que a solução depende de X . De qualquer forma, ao par (S, f) nós nos referimos como o problema S .

Para descobrir a ϵ -aproximação, nós devemos saber algo sobre f . Nós definimos

$$I : T \longrightarrow Y \quad (1.1.3)$$

como o operador informação (não necessariamente linear), onde T, Y são espaços dados, dependendo de S . $I(f)$ é chamado de informação de f , definida em $T \subseteq X$. Podemos ter 'inputs' diferentes que nos dão a mesma informação. Se X é um espaço de funções e $I(f) = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n))$, para certos pontos x_j convenientemente escolhidos, nós podemos ter diferentes funções f_1, f_2 tais que $I(f_1) = I(f_2)$.

Seja $f \in X$. Definimos

$$V(f) = \{ g ; I(g) = I(f) \text{ e } g \in X \} \quad (1.1.4)$$

como a preimagem de $y = I(f)$ em X . Observemos que $V(f) \neq \emptyset$, pois f

$\in V(f) \forall f \in X, V(f) = I^{-1}(y) \cap X$. Ademais, seja

$$U(f) = \{ S(g) ; g \in V(f) \} \quad (1.1.5)$$

o conjunto das soluções $S(g)$ de elementos problema g que tem mesma informação que f , $U(f) = S(I^{-1}(y) \cap X)$.

Observemos que através do conhecimento de $I(f)$, é impossível saber qual elemento α ou β está sendo aproximado, para certo $g \in V(f)$. Isto pode ser visto na figura 1.

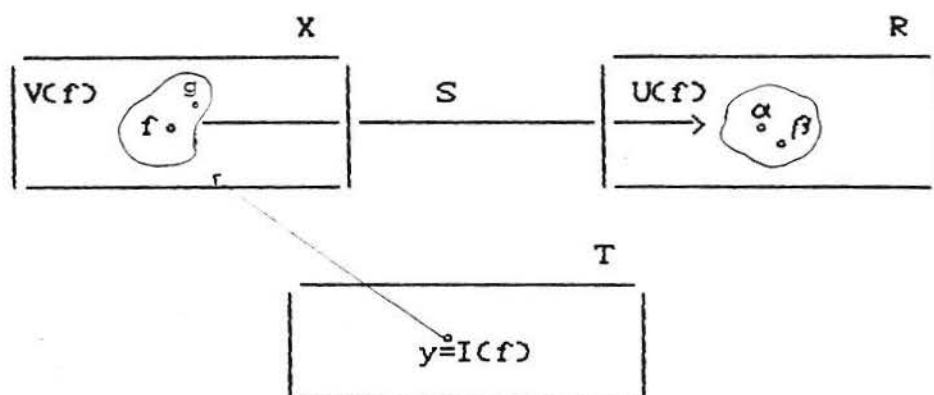


Figura 1.

Um algoritmo é um operador $\phi : T \rightarrow R$. Seja $\Phi(I, S)$ a classe de todos os algoritmos para o problema S . Já que $\phi(I(f)) = \phi(I(g))$, $\forall g \in V(f)$, o que queremos é que ϕ aproxime um elemento do conjunto $U(f)$.

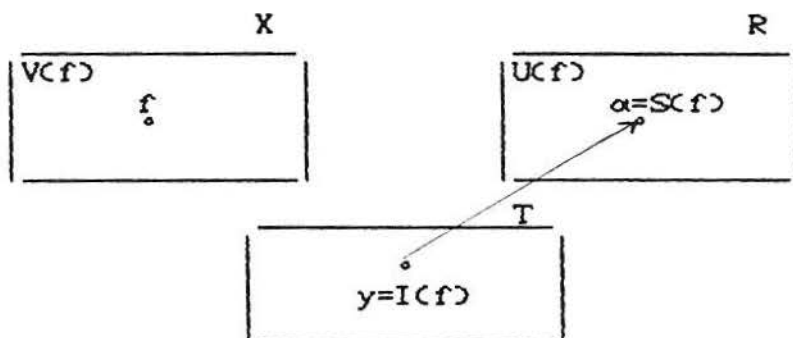


Figura 2.

Para que um algoritmo seja confiável, isto é, nos dê uma resposta com uma margem de erro aceitável, nós devemos definir o erro. (De fato, nós veremos adiante uma discussão feita por Lyness[10] onde ele mostra a necessidade de definirmos claramente conceitos como precisão e economia de um algoritmo).

Nós definimos o erro do algoritmo φ por :

$$e(\varphi) = \sup_{f \in X} | \varphi(I(f)) - S(f) | \quad (1.1.6)$$

Nos problemas que nos interessam, o que queremos é uma estimativa do erro dos algoritmos.

Para um conjunto $A \subseteq R$, o valor

$$\text{diam}(A) = \sup_{a, b \in A} | a - b | \quad (1.1.7)$$

é chamado de diâmetro de A e

$$\text{rad}(A) = \inf_{x \in R} \sup_{a \in A} | x - a | \quad (1.1.8)$$

é chamado de raio de A . De fato, $\text{rad}(A)$ é o raio da menor bola que contém A .

Se existe $c \in R$ tal que

$$\sup_{a \in A} | c - a | = \text{rad}(A) \quad (1.1.9)$$

então c é o centro de A .

Como exemplo, se $A = (-3, -2) \cup (2, 3)$, então $\text{rad}(A) = 3$ e o centro de A é $c = 0$.

A medida do conjunto $U(f)$ pode nos dar uma idéia do intervalo de variação da nossa solução. Para tanto, nós definimos como o diâmetro da informação I o valor $d(I, S)$ dado por

$$d(I, S) = \sup_{f \in X} \text{diam}(U(f)) \quad (1.1.10)$$

O raio da informação I é o valor dado por

$$r(I, S) = \sup_{f \in X} \text{rad}(U(f)) \quad (1.1.11)$$

Vamos definir o problema de integração no qual estamos interessados. Seja $[a, b]$ um intervalo fechado, finito contido em \mathbb{R} , $X = C[a, b]$. Definimos $L^2[a, b] = L^2$ como o espaço das funções f para as quais

$$\|f\|_2 = \left[\int_a^b |f(x)|^2 dx \right]^{1/2} \quad (1.1.12)$$

é finito. Mais geralmente, nós podemos trabalhar com $L^p[a, b] = L^p$.

Para um inteiro r não negativo, seja

$$W_2^r(X) = \{ f ; f^{(r-1)} \text{ é abs. cont. e } f^{(r)} \in L^2 \} \quad (1.1.13)$$

Definimos o problema 1 como o problema de integração :

$$\begin{aligned} S : W_2^r &\longrightarrow \mathbb{R} \\ f &\longrightarrow S(f) = \int_a^b w(x) f(x) dx \end{aligned} \quad (1.1.14)$$

onde $w(x)$ é uma função parâmetro ou peso; o operador informação é

$$I(f) = [f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n)] \quad (1.1.15)$$

onde os n pontos x_j são os nodos do problema, em geral, contidos no interior de $[a, b]$. São conhecidos vários algoritmos baseados na informação da forma (1.1.15), como os clássicos Riemann, Simpson, Trapezoidal, Quadraturas de Gauss e outros.

A questão é: como minimizar o erro numa classe de algoritmos? Adiante, nós veremos a resposta para este problema em alguns casos particulares, considerando-se algoritmos que estão na classe das quadraturas de Gauss.

Consideremos o algoritmo definido por

$$\varphi(I(f)) = h \sum_{k=1}^n f(x_k) \quad (1.1.16)$$

onde f é uma função contínua definida num intervalo $[a,b]$. Definindo $h = (b-a)/n$, esta é a clássica soma de Riemann de f . Sabe-se que por ser f contínua, vale

$$\sup_{f \in X} | \varphi(I(f)) - \int_a^b f(s)ds | \longrightarrow 0, \quad (1.1.17)$$

quando $n \longrightarrow \infty$. No entanto, uma subrotina que implemente este algoritmo num computador pode ser impraticável do ponto de vista económico. Na classe $\mathfrak{E}(I,S)$, o erro ótimo $e(I,S)$ é definido por

$$e(I,S) = \inf_{\varphi \in \mathfrak{E}} e(\varphi) \quad (1.1.18)$$

Um algoritmo ótimo é, portanto, aquele cujo erro é ótimo para uma certa classe. Em geral, o problema de determinar o algoritmo ótimo está em aberto para uma grande variedade de problemas; de fato, veremos no parágrafo a seguir que o conceito de erro ótimo está dentro de um contexto mais amplo do que o dado pela definição (1.1.18).

Esta discussão inicial dá uma visão geral do problema e da evolução dos conceitos envolvidos; de fato, nós faremos um estudo utilizando técnicas buscando estimativas funcionais que nos indiquem a forma geral do erro de discretização de uma classe de algoritmos.

§2. O conceito de eficiência

Definição. Uma *quadratura* para o problema 1 é o método definido por uma fórmula do tipo

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{k=1}^n A_k(f(x_k)) + e(I(f)), \quad (1.2.1)$$

onde os x_k são os nodos de (1.2.1), em geral distintos e todos no interior de $[a,b]$; os A_k são os coeficientes e $e(I(f))$ é o erro ocorrido na quadratura utilizando-se a informação

$$I(f) = [f(x_1), \dots, f(x_n)] = [f(x_j)]_n^1. \quad (1.2.2)$$

O princípio do método consiste na discretização do intervalo em pontos determinados. A determinação destes pontos obviamente procura a melhor colocação no sentido de diminuir o erro. A idéia de eficiência de um algoritmo, no entanto, é mais ampla do que simplesmente minimizar o erro.

Em 1976, Lyness[10] fez uma conferência sobre este e outros assuntos, mostrando que a eficiência de um algoritmo pode ser medida em termos de :

(i) precisão dos dados obtidos : nós fixamos uma certa margem de erro, a priori; admitindo que o nosso algoritmo produz um resultado dentro desta margem, nós podemos dizer que ele é confiável.

(ii) economia : devido ao elevado custo de uma sessão de computação e do esforço dispendido na programação, o algoritmo deve minimizar o tempo gasto tanto numa etapa quanto na outra.

Como exemplo, tome o problema de calcular a integral

$$J(f) = \int_0^1 f(x)dx \quad (1.2.3)$$

por uma sequência de quadraturas do tipo (1.2.1), denotando por $Q^n(f)$ cada termo da sequência quando tomamos n pontos na discretização do intervalo.

