**"EXTENSAO NATURAL CONTINUA DOS METODOS
DE RUNGE-KUTTA PARA EQUACOES INTEGRAIS
DE VOLTERRA DE SEGUNDA ESPECIE E SUAS
APLICACOES"**

JOSE LUIZ DE SOUZA

ORIENTADORA: Profa. Dra. Neide Maria Bertoldi Franco

Dissertação apresentada ao Instituto de
Ciências Matemáticas de São Carlos da
Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Mestre na área de Ciências
de Computação e Matemática Computacional.

SÃO CARLOS

1992

Em homenagem aos meus pais, que tanto
contribuíram para a minha existência.

AGRADECIMENTOS

A Professora Neide Maria Bertoldi Franco, orientadora deste trabalho, pela paciência, apoio, incentivo e sugestões dadas. Pela amizade dedicada, sincera e franca.

Aos Professores Aldenice Brito Pereira, Messias Meneguette Junior e Neide Maria Bertoldi Franco por terem gentilmente concordado em participar como membros da Banca Examinadora.

Aos Professores Alagacone Sri Ranga, Arnaldo Simal do Nascimento, José Alberto Cuminato, Marcos Nereu Arenales, Marielza Jorge Favaro e Neide Maria Bertoldi Franco, pelos ensinamentos durante os cursos de Pós-Graduação.

Ao amigo, Professor Janey Antonio Dacah e aos Amigos e Professores da UNESP - Bauru, em especial ao Professor Valdemir Garcia Ferreira, pela sempre pronta colaboração.

Ao Professor Luiz Carlos Canêo, que sempre nos proporcionou dedicação e amizade.

A UNESP, pelo estímulo e viabilização desta realidade.

NATURAL CONTINUOUS EXTENSIONS OF RUNGE-KUTTA METHODS FOR VOLTERRA INTEGRAL EQUATIONS OF THE SECOND KIND AND THEIR APPLICATIONS

José Luiz de Souza

Adviser: Profa. Neide Maria Bertoldi Franco

ABSTRACT

The main purpose of this work is to study the structure of Runge-Kutta methods for Volterra Integral Equations. This has been developed for many years in a classical way. This matter will be treated in a very recent fashion, which needs Theory of Graphs, becoming the task of getting Volterra-Runge-Kutta coefficients very easy. Also, it is included the so called Natural Continuous Extensions of the same method, in order to show that, it is possible to build sufficient high order piecewise polynomial functions, which allow to extend the approximation at the grid points, to the whole interval of integration.

RESUMO

O principal propósito deste trabalho é estudar a estrutura dos métodos de Runge-Kutta para Equações Integrais de Volterra. Isto tem sido desenvolvido de forma tradicional durante vários anos. Este assunto será tratado com uma roupagem bem atual, a qual necessita da Teoria de Grafos, tornando assim mais fácil a tarefa de obtenção dos coeficientes de Volterra-Runge-Kutta. Também estão incluídas as Extensões Naturais Contínuas do mesmo método, de modo a mostrar que é possível construir funções polinomiais contínuas por partes, de ordem suficientemente elevada, as quais permitem estender a aproximação nos pontos da malha para todo intervalo de integração.

NATURAL CONTINUOUS EXTENSIONS OF RUNGE-KUTTA METHODS FOR VOLTERRA INTEGRAL EQUATIONS OF THE SECOND KIND AND THEIR APPLICATIONS

José Luiz de Souza

Adviser: Profa. Neide Maria Bertoldi Franco

ABSTRACT

The main purpose of this work is to study the structure of Runge-Kutta methods for Volterra Integral Equations. This has been developed for many years in a classical way. This matter will be treated in a very recent fashion, which needs Theory of Graphs, becoming the task of getting Volterra-Runge-Kutta coefficients very easy. Also, it is included the so called Natural Continuous Extensions of the same method, in order to show that, it is possible to build sufficient high order piecewise polynomial functions, which allow to extend the approximation at the grid points, to the whole interval of integration.