Nós sabemos que $\lim_{n \rightarrow \infty} | Q^n(f) - J(f) | = 0$, para toda f integrável, mesmo tendo um número finito de singularidades. Entretanto, com respeito à sequência $Q^n(f)$ podemos apontar os seguintes aspectos :

- 1) se nós desejarmos uma determinada precisão, é difícil determinar qual o termo da sequência que nos dá esta precisão. Em outras palavras, dado $\epsilon > 0$, qual o valor $n = n(\epsilon)$ de pontos que nos garante a precisão dentro desta margem de erro ?
- 2) se f possui singularidades, a convergência pode ser extremamente lenta.

Nos anos 60, quadraturas foram incluídas em livrarias de subrotinas ('Romberg integration', 'Adaptative Simpson routine' e outros) e, em 1975, Davis & Rabinowitz publicam o primeiro livro dedicado exclusivamente à quadratura numérica.

Em 1971, Kahaner mostrou os resultados de uma bateria de testes para comparar o desempenho de várias rotinas em vários problemas. Ele utilizou

$N_p = 21$ diferentes funções,

$N_t = 11$ diferentes rotinas,

$N_\epsilon = 8$ diferentes valores tolerância = ϵ_{quad} ,

totalizando 1848 diferentes experimentos.

Os parâmetros principais em cada experimento eram :

n = número de nodos da fórmula ;

$\epsilon_{real} = | Q(f) - J(f) |$ = precisão real atingida. Se $\epsilon_{real} > \epsilon_{quad}$, a rotina falhou.

O resultado deste teste foi explosivo, segundo Lyness, porque nenhuma rotina provou ser a melhor.

Por exemplo, a fórmula do trapézio de n -pontos é muito melhor que a de Gauss-Legendre para o cálculo da integral

$$\int_0^1 \frac{2}{2 + \sin(\pi x)} dx$$

Antes de enunciarmos o Teorema de Smale, observemos que a discussão feita acima nos mostra que devemos buscar resultados mais precisos nas nossas estimativas. O resultado de Smale ilustra este fato, na medida em que nos dá fórmulas fechadas para uma certa classe de funções, para o grau de exatidão dos algoritmos clássicos de integração.

§3.0 Teorema de Smale

O resultado central desta seção é a medida do erro ocorrido nos algoritmos clássicos de integração de uma função $f \in C[0,1]$:

$$\text{Riemann} \quad R_h(f) = h \sum_{k=1}^n f(kh) \quad (1.3.1)$$

$$\text{Trapézio} \quad T_h(f) = h \left[0.5(f(1)+f(0)) + \sum_{k=1}^{n-1} f(kh) \right] \quad (1.3.2)$$

$$\text{Simpson} \quad S_h(f) = \frac{h}{3} \left[f(1)+f(0) + 2 \sum_{k=1}^n f(kh) + 2 \sum_{k=1}^n f(2k-1)h \right]. \quad (1.3.3)$$

Aqui h é o acréscimo fixo, sendo $h = 1/n$ para os métodos (1.3.1) e (1.3.2) e $h = 1/(2n)$ para (1.3.3). Observemos que $I(f)$ para (1.3.1) e (1.3.2) é o vetor

$$I(f) = [f(x_k)]_n^0, \quad (1.3.4)$$

enquanto para (1.3.3) é o vetor

$$I(f) = [f(x_k)]_{2n}^0. \quad (1.3.5)$$

Para estimar $e(I_h(f))$, sendo $\varphi_h(f) = \varphi_h$ qualquer um dos três algoritmos definidos acima, o método consiste em introduzir uma medida gaussiana no espaço de funções H_0^1 , que é um espaço de Hilbert, e utilizar teoremas gerais sobre representação de funcionais lineares limitados. Isto é motivado pelo fato do erro ser um funcional linear:

$$(i) \quad e(I(f)+I(g)) = e(I(f)) + e(I(g)), \quad \forall f, g \in H_0^1,$$

$$(ii) \quad e(\alpha I(f)) = \alpha e(I(f)), \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}, \quad \forall f \in H_0^1.$$

Nós vamos enunciar o Teorema de Smale, que mede a eficiência probabilística destes algoritmos num espaço munido de uma medida gaussiana (ver [8] e [13]).

Sejam f' , f'' as 1ª e 2ª derivadas de f ; definimos os espaços de Sobolev H^k , $k = 1, 2$ e o produto interno $\langle f, g \rangle_k$ respectivamente por :

$$\left[\begin{array}{l} H^1 = \{ f \in C[0,1] / f' \text{ está definida q.s. e } \int_0^1 |f'|^2 < \infty \} \\ \langle f, g \rangle_1 = f(0)g(0) + \int_0^1 f'(s)g'(s) ds \end{array} \right.$$

$$\left[\begin{array}{l} H^2 = \{ f \in C^1[0,1] / f'' \text{ está definida q.s. e } \int_0^1 |f''|^2 < \infty \} \\ \langle f, g \rangle_2 = f(0)g(0) + f'(0)g'(0) + \int_0^1 f''(s)g''(s) ds \end{array} \right.$$

Consideremos os subespaços

$$H_0^1 = \{ f \in H^1 / f(0) = 0 \}$$

$$H_0^2 = \{ f \in H^2 / f(0) = f'(0) = 0 \}.$$

Seja H_0^1 ; consideremos neste espaço o operador

$$\begin{array}{l} J : H_0^1 \longrightarrow \mathbb{R} \\ f \longrightarrow J(f) = \int_0^1 f(s) ds. \end{array} \quad (1.3.6)$$

Os algoritmos (1.3.1), (1.3.2) e (1.3.3) definem funcionais $R_h, S_h, T_h : H_0^1 \longrightarrow \mathbb{R}$ (1.3.7)

e para um certo h , o erro em calcular $J(f)$ por estes funcionais é dado respectivamente por

$$e_R(I(f)) = J(f) - R_h(f), \quad (1.3.8)$$

$$e_S(I(f)) = J(f) - S_h(f), \quad (1.3.9)$$

$$e_T(I(f)) = J(f) - T_h(f), \quad (1.3.10)$$

onde a notação utilizada mostra claramente a dependência do erro em relação à h e f .

Para $f \in H_0^1$, estas quantidades tendem a zero quando $h \rightarrow 0$, teoricamente. Para estimar em média os funcionais e_R , e_S , e_T , nós precisamos de uma medida no espaço de funções. Este é o resultado de Smale; para tanto, nós vamos definir a *medida de Wiener* em um espaço de Hilbert.

O espaço $C[0,1]$ equipado com a norma do supremo

$$\|f\| = \sup_{t \in [0,1]} |f(t)| \quad (1.3.11)$$

é um espaço de Banach. Seja B o campo de Borel de $C[0,1]$. Um subconjunto C de $C[0,1]$ da forma

$$C = \{ f \in C[0,1] ; (f(t_1), f(t_2), \dots, f(t_n)) \in E \} \quad (1.3.12)$$

onde $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq 1$ e E é um subconjunto de R^n será chamado de cilindro. Definimos em C a integral

$$w(C) = [(2\pi)^n t_1(t_2 - t_1) \dots (t_n - t_{n-1})]^{-1/2} \int_E \exp\left\{-\left[\frac{u^2}{t_1} + \dots + \frac{(u_1 - u_2)^2}{t_2 - t_1} + \dots + \frac{(u_{n-1} - u_n)^2}{t_n - t_{n-1}}\right]/2\right\} du_1 du_2 \dots du_n \quad (1.3.13)$$

que é a medida de Wiener em $C[0,1]$. A integral em $C[0,1]$ com respeito a w é a integral de Wiener; se f é uma função integrável, sua integral será denotada por

$$E_w[f] = \int_{C[0,1]} f(x) w(dx). \quad (1.3.14)$$

De fato, a medida de Wiener é definida em H_0^1 e associada a uma forma bilinear. Nós podemos estender ao campo de Borel de $C[0,1]$, e fazer as estimativas neste espaço. Então, considerando-se os espaços de Sobolev H^1 , H^2 e seus subespaços H_0^1 , H_0^2 , nós temos uma medida gaussiana w ; agora nós vamos enunciar a seguinte proposição :

BIBLIOTECA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA

Proposição. Seja $L : H \rightarrow R$ um funcional linear limitado definido num espaço de Hilbert H . Então a média de L satisfaz

$$E_w |Lx| = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \|L\|, \quad x \in H \quad (1.3.15)$$

Como norma de L , nós podemos definir

$$\|L\| = \sup_{\|x\|=1} |Lx| \quad (1.3.16)$$

isto é, o sup de $|Lx|$ tomado sobre a 'esfera unitária' de H .

Como aplicação da proposição, nós vamos estimar o custo em média dos algoritmos R_h , S_h e T_h nos subespaços H_0^1 e H_0^2 .

O Teorema de Smale.

(i) Em média, para funções de H_0^1 , para obter a mesma precisão, o método do trapézio custa a metade da aproximação de Riemann.

Precisamente :

$$e_R^1(h) = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{h}{\sqrt{3}}, \quad h = 1/n, \quad (1.3.17)$$

$$e_T^1(h) = \frac{1}{2} e_R^1(h), \quad h = 1/n. \quad (1.3.18)$$

(ii) Em média, para funções de H_0^2 , a regra de Simpson é mais barata ou menos custosa que a aproximação de Riemann. De fato,

$$e_R^2(h) = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{h}{\sqrt{6}} \left[1 + 0.5h + h^2/10 \right]^{1/2}, \quad h = 1/n \quad (1.3.19)$$

$$e_S^2(h) = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{h^2}{3\sqrt{15}}, \quad h = 1/2n. \quad (1.3.20)$$

Nós podemos então fazer as seguintes considerações sobre o Teorema de Smale :

1) as hipóteses são verificadas para uma classe grande de funções;

2) nos dá fórmulas fechadas, que permitem a comparação dos resultados obtidos entre si, possibilitando a comparação no caso de ser obtida uma fórmula para o erro em outros métodos. A partir deste resultado, nós conjecturamos que, em média, nós teremos estimativas da mesma forma para o erro ocorrido na resolução numérica de Equações Diferenciais por algoritmos que discretizem o domínio onde está definida solução do problema.

Para uma prova do Teorema, veja [13].

§4. Quadraturas de Gauss

Nesta seção, vamos discutir alguns conceitos importantes sobre quadraturas e vamos mostrar os resultados conhecidos que respondem em parte às questões discutidas na seção anterior.

Definição. Seja $Q^n(f)$ a quadratura de n pontos

$$Q^n(f) = \sum_{k=1}^n A_k (f(x_k)) \quad (1.4.1)$$

uma aproximação para a integral $\int_a^b w(x)f(x) dx$.

A fórmula (1.4.1) tem grau de exatidão d se é exata, isto é, $e(I(f)) = 0$ para todos os polinômios de grau $\leq d$ e não é exata para todos os polinômios de ordem $\geq d + 1$. Nós podemos representar o erro numa forma integral, o que nos permite obter estimativas para uma certa classe de funções.

Se $w(x) > 0$ em $[a, b]$, nós podemos descobrir os coeficientes A_k para uma certa escolha dos nodos x_k tais que a fórmula (1.4.1) seja de grau $2n - 1$. Tais fórmulas são chamadas de n -fórmulas ou n -quadraturas de Gauss.

Definição. Sejam x, t dois números reais e k um inteiro ≥ 0 . Nós definimos :

$$(x - t)_+^k = \begin{cases} (x - t)^k, & \text{se } x \geq t \\ 0, & \text{se } x < t. \end{cases} \quad (1.4.2)$$

Teorema (do núcleo de Peano). Suponhamos que a fórmula (1.4.1) tem grau de exatidão d e todos os pontos x_k estão em $[a, b]$. Seja m um inteiro positivo $1 \leq m - 1 \leq d$. Então existe uma função $K_m(t)$ tal que

$$e(I(f)) = \int_a^b K_m(t) f^{(m)}(t) dt \quad (1.4.3)$$

para qualquer $f \in W_2^m[a, b]$. A função $K_m(t)$ pode ser definida por :

$$K_m(t) = e \left[\frac{(x-t)_+^{m-1}}{(m-1)!} \right] = \int_a^b \frac{(x-t)_+^{m-1}}{(m-1)!} dx - \sum_{k=1}^n A_k \frac{(x-t)_+^{m-1}}{(m-1)!} \quad (1.4.4)$$

chamada de função núcleo de Peano.

Pela desigualdade de Schwarz em (1.4.3), obtemos :

$$|e(I(f))|^2 \leq \int_a^b |K_m(t)|^2 dt \int_a^b |f^{(m)}(t)|^2 dt \quad (1.4.5)$$

No espaço L^2 , nós obtemos de (1.4.5) :

$$|e(I(f))| \leq \left[\int_a^b |K_m(t)|^2 dt \right]^{1/2} \|f^{(m)}\|. \quad (1.4.6)$$

Logo, para minimizar $|e(I(f))|$, nós devemos minimizar $\|K_m(t)\|_2$. A solução para este problema é dada pela aproximação por 'splines'.

Definição. Sejam dados x_j , $j=1, \dots, n$, $n \geq 2$ pontos distintos sobre o eixo real. Nós dizemos que a função $G(x)$ é uma 'spline' cúbica natural com nodos x_j se :

- 1) $G(x)$ é linear nos intervalos $(-\infty, x_1]$ e $[x_n, +\infty)$;
- 2) em cada um dos intervalos

$$[x_1, x_2], [x_2, x_3], \dots, [x_{n-1}, x_n],$$

$G(x)$ é um polinômio cúbico (em geral, um polinômio diferente em cada intervalo);

- 3) $G(x)$, $G'(x)$ e $G''(x)$ são contínuas $\forall x$, $-\infty < x < \infty$.

A idéia é utilizar a interpolação por 'splines' para obter uma aproximação para a integral de f . Seja a aproximação

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b G(x) dx + e(I_G(f)) \quad (1.4.7)$$

onde $G(x)$ é a 'spline' cúbica natural com nodos x_1, x_2, \dots, x_n que interpola $f(x)$ nestes nodos. Então a fórmula (1.4.6) é uma quadratura de ordem ≤ 1 , isto é, $e(I_G(f)) = 0$ se f é polinomial de

ordem ≤ 1 e existem constantes A_1, A_2, \dots, A_n , tais que

$$\int_a^b G(x) dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + \dots + A_n f(x_n) \quad (1.4.8)$$

Nós enunciamos o seguinte resultado importante para o erro nas quadraturas :

Teorema 1.4.1. Entre todas as quadraturas do tipo (1.4.1) com ordem de exatidão igual a 1, nós temos que a aproximação dada por 'splines' é a de maior precisão, isto é, a integral

$$\int_a^b |K_2(t)|^2 dt \quad \text{é mínima.}$$

Para uma prova ver Stroud [17], além de outros resultados, ilustrados com exemplos. Em Traub [18], nós encontramos uma discussão mais detalhada.

Teorema 1.4.2. Em média, o erro ocorrido na aproximação da integral $\int_a^b f(x) dx$ por uma quadratura do tipo (1.4.1) de primeira ordem satisfaz em H_0^1

$$E_{\mu} [e(I(f))]^2 \leq \left[\frac{1}{6} \right] \int_a^b |K_2(t)|^2 dt \quad (1.4.9)$$

Prova. Consideremos a inclusão injetiva $i: f^{(2)} \longrightarrow f^{(1)}$ de H_0^2 em H_0^1 . Pelo Teorema de Peano, para ordem = 1, o erro pode ser dado por

$$e(I(f)) = \int_a^b K_2(t) f^{(2)}(t) dt$$

Pela desigualdade de Schwarz, obtemos :

$$e(I(f))^2 \leq \left[\int_a^b |K_2(t)|^2 dt \right] \|f\|_{2,2}^2$$

onde $\|f\|_{2,2} = \left(\int_a^b |f^{(2)}(s)|^2 ds \right)^{1/2}$.

Tomando a esperança, obtemos :

$$E_{\mu}(e(I(f)))^2 \leq \left(\int_a^b |K_2(t)|^2 dt \right) E_{\mu} \|f\|_{2,2}^2 .$$

Pelo exercício 20 de [7], temos :

$$E_{\mu} \|f\|_{2,2}^2 \leq \text{traço } S_{\mu} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2 \pi^2} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2 \pi^2} = \frac{1}{6} \quad (1.4.10)$$

onde S_{μ} é a covariância associada com o 'operador de Dirichlet' discutido no apêndice deste trabalho. De (1.4.10), segue o resultado desejado. Logo, para minimizar o erro, em média, devemos minimizar

$$e_2(I(f)) = \int_a^b |K_2(t)|^2 dt \quad , \quad (1.4.11)$$

denominada constante do erro de Peano. Em particular, nós encontramos em [17] uma tabela com valores de $e_m, m \geq 2$ para fórmulas de Gauss-Legendre e quadraturas de Romberg, além de outros algoritmos, para o intervalo $[-1,1]$.

Em geral, a minimização do erro de Peano dado por (1.4.11) nos leva a uma expressão quadrática nos coeficientes A_j . Em fórmulas clássicas, onde conhecemos de antemão tais coeficientes, nós podemos utilizar resultados como o lema 46 de [11], para minimizar tal expressão.

Em [18], nós encontramos uma discussão mais geral para o problema de integração

$$S(f) = \int_{-1}^1 w(x) f(x) dx \quad (1.4.12)$$

onde $w(x)$ é uma função parâmetro, não necessariamente constante e

f satisfaz uma certa ordem de regularidade, em geral, expressa na forma : para algum $r \geq 1$,

$$\|f^{(r)}\|_p = \left(\int_{-1}^1 |f^{(r)}(\sigma)|^p d\sigma \right)^{1/p} \quad (1.4.13)$$

é finito para $p \in [1, +\infty]$.

Em função do número de nodos, a ordem de regularidade de f e a função parâmetro, nós podemos determinar o grau de exatidão de quadraturas de Gauss-Legendre, Gauss-Chebyshev, e outras.

Para operadores de maior ordem e a covariância veja [4], exemplos 3.3 , 3.4 .

CAPITULO 2

O erro em média de alguns algoritmos numéricos
para Equações Diferenciais Ordinárias

§1. Definições iniciais

Definição. Um PVI - Problema de Valores Iniciais - para uma equação diferencial simples de ordem 1 é o problema definido por :

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) , & 0 \leq t \leq T . \\ y(0) = c . \end{cases} \quad (2.1.1)$$

Nós vamos supor que existe uma solução $z: t \rightarrow z(t)$ do PVI. Estamos interessados em algoritmos baseados no princípio de discretização. Particionando o intervalo $[0, T]$ em subintervalos de comprimento constante igual a $h = T/n$, $n \in \mathbb{N}$, obtemos uma grade com nodos

$$t_0 = 0, \quad t_1 = h, \quad , t_v = vh, \quad , t_n = nh = T, \quad (2.1.2)$$

onde $t_v - t_{v-1} = h . \quad (2.1.3)$

Nós vamos assumir que o acréscimo h é constante, embora em alguns casos seja recomendável trocar o valor de h em alguns passos do método, no sentido de melhor eficiência.

Nosso algoritmo vai produzir uma sequência de aproximações sobre os pontos da grade:

$$\begin{cases} y_0 = z(0) = c \\ y_1 \cong z(h) \\ \vdots \\ y_n \cong z(T) . \end{cases} \quad (2.1.4)$$

Definição. Um método numérico para um PVI é dito de ordem m se é satisfeita a desigualdade

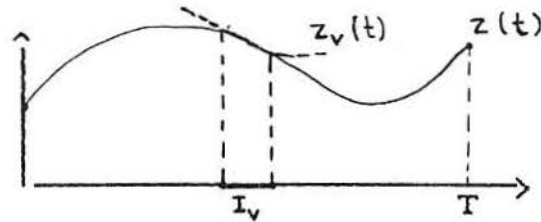
$$| z(T) - y_n | \leq C h^m , \quad (2.1.5)$$

para h suficientemente pequeno, $C \equiv C(f; [0, T])$ é uma constante que depende do intervalo e do 'input' f . Intuitivamente, é claro que para uma função "bem comportada" nós podemos calcular o valor de C ou termos uma boa estimativa sobre C . De fato, em [1] e [7] são feitas estimativas de C para o método de Euler, que embora muito pouco utilizado hoje em dia, nos dá uma idéia de que tipo de resultado nós podemos obter em outros métodos.

Para estudar o erro de um método, nós somos levados a considerar a solução local nos subintervalos $I_v = (t_{v-1}, t_v)$. De fato, é impossível "controlar" a solução em intervalos muito grandes. Neste ponto, nós devemos fazer considerações sobre estabilidade e convergência.