íNDICE

INTRODUÇÃO	01
------------------	----

CAPÍTULO I - CONCEITOS MATEMÁTICOS BÁSICOS

1.1 - Equações Integrais de Volterra (EIV)	03
1.2 - Alguns Resultados da Análise Combinatória	03
1.3 - Resultados da Análise Matemática	04
1.4 - Resultado da Álgebra	05
1.5 - Grafos	05
1.6 - Notação para Árvores	07

CAPÍTULO II - P-ÁRVORES (PA) - DIFERENCIAIS ELEMENTARES - P-SÉRIES

2.1 - Introdução	09
2.2 - P-Árvores (PA)	09
2.3 - Diferenciais Elementares	13
2.4 - P-Séries	19
2.5 - Conclusão	23

CAPÍTULO III - MÉTODO DE VOLTERRA-RUNGE-KUTTA (MÉTODO - VRK)

3.1 - Introdução	24
3.2 - Teoria de Árvores e EIV	30
3.3. - Conclusão	48

**CAPÍTULO IV - EXTENSÃO NATURAL CONTINUA DOS MÉTODOS DE RUNGE-
-KUTTA PARA EQUAÇÕES INTEGRAIS DE VOLTERRA DE
SEGUNDA ESPÉCIE E SUAS APLICAÇÕES.**

4.1	- Introdução	49
4.2	- Condições de Ordem dos Métodos-VRK	50
4.3	- Hipóteses Simplificadoras	65
4.4	- Extensão Natural Continua dos Métodos-VRK	67
4.5	- Aproximações para a Cauda	78
4.6	- Métodos de Colocação	82
4.7	- Aplicação Numérica	85
4.8	- Conclusão	87
BIBLIOGRAFIA		89

INTRODUÇÃO

Embora muito conhecidos no tratamento numérico de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO), somente em anos recentes, os métodos de Runge-Kutta (RK), começaram a ser utilizados em Equações Integrais de Volterra (EIV).

Os primeiros trabalhos, aproveitando as idéias já então desenvolvidas para EDO, são as publicações de Pouzet em 1963-2 e de Bel'tyukov em 1965.

A construção de métodos de RK para EIV ou simplesmente como são conhecidos, métodos de Volterra-Runge-Kutta (VRK), exige uma enorme e tediosa tarefa de manipulação algébrica para a determinação de seus coeficientes. Esta, se torna mais complexa nos métodos de ordem elevada, visto que, em geral, apresentam um número maior de parâmetros que os correspondentes métodos para EDO.

A Teoria dos Grafos, ou mais precisamente, de Árvores, contribui de forma significativa no sentido de simplificar essa tarefa. Permite a obtenção das condições de ordem, e conseqüentemente, dos coeficientes dos métodos, de maneira simples e elegante, sem aquelas manipulações algébricas.

No Capítulo I, são apresentadas as notações, definições e teoremas matemáticos básicos, necessários ao desenvolvimento de todos os demais Capítulos.

O Capítulo II, contém o indispensável no sentido de entender e definir os conceitos relativos à P-Árvores, Diferenciais Elementares e P-Séries.

No Capítulo III, é desenvolvida a Teoria de RK, para a construção dos métodos de VRK, tanto na sua forma "tradicional", como naquela auxiliada pelo conteúdo do Capítulo II.

O Capítulo IV, mostra as Extensões Naturais Contínuas (ENC), procurando estudar os métodos de VRK dentro de uma classe mais geral de métodos. Neste Capítulo, o objetivo principal, é provar a existência das ENC dos métodos de VRK, isto é, de funções polinomiais contínuas por partes, as

quais estendem a aproximação nos pontos da malha, para todo o intervalo de integração. As propriedades requeridas para as ENC permitem construir métodos, computacionalmente, mais eficientes.

No final, é apresentada a Bibliografia que contém os autores mencionados neste trabalho.

CAPÍTULO I

CONCEITOS MATEMÁTICOS BÁSICOS

Serão mostrados neste Capítulo, algumas definições, notações e resultados matemáticos básicos, importantes, usados no decorrer do presente trabalho.

1.1 - EQUAÇÕES INTEGRAIS DE VOLTERRA - [JERRY - 85]

São denominadas Equações Integrais de Volterra (EIV) as equações na forma:

$$(1.1.1) \quad \lambda y(x) = g(x) + \int_{x_0}^x k(x,s,y(s)) ds, \quad 0 \leq x_0 \leq s \leq x \leq X,$$

onde $y:[x_0, X] \rightarrow \mathbb{R}^n$ é a função incógnita, $\lambda \in \mathbb{Z}$ um parâmetro, $g:[x_0, X] \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $k:\Delta \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\Delta = \{(x,s): x_0 \leq s \leq x \leq X\}$, suficientemente diferenciáveis. A função k é denominada núcleo e contém a função incógnita.