Nós vamos denotar por $z_v(t)$ a solução local do PVI em $I_v = (t_{v-1}, t_v)$, isto é, a função que satisfaz

$$z_v(t) = z(t) \quad \text{em} \quad I_v. \quad (2.1.6)$$



Nós vamos trabalhar no espaço de Hilbert :

$$H_0^1 = \{ f: [0,1] \rightarrow \mathbb{R} / f(0)=0 \text{ \& } f' \in L^2[0,1] \} \quad (2.1.7)$$

Neste espaço, nós introduzimos a medida de Wiener e podemos estimar o erro ocorrido em alguns métodos de resolução de EDO's. Nós enfatizamos que a estimativa obtida para o erro global depende da medida no espaço de funções, e que nossa técnica pode ser claramente estendida a classes mais gerais de problemas.

§2. O método de Runge-Kutta

Uma particular classe de métodos de resolução de EDO's simples são os chamados 'métodos de passo para trás', no sentido que, para calcular o valor da solução num ponto t_v da grade, nós levamos em conta o valor da solução nos pontos t_{v-1} , t_{v-2} , ..., t_{v-k} , para um certo k .

Em particular, nós estamos interessados em métodos de um passo para trás, isto é, em métodos que nos dão o valor de $y_v \equiv y(t_v)$ a partir do valor de $y_{v-1} \equiv y(t_{v-1})$. Nós vamos inicialmente definir o método de Runge-Kutta de s -estágios como visto em Stroud [17], e estudar alguns casos particulares.

Definição. O método de Runge-Kutta com s estágios (cada g é um estágio) é dado por :

$$\left\{ \begin{array}{l} y_0 = y(0) = c \\ y_v = y_{v-1} + h [A_1 g_1 + A_2 g_2 + \dots + A_s g_s] \\ g_1 = f(t_{v-1}, y_{v-1}) \\ g_2 = f(t_{v-1} + \alpha_2 h, y_{v-1} + \beta_{21} h g_1) \\ \dots \dots \dots \\ g_s = f(t_{v-1} + \alpha_s h, y_{v-1} + \beta_{s1} g_1 + \dots + \beta_{s,s-1} h g_{s-1}) \\ v = 1, 2, 3, \dots \end{array} \right. \quad (2.2.1)$$

Para ordem ≤ 4 , nós temos métodos de ordem k com k estágios. Para $k > 4$, os métodos precisam de mais de 4 estágios. Resultados mais gerais que relacionam a ordem com o número de estágios do método de Runge-Kutta podem ser vistos em Butcher [1].

Em particular, para $s = 2$, o método geral é :

$$\left\{ \begin{array}{l} y_0 = y(0) = c \\ y_v = y_{v-1} + h [A_1 g_1 + A_2 g_2] \\ g_1 = f(t_{v-1}, y_{v-1}) \\ g_2 = f(t_{v-1} + \alpha h, y_{v-1} + h \beta g_1) \end{array} \right. \quad (2.2.2)$$

Aqui α , β , A_1 , A_2 são parâmetros que devem satisfazer três equações :

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 1 \\ A_2 \alpha = 1/2 \\ \alpha = \beta. \end{cases} \quad (2.2.3)$$

Uma solução particular destas equações é :

$A_1 = 0, A_2 = 1, \alpha = \beta = 1/2$, que nos dá o método de RK de 2-estágios que vamos estudar a seguir. Nossa técnica consiste em analisar a forma do erro local, supondo certas condições sobre o 'input' do problema e estimar o erro global, em termos de uma medida num espaço escolhido a priori.

§3. O erro no método de Runge-Kutta de 2-estágios

Consideremos o PVI-1 definido por

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) , t \in [0,1] \\ y_0 = c. \end{cases} \quad (2.3.1)$$

Suponhamos que o PVI-1 tenha uma solução, denotada por $z: t \rightarrow z(t)$. Definimos o funcional

$$\psi(t) = \sup_{0 \leq s \leq t} || z(s) || . \quad (2.3.2)$$

Nós vamos supor que f satisfaz as Hipóteses Iniciais (HI-1) :

$$\sup_{|y| \leq \psi(t)} \left| \frac{\partial^k f}{\partial y^k} \right| \leq |v(t)| \quad k=0,1 \quad (2.3.3)$$

onde $k=0$ denota $f(t, y(t))$, e

$$\left| \frac{\partial f}{\partial t} \right| \leq |v(t)| \quad (2.3.4)$$

para alguma função $v(t) \in H^1_0$. Nós supomos $T=1$ sem perda de generalidade, já que não podemos controlar a solução em intervalos arbitrariamente grandes.

Definição. O método de RK de 2-estágios ou método de Euler modificado é dado por :

$$\begin{cases} y_v = y_{v-1} + hf(t_{v-1} + 0.5h; y_{v-1} + 0.5hf(t_{v-1}, y_{v-1})) \\ y_0 = c . \end{cases} \quad (2.3.5)$$

As igualdades (2.3.5) definem explicitamente a sequência de aproximações y_v (veja (2.1.4)). Definimos o erro local de discretização por

$$\epsilon_v = z_v - y_v \quad (2.3.6)$$

onde $z_k = z(t_k)$, $y_k = y(t_k)$. Queremos estimar $\epsilon_n = z(1) - y_n$, bus-

cando comparar o erro global com alguma potência de h .

Seja $I_v = [t_{v-1}, t_v]$ segue da definição de $z(t)$:

$$z_v = z_{v-1} + \int_{I_v} f(t, z(t)) dt .$$

Podemos escrever :

$$\varepsilon_v = \varepsilon_{v-1} + \int_{I_v} [f(t, z(t)) - f(t_{v-1} + 0.5h, y_{v-1} + 0.5hf(t_{v-1}, y_{v-1}))] dt .$$

Denotando $t_{v-1} + 0.5h$ por $t_{v-1/2}$, podemos escrever :

$$\begin{aligned} f(t, z(t)) - f(t_{v-1/2}, y_{v-1} + 0.5hf(t_{v-1}, y_{v-1})) &= \\ &= (f(t, z(t)) - f(t, z_{v-1})) + (f(t, z_{v-1}) - f(t_{v-1/2}, z_{v-1})) + \\ &+ (f(t_{v-1/2}, z_{v-1}) - f(t_{v-1/2}, z_{v-1} + 0.5h)) + \\ &+ (f(t_{v-1/2}, z_{v-1} + 0.5h) - f(t_{v-1/2}, y_{v-1} + 0.5hf(t_{v-1}, y_{v-1}))) = \sum_{k=1}^4 \Delta_k \end{aligned}$$

onde :

$$\Delta_1 = \int_0^1 \frac{\partial f}{\partial y}(t, z_{v-1} + q(z(t) - z_{v-1}))(z(t) - z_{v-1}) dq$$

$$\Delta_2 = \int_0^1 \frac{\partial f}{\partial t}(t_{v-1/2} + q(t - t_{v-1/2}), z_{v-1})(t - t_{v-1/2}) dq$$

$$\Delta_3 = \int_0^1 \frac{\partial f}{\partial y}(t_{v-1/2}, z_{v-1} + q(0.5h))(0.5h) dq$$

$$\Delta_4 = \int_0^1 \frac{\partial f}{\partial y}(t_{v-1/2}, y_{v-1} + \sigma + q(z_{v-1} - y_{v-1} + 0.5h(1-\sigma)))(\varepsilon_{v-1} + (0.5h - \sigma)) dq$$

Agora, nós vamos estimar os Δ_j , $j=1, \dots, 4$, utilizando as hipóteses iniciais sobre f e suas derivadas, e outros resultados do Cálculo Diferencial, como a desigualdade de Schwarz. Nós vamos fazer algumas estimativas intermediárias locais, isto é, para $t \in I_v = [t_{v-1}, t_v]$.

Estimativas Intermediárias

$$1) |z(t) - z_{v-1}| \leq h^{1/2} \|v\|_{1,2,v}$$

Prova : $z(t)$ é solução do PVI-1 , logo podemos escrever :

$$|z(t) - z_{v-1}| = \left| \int_{t_{v-1}}^t f(\theta, z(\theta)) d\theta \right| \leq \int_{t_{v-1}}^t |v(\theta)| d\theta \leq h^{1/2} \|v\|_{1,2,v}$$

já que $\int_{t_{v-1}}^t |v(\theta)| d\theta \leq (t - t_{v-1})^{1/2} \|v\|_{2,v} \leq h^{1/2} \|v\|_{1,2,v}$,

pois $|t - t_{v-1}| \leq h$ em I_v e $\|v\|_{2,v} \leq \|v\|_{1,2,v}$.

$$2) |z_{v-1} - z_{v-1/2}| \leq (0.5h)^{1/2} \|v\|_{1,2,v}$$

Prova: decorre de $t_{v-1/2} - t_{v-1} = 0.5h$ e 1).

$$3) |z_{v-1/2} - y_{v-1}| \leq \epsilon_{v-1} + (0.5h)^{1/2} \|v\|_{1,2,v}$$

Prova : escrevemos $|z_{v-1/2} - y_{v-1}| = |z_{v-1/2} - z_{v-1} + z_{v-1} - y_{v-1}|$

e da definição do erro local e de 2), obtemos 3).

A seguinte integral nos será útil :

$$\int_{t_{v-1}}^{t_v} |t - t_{v-1/2}| = 0.25h^2.$$

De fato, integrando para $t_{v-1/2} \leq t \leq t_{v-1}$, escrevemos a integral acima como :

$$\int_{I_v} |t - t_{v-1/2}| = 2 \int_{t_{v-1/2}}^{t_v} (t - t_{v-1/2}) = (t - t_{v-1/2})^2 \Big|_{t_{v-1/2}}^{t_v} = 0.25h^2.$$

Antes de seguir, vamos enunciar uma estimativa que nos será bastante útil na forma de um lema :

Lema 1. Para $t_\mu \in I_\nu = [t_{\nu-1}, t_\nu]$, temos :

$$|hv(t_\mu)| \leq (h^{1/2} + 1.4h^{3/2}) \|v\|_{1,2,\nu} \quad (2.3.7)$$

Prova: $hv(t_\mu) = hv(t_\nu) + h[v(t_\mu) - v(t_\nu)]$, donde

$$|hv(t_\mu)| \leq |hv(t_\nu)| + |h[v(t_\mu) - v(t_\nu)]|$$

$$|hv(t_\mu)| \leq \left| \int_{I_\nu} v(s) ds \right| + \left| \int_{I_\nu} [v(t_\mu) - v(s)] ds \right|$$

Estimamos a primeira integral pela desigualdade de Schwarz :

$$\left| \int_{I_\nu} v(s) ds \right| \leq h^{1/2} \|v\|_{2,\nu} \leq h^{1/2} \|v\|_{1,2,\nu} ;$$

Para estimar a segunda integral, escrevemos :

$$v(t_\mu) - v(s) = \int_0^1 \frac{\partial v}{\partial t}(t_\mu + q(s-t_\mu))(s-t_\mu) dq$$

Pela substituição $\sigma = t_\mu + q(s-t_\mu)$, temos :

$$\left| \int_{I_\nu} [v(t_\mu) - v(s)] ds \right| = \left| \int_{I_\nu} \left[\int_{t_\mu}^s \frac{\partial v}{\partial t}(\sigma) d\sigma \right] ds \right| \leq$$

$$\leq \|v\|_{1,2,\nu} \int_{I_\nu} |\sigma - t_\mu|^{1/2} d\sigma$$

$$\leq 2 \|v\|_{1,2,\nu} \int_{t_\mu}^{t_\nu} (\sigma - t_\mu)^{1/2} d\sigma \leq$$

$$\leq 2 \|v\|_{1,2,\nu} \frac{2}{3} (t_\nu - t_\mu)^{3/2} \leq \frac{4}{3} h^{3/2} \|v\|_{1,2,\nu}$$

Estas desigualdades provam o lema 1. Logo, estimativas

envolvendo produtos na forma $h\nu(t_\mu)$, para $t_\mu \in I_\nu$ são equivalentes, e nos possibilitam estimar com maior generalidade os Δ_j .

Nós estimamos Δ_j , $j=1,2,3,4$, obtendo :

$$|\Delta_1| \leq |z(t) - z_{\nu-1}| \nu(t) \leq \nu(t) h^{1/2} \| \nu \|_{1,2,\nu}$$

$$|\Delta_2| \leq |t - t_{\nu-1/2}| \nu(t_\mu)$$

$$|\Delta_3| \leq 0.5 h \nu(t_\mu)$$

$$|\Delta_4| \leq \epsilon_{\nu-1} \nu(t_\mu) + 0.5 h \nu(t_\mu) + 0.5 h \nu^2(t_\mu)$$

Observemos pela definição do erro local que nós podemos escrever :

$$\epsilon_\nu \leq \epsilon_{\nu-1} + \sum_{j=1}^4 \int |\Delta_j| dt \quad (2.3.8)$$

sendo cada integral calculada no subintervalo $I_\nu = [t_{\nu-1}, t_\nu]$.

Pelas estimativas intermediárias e pelo lema 1, obtemos:

$$\int |\Delta_1| \leq \nu(t) h^{1/2} \| \nu \|_{1,2,\nu}^2 \quad (2.3.9)$$

$$\int |\Delta_2| \leq 0.25 h^2 \nu(t_\mu) \leq (0.25 h^{3/2} + 0.35 h^{5/2}) \| \nu \|_{1,2,\nu} \quad (2.3.10)$$

$$\int |\Delta_3| \leq 0.5 h^2 \nu(t_\mu) \leq (0.5 h^{3/2} + 0.7 h^{5/2}) \| \nu \|_{1,2,\nu} \quad (2.3.11)$$

$$\begin{aligned} \int |\Delta_4| &\leq \epsilon_{\nu-1} h \nu(t_\mu) + 0.5 h^2 \nu(t_\mu) + 0.5 h^2 \nu^2(t_\mu) \\ &\leq \epsilon_{\nu-1} (h^{1/2} + 1.4 h^{3/2}) \| \nu \|_{1,2,\nu} + P_1(h, \nu) \end{aligned} \quad (2.3.12)$$

$$P_1(h, \nu) = (0.5 h^{3/2} + 0.7 h^{5/2}) \| \nu \|_{1,2,\nu} + (0.5 h + 1.4 h^2 + h^3) \| \nu \|_{1,2,\nu}^2$$

Substituindo estas estimativas em (2.3.8), obtemos :

$$|\epsilon_v| \leq (1 + A_v) |\epsilon_{v-1}| + B_v, \quad v=1,2,\dots,n,$$

onde $A_v = (h^{1/2} + 1.4h^{3/2}) \|v\|_{1,2,v}$

e $B_v = (1.25h^{3/2} + 1.75h^{5/2}) \|v\|_{1,2,v} + (1.5h + 1.4h^2 + h^3) \|v\|_{1,2,v}^2$.

Por indução e notando que $1+x \leq e^x$, obtemos :

$$|\epsilon_n| \leq \left[|\epsilon_1| + \sum_{v=1}^n B_v \right] \exp \left[\sum_{v=1}^n A_v \right]. \quad (2.3.13)$$

Por definição, temos :

$$\begin{aligned} |\epsilon_1| = |z_1 - y_1| &= \left| \int_0^h f(t, z(t)) dt - hf(0.5h, y_0 + 0.5hy'_0) \right| \leq \\ &\leq \int_0^h |f(t, z(t))| + hv(t_\mu) \leq \int_0^h |v(t)| dt + hv(t_\mu) \leq \\ &\leq h^{1/2} \|v\|_{1,2,1} + (h^{1/2} + 1.4h^{3/2}) \|v\|_{1,2,1} \\ &\leq h^{1/2} \|v\|_{1,2} + (h^{1/2} + 1.4h^{3/2}) \|v\|_{1,2}. \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

Pela desigualdade de Schwarz,

$$\sum_{v=1}^n \|v\|_{1,2,v} \leq n^{1/2} \|v\|_{1,2}. \quad (2.3.15)$$

De $nh = 1$, segue-se que :

$$\sum_{v=1}^n A_v \leq (1 + 1.4h) \|v\|_{1,2} \quad (2.3.16)$$

$$\sum_{v=1}^n B_v \leq (1.25h + 1.75h^2) \|v\|_{1,2} + (1.5h + 1.4h^2 + h^3) \|v\|_{1,2}^2. \quad (2.3.17)$$

Definindo os funcionais $\bar{\Phi}$ e Ψ :

$$\Psi = \Psi(h, v) = (1 + 1.4h) \|v\|_{1,2} \quad (2.3.18)$$

$$\bar{\Phi} = \bar{\Phi}(h, v) = P(h) \|v\|_{1,2} + Q(h) \|v\|_{1,2}^2 \quad (2.3.19)$$

$$\text{onde } P(h) = (2 + 1.25h^{1/2} + 1.4h + 1.75h^{3/2}) \quad (2.3.20)$$

$$\text{e } Q(h) = (1.5h^{1/2} + 1.4h^{3/2} + h^{5/2}) \quad (2.3.21)$$

$$\text{podemos escrever } |e_n| \leq h^{1/2} \bar{\Phi} \exp \Psi \quad (2.3.22)$$

Tomando o quadrado e lembrando que $x^2 \leq 2\exp(x)$, obtemos :

$$|e_n|^2 \leq 2h \exp(\bar{\Phi} + 2\Psi). \text{ Calculando a soma } \bar{\Phi} + 2\Psi, \text{ obtemos:}$$

$$|e_n|^2 \leq 2h \exp \left[(4 + P_2(h)) \|v\|_{1,2} + P_8(h) \|v\|_{1,2}^2 \right] \quad (2.3.23)$$

$$\text{onde } P_2(h) = 1.25h^{1/2} + 4.2h + 1.75h^{3/2} \quad (2.3.24)$$

$$\text{e } P_8(h) = 1.5h^{1/2} + 1.4h^{3/2} + h^{5/2} \quad (2.3.25)$$

Escolhendo uma partição com mais de 20 pontos, teremos $h < 0.05$; segue-se que $P_2(h) \leq 0.5$ e $P_8(h) \leq 1$, logo :

$$|e_n|^2 \leq 2h \exp \left[4.5 \|v\|_{1,2} + \|v\|_{1,2}^2 \right]; \text{ tomando a esperança, obtemos:}$$

$$\begin{aligned} E_{\mu}(|e_n|^2) &\leq 2h E_{\mu} \left[\exp \left(4.5 \|v\|_{1,2} + \|v\|_{1,2}^2 \right) \right] \leq \\ &\leq 2h \left[E_{\mu} \left(\exp 4.5 \|v\|_{1,2} \right)^2 \right]^{1/2} \left[E_{\mu} \left(\exp \|v\|_{1,2}^2 \right)^2 \right]^{1/2} ; \end{aligned}$$

$$E_{\mu}(|e_n|^2) \leq 2h \left[E_{\mu}(\exp 9 \|v\|_{1,2}) \right]^{1/2} \left[E_{\mu}(\exp 2 \|v\|_{1,2}^2) \right]^{1/2} .$$

Pelo lemas 2 e 3 do apêndice, obtemos :

$$\left[E_{\mu}(\exp \theta \|v\|_{1,2}) \right]^{1/2} \leq \exp(81/24) \leq 29.23. \quad (2.3.26)$$

$$E_{\mu}(\exp 2 \|v\|_{1,2}^2) = \left[\prod_{n=1}^{\infty} (1 - 4\beta_n) \right]^{-1/2}. \quad (2.3.27)$$

Seja $\gamma_n = \frac{4}{n^2}$; então $(1 - 4\beta_n)^{-1} \leq 1 + 4n^{-2}$, donde

$$\left[\prod_{n=1}^{\infty} (1 - 4\beta_n)^{-1} \right]^{1/4} \leq \left[\prod_{n=1}^{\infty} (1 + \gamma_n) \right]^{1/4} \leq \exp \left[0.25 \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n \right] = \exp(\pi^2/6),$$

pois $\sum_{n=1}^{\infty} n^{-2} = \pi^2/6$. De (2.3.27), segue-se que :

$$\left[E_{\mu}(\exp 2 \|v\|_{1,2}^2) \right]^{1/2} \leq \exp(\pi^2/6) \cong 5.19 \quad (2.3.28)$$

Vamos resumir nossos resultados na seguinte :

Proposição. Consideremos o PVI-1, onde f satisfaz as hipóteses iniciais HI-1. Se a partição do intervalo tiver mais de 20 pontos, então o erro global de discretização do método de Runge-Kutta de 2 estágios satisfaz, em média, a estimativa :

$$E_{\mu}(|\epsilon_n|)^2 \leq 303h. \quad (2.3.29)$$

CAPÍTULO 3

O Algoritmo de Runge-Kutta de 4 estágios

§1. Estimativa do erro global

Vamos considerar nesta seção um método clássico bastante utilizado, o algoritmo de Runge-Kutta de 4 estágios, buscando uma expressão para o erro global no caso geral. Nós podemos encontrar em [1], [11] e [15] uma discussão mais detalhada do erro de discretização, dada em formalismo mais complexo e com resultados mais gerais.