A EIV é de 1a. espécie se $\lambda = 0$ e de 2a. espécie se $\lambda \neq 0$.

Quando $g(x) \equiv 0$ a EIV é dita homogênea e quando $k(x,s,y(s)) = k(x,s)y(s)$ a EIV é linear.

São inúmeros os problemas de áreas tais como: Física, Biologia, Crescimento Populacional, Controle Automático, etc..., que poderiam ser citados, para os quais, o modelamento matemático leva à uma EIV.

1.2 - ALGUNS RESULTADOS DA ANÁLISE COMBINATÓRIA

Teorema 1.2.1 - [LIPSCHUTZ - 72] - Se n e p são números inteiros com $n \geq p \geq 0$ onde,

$$(1.2.1) \quad \binom{n}{p} = \frac{n!}{p!(n-p)!},$$

então:

$$(1.2.2) \quad \binom{n}{p} = \binom{n}{n-p}$$

e

$$(1.2.3) \quad \sum_{i=0}^n \binom{i+p}{p} = \binom{n+p+1}{p+1}. \quad \square$$

Definição 1.2.1 - [LIU - 68] - Chama-se coeficiente multinomial de n elementos, combinados a $p_1, p_2, \dots, e, p_k$, o número real obtido por:

$$(1.2.4) \quad \binom{n}{p_1, p_2, \dots, p_k} = \frac{n!}{p_1! p_2! \dots p_k!}, \quad n = \sum_{j=1}^k p_j,$$

onde os p_j são inteiros não negativos.

O coeficiente multinomial representa o número de n -permutações de n objetos não necessariamente todos distintos. Especificamente estes, são agrupados em p_1 objetos do 1º tipo, p_2 objetos do 2º tipo e, ..., p_k objetos do k -ésimo tipo.

1.3 - RESULTADOS DA ANALISE MATEMATICA

Teorema 1.3.1 - [PISKUNOV - 83] - Se f e g são funções de $\mathbb{R}$ em $\mathbb{R}$ e de classe C^n , então a n -ésima derivada da função produto $f(x)g(x)$ em relação à x é dado por:

$$(1.3.1) \quad (f(x)g(x))^{(n)} = \sum_{p=0}^n \binom{n}{p} f^{(n-p)}(x) g^{(p)}(x),$$

com

$$(f(x)g(x))^{(0)} = f(x)g(x),$$

$$f^{(0)}(x) = f(x) \quad e$$

$$g^{(0)}(x) = g(x). \quad \square$$

A fórmula (1.3.1) é denominada 1ª. Fórmula de Leibniz.

Teorema 1.3.2 - [JERRY - 85] - Para a equação integral

$$(1.3.2) \quad y(x) = \int_{\alpha(x)}^{\beta(x)} k(x, y(s)) ds,$$

a 1ª. derivada de $y(x)$ em relação à x é calculada por:

$$(1.3.3) \quad y_x(x) = \int_{\alpha(x)}^{\beta(x)} k_x(x, y(s)) ds + \\ + k(x, y(\beta(x)))\beta_x(x) - k(x, y(\alpha(x)))\alpha_x(x). \quad \square$$

A expressão (1.3.3) é conhecida como 2ª Fórmula de Leibniz, ou uma generalização do Teorema Fundamental do Cálculo.

Para (1.3.2) o desenvolvimento em série de Taylor até 3ª ordem, no ponto $x = x_0 + h$ com $x_0 = 0$, é:

$$(1.3.4) \quad y(h) = kh + \left[2k_x + k_y k \right] \frac{h^2}{2!} + \left[3k_{xx} + 3k_{xy} k + k_{yy} k k + \right. \\ \left. + 2k_x k_y + k_y k_y k \right] \frac{h^3}{3!} + O(h^4).$$

Observação 1.3.1 - Aqui, os índices indicam a variável, em relação a qual está sendo calculada a derivada.

1.4 - RESULTADO DA ALGEBRA - [HENRICI - 74]

Definição 1.4.1 - Uma série formal de potências sobre um corpo F , é uma sequência infinita $\{a_0, a_1, a_2, \dots\}$ de elementos de F . Equivalentemente, é uma função do conjunto dos inteiros não negativos em F , ou seja, $\{0, 1, 2, \dots\} \rightarrow F$.