Consideremos o PVI-2 definido por

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) & , \quad t \in [0, 1] \\ y(0) = z_0. \end{cases} \quad (3.1.1)$$

Suponhamos que exista uma solução $z : t \rightarrow z(t)$. Definimos o funcional

$$F = F(t) = \sup_{0 \leq s \leq t} |z(s)| \quad (3.1.2)$$

com as Hipóteses Iniciais HI-2 sobre f :

$$|f(t, z(t))| \leq |v(t)| \quad (3.1.3)$$

$$\sup_{|y| \leq F} \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \leq |v(t)| \quad (3.1.4)$$

$$\sup_{|y| \leq F} \left| \frac{\partial f}{\partial t} \right| \leq |v(t)| \quad (3.1.5)$$

para alguma função de controle $v \in H_0^1[0, 1]$.

Como no exemplo anterior, nós discretizamos o intervalo $[0, 1]$ nos $n+1$ pontos $t_0 = 0, t_1 = h, \dots, t_v = vh, \dots, t_n = 1$, tal que

$$t_v - t_{v-1} = h = 1/n. \quad (3.1.6)$$

O clássico método de Runge-Kutta de 4 estágios é defi-

nido por

$$\left[\begin{array}{l}
 y(0) = z_0 \\
 y_v = y_{v-1} + h \left(\frac{1}{6} g_1^v + \frac{2}{6} g_2^v + \frac{2}{6} g_3^v + \frac{1}{6} g_4^v \right) \\
 g_1^v = f(t_{v-1}, y_{v-1}) \\
 g_2^v = f(t_{v-1} + 0.5h; y_{v-1} + 0.5hg_1^v) \\
 g_3^v = f(t_{v-1} + 0.5h; y_{v-1} + 0.5hg_2^v) \\
 g_4^v = f(t_{v-1} + h; y_{v-1} + hg_3^v) \\
 v = 1, 2, 3, \dots
 \end{array} \right. \quad (3.1.8)$$

Qualquer referência futura a uma das equações acima será dada por (3.1.8). Por conveniência, nós podemos escrever:

$$\begin{aligned}
 t_{v-1} + 0.5h &= t_{v-1/2} & g_2^v &= f(t_{v-1/2}; y_{v-1} + 0.5hg_1^v) \\
 g_3^v &= f(t_{v-1/2}; y_{v-1} + 0.5hg_2^v), & g_4^v &= f(t_v; y_{v-1} + hg_3^v) \\
 y_v &= y_{v-1} + h \sum_{k=1}^4 a_k g_k^v & a_1 = a_4 &= 1/6, \quad a_2 = a_3 = 2/6. \\
 f_{v-1} &= f(t_{v-1}; y_{v-1})
 \end{aligned}$$

Definimos

$$\epsilon_v = z(t_v) - y(t_v) = z_v - y_v \quad (3.1.7)$$

como o erro local de discretização. Pela definição de $z(t)$, nós podemos escrever :

$$z_v = z_{v-1} + \int_{I_v} f(t, z(t)) dt. \text{ Segue-se que}$$

$$e_v = z_{v-1} - y_{v-1} + \int_{I_v} [f(t, z(t)) - \sum_{k=1}^4 a_k g_k^v] dt ,$$

expressão que pode ser escrita na forma :

$$e_v = e_{v-1} + \sum_{k=1}^4 J_k , \text{ onde} \quad (3.1.9)$$

$$J_1 = \int_{I_v} \frac{1}{6} [f(t, z(t)) - f(t_{v-1}; y_{v-1})] dt ,$$

$$J_2 = \int_{I_v} \frac{2}{6} [f(t, z(t)) - f(t_{v-1/2}; y_{v-1} + 0.5hf(t_{v-1}, y_{v-1}))] dt ,$$

$$J_3 = \int_{I_v} \frac{2}{6} [f(t, z(t)) - f(t_{v-1/2}; y_{v-1} + 0.5hf(t_{v-1/2}, y_{v-1} + 0.5hf_{v-1}))] dt ,$$

$$J_4 = \int \frac{1}{6} [f(t, z(t)) - \sigma] dt , \text{ onde}$$

$$\sigma = f(t_v; y_{v-1} + hf(t_{v-1/2}, y_{v-1} + 0.5hf(t_{v-1/2}, y_{v-1} + 0.5hf_{v-1}))) .$$

Nós vamos estimar os $|J_k|$, valendo-nos da expansão de Taylor $f(t, z(t))$, $f(t_\mu, y_\mu)$ até termos de primeira ordem, no sentido de obter uma estimativa análoga à do método anterior, salvo a ordem. Observemos que o lema 1 (ver §3, capítulo 2) também é válido nesta seção. Enunciamos algumas estimativas intermediárias que nos serão úteis, escrevendo abreviadamente :

$$y_\mu = y(t_\mu) , \quad z_\mu = z(t_\mu) , \quad f_\mu = f(t_\mu, y_\mu) , \quad t_\mu \in I_v .$$

$$\|v\|_{1,2,v} = \left[\int_{t_{v-1}}^{t_v} |v'(s)|^2 ds \right]^{1/2} .$$

Estimativas intermediárias:

$$1) \text{ Lema 1: } |hv(t_\mu)| \leq [h^{1/2} + 1.4h^{3/2}] \|v\|_{1,2,v};$$

$$2) |z(t) - z_{v-1}| \leq h^{1/2} \|v\|_{1,2,v};$$

$$|z(t) - z_{v-1}| \leq \int_{I_v} |f(t, z(t))| dt \leq \int_{I_v} v(t) dt \leq h^{1/2} \|v\|_{1,2,v}$$

pelas hipóteses iniciais e a desigualdade de Schwarz.

$$3) |z(t) - y_{v-1}| \leq e_{v-1} + h^{1/2} \|v\|_{1,2,v};$$

$$|z(t) - y_{v-1}| \leq |z(t) - z_{v-1}| + |z_{v-1} - y_{v-1}|, \text{ e de 2) segue 3).}$$

$$4) \text{ Se } t > t_\mu, t, t_\mu \in I_v, \text{ então } |t - t_\mu - 0.5h| \leq 0.5h.$$

$$0 < t - t_\mu < h \rightarrow -0.5h < t - t_\mu - 0.5h < 0.5h.$$

Agora, vamos estimar os $|J_k|$. As estimativas intermediárias serão utilizadas frequentemente, como veremos, sem mencionarmos explicitamente em cada ponto, qual delas está sendo utilizada. Os símbolos f_t e f_y denotam, respectivamente, a primeira derivada parcial de f em relação à t e y . Nós denotamos por Q a região $[t_{v-1}, t_v] \times [0, 1]$; pela expansão de Taylor da função f , obtemos as estimativas:

$$|J_1| \leq \Delta_1 + \Delta_2, \text{ onde}$$

$$|\Delta_1| = \frac{1}{6} \int_Q |f_t(t_{v-1} + q(t-t_{v-1}), y_{v-1})(t-t_{v-1})^2 dq dt|$$

$$|\Delta_2| = \frac{1}{6} \int_Q |f_y(t_{v-1}, y_{v-1} + q(z(t) - y_{v-1}))(z(t) - y_{v-1})^2 dq dt|$$

Obtemos:

$$|J_1| \leq \Delta_1 + \Delta_2 \leq \frac{1}{6} 0.5h^2 v(t_\mu) + \frac{1}{6} hv(t_\mu) [e_{v-1} + h^{1/2} \|v\|_{1,2,v}]$$

$$\leq \frac{1}{6} e_{v-1} [h^{1/2} + 1.4h^{3/2}] + P_1(h, v) \quad (3.1.10)$$

$$P_1(h, v) = \frac{1}{12} [h^{3/2} + h^{5/2}] \|v\|_{1,2,v} + \frac{1}{6} [h + 1.4h^2] \|v\|_{1,2,v}^2$$

Estimamos J_2 :

$$|J_2| = \frac{2}{6} \int [f(t, z(t)) - f(t_{v-1/2}, y_{v-1} + 0.5hf_{v-1})] dt \leq$$

$$\leq \frac{2}{6} \int_Q |f_t(t_{v-1/2} + q(t-t_{v-1/2}))(t-t_{v-1/2}) dq dt| +$$

$$\frac{2}{6} \int_Q |f_y(t_\mu, y_\mu)(z(t) - (y_{v-1} + 0.5hf_{v-1})) dq dt|, \text{ onde}$$

$y_\mu = y_{v-1} + q(z(t) - (y_{v-1} + 0.5hf_{v-1}))$, o que nos leva a:

$$|J_2| \leq \frac{2}{6} \int v(t_\mu) |t - t_{v-1/2}| dt + \frac{2}{6} \int v(t_\mu) |z(t) - y_{v-1}| + \frac{2}{6} \int v(t_\mu) 0.5hf_{v-1}$$

sendo as integrais tomadas em $I_v = [t_{v-1}, t_v]$. Obtemos, então :

$$|J_2| \leq \frac{2}{6} v(t_\mu) 0.25h^2 + \frac{2}{6} hv(t_\mu) [e_{v-1} + h^{1/2} \|v\|_{1,2,v}] + \frac{1}{6} h^2 v(t_\mu)$$

$$\leq \frac{2}{6} e_{v-1} [h^{1/2} + 1.4h^{3/2}] \|v\|_{1,2,v} + P_2(h, v), \quad (3.1.11)$$

$$P_2(h, v) = \left(\frac{h^{5/2}}{12} + \frac{1.4 h^{7/2}}{12} \right) \|v\|_{1,2,v} + \left(0.5h + \frac{5.6h^2}{6} + \frac{2h^3}{6} \right) \|v\|_{1,2,v}^2$$

Estimamos J_3 , definindo:

$$\sigma = 0.5hf(t_{v-1/2}; y_{v-1} + 0.5hf_{v-1}), \quad (3.1.12)$$

$$|J_3| \leq \frac{2}{6} \int [f(t, z(t)) - f(t_{v-1/2}, y_{v-1} + \sigma)] dt$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{2}{6} \int_Q |f_t(t_{v-1/2} + q(t-t_{v-1/2}), y_{v-1})(t-t_{v-1/2}) dt dq| \\ &+ \frac{2}{6} \int_Q |f_y(t_{v-1/2}, y_{v-1} + q(z(t) - (y_{v-1} + o)))(z(t) - (y_{v-1} + o)) dt dq| \\ &\leq \frac{2}{6} v(t_\mu) \int |t-t_{v-1/2}| + \frac{2}{6} \int v(t_\mu) |z(t) - y_{v-1}| + \frac{2}{6} \int v(t_\mu) |o| \end{aligned}$$

Pelas hipóteses iniciais e pela sua definição, $|o| \leq 0.5hv(t_\mu)$, para algum $t_\mu \in I_v$. Logo :

$$\begin{aligned} |J_3| &\leq \frac{2}{6} v(t_\mu) 0.25h^2 + \frac{2}{6} (e_{v-1} + h^{1/2} \|v\|_{1,2,v}) hv(t_\mu) + \frac{1}{6} h^2 v(t_\mu) \\ |J_3| &\leq \frac{2}{6} e_{v-1} \left[h^{1/2} + 1.4h^{3/2} \right] \|v\|_{1,2,v} + P_3(h,v) \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

$P_3(h,v) = P_2(h,v)$ pela escolha de v .

Finalmente, estimemos J_4 :

$$\begin{aligned} |J_4| &\leq \frac{1}{6} \int \left[f(t, z(t)) - f(t_v, y_{v-1} + \xi) \right] dt, \text{ onde} \\ \xi &= hf(t_{v-1/2}; y_{v-1} + 0.5hf(t_{v-1/2}, y_{v-1} + 0.5hf_{v-1})) \\ |J_4| &\leq \frac{1}{6} \int_Q |f_t(t_v + q(t-t_v), y_{v-1})(t-t_v) dq dt| + \\ &\quad \frac{1}{6} \int_Q |f_y(t_v, y_{v-1} + q(z(t) - y_{v-1} - \xi))(z(t) - y_{v-1} - \xi) dq dt| \\ &\leq \frac{1}{6} v(t_\mu) \int |t-t_{v-1}| + \frac{1}{6} v(t_\mu) \int |z(t) - y_{v-1}| + \frac{1}{6} v(t_\mu) \int |\xi| \leq \\ &\leq \frac{h^2}{12} v(t_\mu) + \frac{1}{6} \left[e_{v-1} + h^{1/2} \|v\|_{1,2,v} \right] hv(t_\mu) + \frac{1}{6} h^2 v(t_\mu) \\ &\leq \frac{1}{6} e_{v-1} \left[h^{1/2} + 1.4h^{3/2} \right] \|v\|_{1,2,v} + P_4(h,v), \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

$$P_4(h,v) = \left[\frac{h^{5/2}}{12} + \frac{1.4h^{7/2}}{12} \right] \|v\|_{1,2,v} + \left[\frac{2}{6}h + \frac{4.2h^2}{6} + \frac{2h}{6} \right] \|v\|_{1,2,v}^2.$$

Substituindo em (3.1.9), obtemos $|e_v| \leq (1 + A_v)e_{v-1} + B_v$. Por indução, o erro global satisfaz :

$$|e_n| \leq (e_1 + \sum_{v=1}^n B_v) \exp \sum_{v=1}^n A_v \quad (3.1.15)$$

onde $A_v = (h^{1/2} + 1.4h^{3/2}) ||v||_{1,2,v}$ e

$$B_v = \left(\frac{h^{3/2}}{12} + \frac{h^{5/2}}{3} + \frac{1.4h^{7/2}}{4} \right) ||v||_{1,2,v} + \left(1.5h + 2.8h^2 + h^3 \right) ||v||_{1,2,v}^2$$

o que leva a estimar e_1 , $\sum B_v$, $\sum A_v$, para obtermos uma estimativa do erro e_n em termos de um funcional dependendo de h e da norma no intervalo $I=[0,1]$ da derivada da função de controle $v(t)$. Estimando e_1 , obteríamos desigualdades análogas ao caso e_k , $k > 1$, só que agora $e_0 = 0$, pois $z_0 = y_0$. De modo que e_1 não otimiza a soma parcial dos B_v ; desprezando então e_1 , obtemos :

$$|e_n| \leq \left[\sum_{v=1}^n B_v \right] \left(\exp \sum_{v=1}^n A_v \right) \quad (3.1.16)$$

Agora, devemos estimar as somas que aparecem na estimativa do erro global. Pela desigualdade de Schwarz, vem :

$$\sum_{v=1}^n ||v||_{1,2,v} \leq n^{1/2} ||v||_{1,2} \quad (3.1.17)$$

onde $||v||_{1,2} = \left[\int_0^1 |v'(s)|^2 ds \right]^{1/2}$

Segue-se que :

$$\sum_{v=1}^n A_v \leq (1 + 1.4h) ||v||_{1,2} \quad (3.1.18)$$

e $\sum_{v=1}^n B_v \leq P(h) ||v||_{1,2} + Q(h) ||v||_{1,2}^2$, (3.1.19)

onde $P(h) = h/12 + h^2/3 + 0.35h^3$ e $Q(h) = 1.5h + 2.8h^2 + h^3$. (3.1.20)

Definindo os funcionais

$$\Psi = \Psi(h, v) = (1 + 1.4h) \|v\|_{1,2},$$

$$\bar{\Phi} = \bar{\Phi}(h, v) = \left(\frac{1}{12} + \frac{h}{3} + 0.35h^2\right) \|v\|_{1,2} + (1.5 + 2.8h + h^2) \|v\|_{1,2}^2,$$

obtemos a estimativa :

$$|e_n| \leq h \bar{\Phi} \exp \Psi, \text{ donde } |e_n|^2 \leq h^2 \bar{\Phi}^2 \exp 2\Psi \leq 2h^2 \exp(\bar{\Phi} + 2\Psi),$$

pois $\bar{\Phi}^2 \leq 2 \exp \bar{\Phi}$. Mas,

$$\bar{\Phi} + 2\Psi = (2.1 + 3.2h + 0.35h^2) \|v\|_{1,2} + (1.5 + 2.8h + h^2) \|v\|_{1,2}^2.$$

$$\text{Seja } h < 0.1; \text{ então } (2.1 + 3.2h + 0.35h^2) \leq 2.5 \quad (3.1.21)$$

$$\text{e } (1.5 + 2.8h + h^2) \leq 2 \quad (3.1.22)$$

De fato, a raiz positiva de $h^2 + 2.8h - 0.5h = 0$ é $h' = 0.1684$ e a raiz positiva de $0.35h^2 + 3.2h - 0.4 = 0$ é $h'' = 0.1233$.

Tomando a esperança, obtemos :

$$E_{\mu}(|e_n|^2) \leq 2h^2 E_{\mu}(\exp(2.5 \|v\|_{1,2} + 2 \|v\|_{1,2}^2))$$

$$\leq 2h^2 \left[E_{\mu}(\exp 2.5 \|v\|_{1,2})^2 \right]^{1/2} \left[E_{\mu}(\exp 2 \|v\|_{1,2}^2)^2 \right]^{1/2};$$

$$E_{\mu}(|e_n|^2) \leq 2h^2 \left[E_{\mu}(\exp 5 \|v\|_{1,2}) \right]^{1/2} \left[E_{\mu}(\exp 4 \|v\|_{1,2}^2) \right]^{1/2}$$

Pelos lemas 2 e 3 do apêndice, temos :

$$\left[E_{\mu}(\exp 5 \|v\|_{1,2}) \right]^{1/2} = \exp(25/24) \leq 2.84 \quad (3.1.23)$$

$$E_{\mu}(\exp 4 \|v\|_{1,2}^2) = \left[\prod_{n=1}^{\infty} (1 - 8\beta_n) \right]^{-1/2} \quad (3.1.24)$$

O produto infinito converge pois $8 < \pi^2$. Seja $\gamma_n = \frac{8}{n^2}$; então

$$(1 - 8\beta_n)^{-1} \leq 1 + \gamma_n, \text{ logo}$$

$$\left[E_{\mu}(\exp 4 \|v\|_{1,2}^2) \right]^{1/2} \leq \left[\prod_{n=1}^{\infty} (1 + \gamma_n) \right]^{1/4} \leq \exp \left\{ 0.25 \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n \right\} \leq 26.84$$

Nós vamos resumir nossos resultados na seguinte :

Proposição. Consideremos o PVI-2 sob as hipóteses iniciais HI-2. Então, se a partição do intervalo $[0,1]$ tiver mais de 10 pontos, o erro global do algoritmo clássico de Runge-Kutta de 4 estágios, em média, é de ordem 2 em H_0^1 . Mais precisamente :

$$E_{\mu}(|\epsilon_n|^2) \leq 153h^2. \quad (3.1.25)$$

Por exemplo, para $h=1/50$, teríamos que o erro em média está em torno de 6%. Via desigualdade de Chebyshev, obtemos :

$$P_{\mu} \left\{ |\epsilon_n^2| > \sigma \right\} \leq \frac{153h^2}{\sigma}; \text{ se } \sigma = h^s, \text{ com}$$

$0 \leq s < 2$, teremos :

$$P_{\mu} \left\{ |\epsilon_n^2| > \sigma \right\} \leq 153h^{2-s}. \quad (3.1.26)$$

APENDICE

MEDIDAS EM ESPAÇOS DE FUNÇÕES

Nesta seção, nós vamos mostrar as idéias básicas vistas em Kuof[8], que permitem introduzir uma medida no espaço de funções. Essencialmente, nós definimos um produto interno no espaço e, daí, obtemos uma norma. Neste espaço normado, nós podemos definir uma medida; como aplicação, nós podemos estimar o valor em média de um funcional linear limitado, como o erro de algoritmos de integração, definido num certo espaço.