Por razões práticas, a série formal de potências $\{a_0, a_1, a_2, \dots\}$ é escrita na forma:

$$(1.4.1) \quad P := a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n + \dots$$

1.5 - GRAFOS - [BUTCHER - 87]

Por grafo Γ entende-se um par (V, E) , onde V é um conjunto finito arbitrário e E um subconjunto do conjunto de pares de elementos distintos de V , isto é, $E \subseteq \{(x, y): x, y \in V \text{ com } x \neq y\}$. Os elementos de V , são conhecidos como vértices e os elementos de E como arestas. Representa-se o grafo Γ , construindo um diagrama, no qual, pontos indicarão vértices e as linhas unindo esses pontos indicarão arestas. Assim exemplificando, o grafo $\Gamma = (V, E)$, onde:

$$V = \{v_1, v_2, v_3\} \quad \text{e} \quad E = \{\langle v_1, v_2 \rangle, \langle v_1, v_3 \rangle\},$$

é representado pelo diagrama

Um grafo Γ é direcionado se consistir de um par (V, R) , onde V é um conjunto finito arbitrário, e de um subconjunto R do conjunto de pares ordenados de elementos distintos de V , isto é, $R \subseteq \{(x, y) \in V \times V; x \neq y\}$. Denominam-se os elementos de R , arcos do grafo $\Gamma = (V, R)$. Se $\langle v_1, v_2 \rangle$ é um arco, v_2 será chamado de sucessor de v_1 e v_1 será chamado de antecessor de v_2 .

Definição 1.5.1 - Um grafo direcionado $\Gamma = (V, R)$ é injetivo se cada vértice tem não mais que um antecessor.

Definição 1.5.2 - Dois vértices v_1, v_2 estão conectados a partir de baixo, se existe um caminho de v_1 para v_2 (ou um caminho de v_2 para v_1), ou um caminho de v_0 para v_1 e de v_0 para v_2 , onde v_0 é algum outro vértice. Um grafo direcionado é conexo a partir de baixo, se cada dois vértices estão conectados a partir de baixo.

Definição 1.5.3 - Um grafo direcionado $\Gamma = (V, R)$ é ordenado, se existir uma ordem total sobre V tal que, se $\langle v_1, v_2 \rangle$ é um arco, então $v_1 < v_2$.

Definição 1.5.4 - Uma árvore direcionada é um grafo direcionado, ordenado e injetivo, o qual está conectado a partir de baixo. A raiz de uma árvore direcionada é o ínfimo do conjunto de todos os vértices.

Daqui em diante, a árvore direcionada ou a árvore com raiz será chamada de, simplesmente árvore, e será usado o grafo direcionado para interpretação de árvores.

1.6 - NOTAÇÃO PARA ÁRVORES - [BUTCHER - 87]

Será indicado por T o conjunto de todas as árvores, por φ a árvore com nenhum vértice (isto é, a árvore vazia), e por τ a árvore com exatamente um vértice. Sejam as árvores $t_1 = (V_1, R_1)$, $t_2 = (V_2, R_2)$, ..., $t_m = (V_m, R_m)$, $t_i \in T$ com $i = 1, \dots, m$, onde é suposto que, $V_1, V_2, \dots, V_m$ são disjuntos. Sejam $z_1, z_2, \dots, z_m$ as raízes destas árvores e seja $t = (V, R)$ onde:

$$\begin{cases} V = \langle z \rangle \bigcup_{i=1}^m V_i & \text{com } z \notin \bigcup_{i=1}^m V_i \\ e \\ R = \{(z, z_1), (z, z_2), \dots, (z, z_m)\} \bigcup_{i=1}^m R_i. \end{cases}$$

Note que, $t \in T$ é a árvore com raiz z , e esta é escrita como:

$$(1.6.1) \quad t = {}_z[t_1, t_2, \dots, t_m].$$

Dada uma árvore t com mais de um vértice, pode-se encontrar uma decomposição na forma (1.6.1), simplesmente removendo a raiz e todos os arcos partindo dela, e identificando por $t_1, t_2, \dots, t_m$ as componentes conectadas que sobram.