Definição. Uma medida Gaussiana num espaço de Hilbert H é uma medida de Borel em H tal que para cada $x \in H$ a função mensurável $\langle x, \cdot \rangle$ é uma variável aleatória normalmente distribuída, isto é, existem m_x e σ_x tais que

$$\mu \langle y \in H; \langle x, y \rangle \leq a \rangle = \int_{-\infty}^a \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x}} \exp\left(-\frac{(t-m_x)^2}{2\sigma_x}\right) dx$$

Exemplo. Seja $X=C[0,1]$; então X é um espaço de Banach equipado com a norma do sup

$$\|f\| = \sup_{t \in [0,1]} |f(t)| \quad (1)$$

Seja B o campo de Borel de X , isto é, o conjunto onde cada elemento é definido tomando-se um número finito de uniões, intersecções e complementos dos abertos de X . Um subconjunto I de $C[0,1]$ da forma

$$I = \langle f \in X ; (f(t_1), f(t_2), \dots, f(t_n)) \in E \rangle, \quad (2)$$

onde $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq 1$ e E é um subconjunto de Borel de \mathbb{R}^n , é chamado de conjunto cilíndrico de X .

Definição. Seja I um conjunto cilíndrico. Nós definimos

a medida de um conjunto desta forma por :

$$w(I) = \left[(2\pi)^n t_1(t_2-t_1)\dots(t_n-t_{n-1}) \right]^{-1/2} \int_E \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{u_1^2}{t_1} + \frac{(u_2-u_1)^2}{t_2-t_1} + \dots + \frac{(u_n-u_{n-1})^2}{t_n-t_{n-1}} \right] \right\} du_1 \dots du_n \quad (3)$$

que chamamos de medida de Wiener em $C[0,1]$.

A integral em $C[0,1]$ com respeito a w é chamada de integral de Wiener. Se f é uma função W -integrável, sua integral será denotada por

$$E_w [f] = \int_{C[0,1]} f(x) w(dx). \quad (4)$$

Exemplo. Se $0 < t \leq 1$, então para $-\infty < a < b < \infty$

$$w(\{f \in C[0,1]; a \leq f(t) \leq b\}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \int_a^b e^{-x^2/2t} dt, \quad (5)$$

de modo que o funcional $h_t(f) = f(t)$ é normalmente distribuído com média 0 e variância t .

Dados $a, b \in \mathbb{R}$, a integral em (5) nós dá a w -probabilidade de $f(t)$ pertencer ao intervalo $[a, b]$, $\forall t \in [0, 1]$.

Dada uma medida gaussiana, nós podemos caracterizá-la através de sua média e seu operador covariância. Seja μ uma medida Gaussiana; seu funcional característico é dado por

$$\Phi(x) = \exp(i\langle m_\mu, x \rangle - \langle S_\mu x, x \rangle), \quad (6)$$

onde μ é a média e S_μ é o operador covariância :

$$\langle S_\mu x, x \rangle = \int_H \langle x, y \rangle^2 \mu(dy). \quad (7)$$

Seja φ_n uma base ortonormal de H dado pelas autofunções de S_μ e correspondentes autovalores $\{\beta_n\}$. Observemos que $\langle \cdot, \varphi_n \rangle$ são variáveis aleatórias gaussianas independentes em H e $\langle \cdot, \varphi_n \rangle$ são normalmente distribuídas com média 0 e covariância $\langle S_\mu \varphi_n, \varphi_n \rangle = \beta_n$.

De fato, por definição $\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle = 0$, se $j \neq k$, logo

$$m_\varphi = \int_H \langle \varphi_j, \varphi_k \rangle \mu(d\varphi_j) = 0 \quad (8)$$

$$e \quad \langle S_\mu \varphi_n, \varphi_n \rangle = \int_H \langle \varphi_n, \varphi_n \rangle^2 \mu(d\varphi_n) = \beta_n \quad (9)$$

Nós queremos trabalhar com um operador S_μ do tipo traço, isto é,

$$\text{traço } S_\mu = \sum_{k=1}^{\infty} \beta_n < \infty. \quad (10)$$

Lema 2. Seja $H=L^2[0,1]$; consideremos o operador covariância definido por

$$\langle S_\mu v, v \rangle = \int_0^1 \left[\left(\frac{-d^2}{dx^2} \right)^{-1} v, v \right] dx, \quad v \in H_0^1[0,1] \quad (11)$$

onde $\left(\frac{-d^2}{dx^2} \right)^{-1}$ é o operador de Dirichlet associado com $\frac{-d^2}{dx^2}$

em $[0,1]$, $v(0) = v(1) = 0$.

Seja $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que $0 < \alpha < \frac{1}{2} \min \langle \beta_n \rangle$; então

$$I = E \left[e^{\alpha \|v\|^2} \right] = e^{\frac{\alpha^2}{2} \text{traço } S_\mu} = e^{\frac{\alpha^2}{12}}$$

onde os β_n são os autovalores associados às autofunções do operador S_μ .

Prova : As autofunções do operador $-d^2/dx^2$ em $[0,1]$, sa-

atisfazendo $f(0)=f(1)=0$, formam a seqüência $f_n(x)=\text{sen}(n\pi)x$, associadas aos autovalores $\beta_n = n^2\pi^2$.

De fato, $f_n(0) = f_n(1) = 0$,

$$f_n'(x) = n\pi \cos(n\pi)x$$

$$\text{e } -f_n''(x) = n^2\pi^2 \text{sen}(n\pi)x = \beta_n f_n(x).$$

$$\text{Provemos o lema 2. } I = \prod_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\alpha x} e^{-x^2/2\beta_n}}{\sqrt{2\pi\beta_n}} dx =$$

$$= \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(x-\alpha\beta_n)^2/2\beta_n} e^{\alpha^2/2\beta_n}}{\sqrt{2\beta_n}} dx =$$

$$= \prod_{n=1}^{\infty} e^{\alpha^2/2\beta_n} = e^{(\alpha^2 \text{traço } S_{\mu})/2} = e^{\alpha^2/12},$$

pois $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/2) dx = \sqrt{\pi}$, a qual surge pela substituição de variável $\xi = (2\beta_n)^{-1/2}(x-\alpha\beta_n)$.

Aqui, é necessário fazer duas observações importantes sobre o lema 2. Primeiramente, escolhemos o operador $\left[\frac{-d}{dx^2} \right]$ na

definição do operador covariância, porque seus autovalores são os inversos dos autovalores do $-d^2/dx^2$. Daí, o traço do operador definido em (11) será a soma

$$\text{traço } S_{\mu} = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n^{-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2\pi^2} = \frac{1}{6}, \text{ já que } \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}.$$

Além disso, se o intervalo escolhido fosse $[0, T]$, $T \in \mathbb{R}$, arbitrário, nós teríamos a seqüência de autovalores

$$\lambda_n^{-1} = \frac{T^2}{n^2\pi^2} \text{ de modo que o traço do operador } S_{\mu} \text{ seria dado por}$$

$$\text{traço } S_{\mu} = \frac{T^2}{6}.$$

Lema 3. Seja $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que $0 < \alpha < \frac{1}{2} \min \langle \beta_n^{-1} \rangle$; então

$$\begin{aligned} E_{\mu} \left(\exp \alpha \|v\|_{1,2}^2 \right) &= \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - 2\alpha\beta_n \right)^{-1/2} = \\ &= \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{2\alpha}{\pi^2 n^2} \right)^{-1/2}. \end{aligned}$$

Pela hipótese, $(1 - 2\alpha\beta_n)^{-1} > 0, \forall n$ e o

produto infinito converge porque $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha}{\pi^2 n^2} < \infty$.

Prova: seja $x = \|v\|_{1,2}$. Então

$$\begin{aligned} E_{\mu} \left(\exp \alpha x^2 \right) &= \prod_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\alpha x^2} e^{-x^2/2\beta_n}}{\sqrt{2\pi\beta_n}} dx \\ &= \prod_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(\beta_n^{-1} - 2\alpha)x^2/2}}{\sqrt{2\pi\beta_n}} dx; \end{aligned}$$

pela substituição $\xi = 2^{-1/2} \left(\beta_n^{-1} - 2\alpha \right)^{1/2} x$, temos

$$E_{\mu} \left(\exp \alpha x^2 \right) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\xi^2}}{(1 - 2\alpha\beta_n)} d\xi = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - 2\alpha\beta_n \right)^{-1/2}.$$

Bibliografia

- 1-BUTCHER, J.C. The numerical analysis of ordinary differential equations. Wiley - Interscience, New York, 1987.
- 2-DAVIS, P.J. & RABINOWITZ, P. Methods of numerical integration. (Computer science and applied mathematics). Academic Press, New York, 1975.
- 3-DUNFORD, N. & SCHWARTZ, J.T. Linear operators: spectral theory. Interscience, New York, 1963.
- 4-FREIDLIN, M. Random perturbation of dynamical systems. Springer-Verlag, Berlin, 1984.
- 5-GEKELER, E. Discretization methods for stable initial value problems. Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, v.1044, 1984.
- 6-HAIRER, E.; NORSETT, S.P. & WANNER, G. Nonstiff Problems. In: _____. Solving ordinary differential equations. (Springer Series in Computational Mathematics, 8). Springer-Verlag, Berlin, 1987.
- 7-HENRICI, P. Discrete variable methods in ordinary differential equations. John Wiley, New York, 1962.
- 8-KUO, H. Gaussian measure in banach space. Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, v.463, 1985.
- 9-LAKSHMIKANTHAN, V. & LEELA, S. Differential and integral inequalities : ordinary differential equations. (Mathematics in Science and Engineering, 55). Academic Press, New York, 1969.

- 10-LYNESS, J. Quid, quo, quadrature? In: The state of art in numerical analysis. Academic Press, London, p.535-62, 1977.
- 11-SARD, A. Linear approximation. Providence, Rhode Island: American Mathematical Society, 1963.
- 12-SHAMPINE, L.F. Global error estimation for stiff ODE's. Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, v. 1066, p.159-68, 1984.
- 13-SMALE, S. On the efficiency of algorithms of analysis. Bulletin of the American Mathematical Society. Providence, Rhode Island, American Mathematical Society, ser. 2, v.13, p.87-121, 1985.
- 14-STERBENZ, P. Floating-point computation. Prentice-Hall, New-York, 1974.
- 15-STETTER, H. J. Analysis of discretization methods for ordinary differential equations. (Springer Tracts in Natural Philosophy, n.23). Springer-Verlag, Berlin, 1973.
- 16-STETTER, H. J. Global error estimation in ordinary initial value problems. Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, v. 968, p.269-79, 1982.
- 17-STROUD, H. Numerical quadrature and solution of ordinary differential equations: a textbook for a beginning course in numerical analysis. Springer-Verlag, New York, 1974.
- 18-TRAUB, T.F. & WOSNIAKOWSKI, H. A general theory of optimal algorithms. Academic Press, New York, 1980.