Serão introduzidos dois detalhes que resumirão esta notação. O primeiro é que, se existem árvores repetidas entre $t_1, t_2, \dots, t_m$, estas podem ser agrupadas usando a notação de potência: Por exemplo, $[t_1, t_1, t_2, t_1, t_2]$ pode ser escrito

como $[t_1^3 t_2^2]$. O segundo, é colocar subscritos nos símbolos "[" e "]" para indicar as repetições dos mesmos. Assim, $[[[\tau]\tau]]$ será escrito como $[_2[\tau]\tau]_2$ (mas não $[_3\tau]\tau]_2$, porque deve-se obedecer os níveis de abertura e fechamento de colchetes).

Usando a notação aqui apresentada, fica fácil escrever qualquer árvore como uma seqüência dos símbolos " τ ", "[", e "]".

Exemplificando, considere a árvore

a qual pode ser escrita como: (seqüência das operações a), b), c), d) e e) abaixo).

a)	$[\tau$		$]$	(remoção da raiz).			
b)	$[\tau[\tau$		$][\tau]$	$[\tau$		$]]$	(remoção das raízes de a)).
c)	$[\tau[\tau$		$]^2[\tau]$	$]]$	(agrupamento).		
d)	$[\tau[\tau[\tau\tau]]^2[[\tau]]]$			(remoção das raízes de c)).			
e)	$[\tau[\tau[\tau^2]]^2[_2\tau]_2]$			(outra notação para d)).			

CAPÍTULO II

P-ÁRVORES (PA) - DIFERENCIAIS ELEMENTARES - P-SÉRIES

As Definições e Lemas das Seções 2.1, 2.2 e 2.3 estão em [HAIRER - 81].

2.1 - INTRODUÇÃO

A representação geométrica de árvores, feita no Capítulo anterior, permitirá uma associação interessante destas com as parcelas do desenvolvimento da EIV em série de Taylor, isto é da expressão (1.3.4), particularmente quando satisfeitas determinadas condições.

Dois problemas básicos serão analisados neste Capítulo. São eles: Um é caracterizar o conjunto de árvores (tipo e forma de ramificações), que é representado pela mesma parcela da série de Taylor.

E o outro diz respeito à contagem destas mesmas árvores. Isto proporciona a determinação do coeficiente de cada parcela.

2.2 - P-ÁRVORES (PA)

Definição 2.2.1 - Seja n um inteiro positivo:

- i) - Uma P-Árvore monotonicamente rotulada de ordem n é um par de relações $t = (t', t'')$, onde:

$$\{2, 3, \dots, n\} \xrightarrow{t'} \{1, 2, \dots, n\} \xrightarrow{t''} A$$

de modo que: $t'(i) < i$ para $i = 2, 3, \dots, n$ e $A = \{a, b, \dots\}$ é um conjunto finito de índices. A ordem de t é n e será indicada por $\rho(t)$, isto é, $\rho(t) := n$.

- ii) - Cada elemento do conjunto A terá associada uma P-Árvore monotonicamente rotulada de ordem 0 (zero), a qual será indicada por $\varphi_a, \varphi_b, \dots$

A sigla PAR designará o conjunto de todas as P-árvores monotonicamente rotuladas.

Cada PAR com $\rho(t) \geq 1$ pode ser representada por um grafo cujos vértices são os elementos i de $\{1, 2, \dots, \rho(t)\}$ e cujos arcos são os pares $(t'(i), i)$ para $i = 2, 3, \dots, \rho(t)$. Além disto, à notação do vértice, será adicionado o índice alfabético $t''(i) \in A$. O vértice com rótulo 1 (um) é denominado raiz e é sempre esquematizado como sendo o vértice mais inferior do grafo direcionado, conectado a partir de baixo.

Definição 2.2.2 - Sejam $t = (t', t'')$ e $u = (u', u'')$ elementos de uma PAR. Define-se uma relação de equivalência em PAR, $t \approx u$ (t é equivalente à u), se e somente se:

- i) - $\rho(t) = \rho(u) \geq 1$.
- ii) - Existe uma relação bijetora

$$\sigma: \{1, 2, \dots, \rho(t)\} \longleftrightarrow \{1, 2, \dots, \rho(u)\}$$

com $\sigma(1) = 1$, de modo que, o diagrama a seguir, pode ser comutado.

Disto, conclue-se que, uma PAR de ordem 0 (zero) é equivalente a si mesma (Definições 2.2.1 - ii) e 2.2.2).

Para uma interpretação da Definição 2.2.2, seja $A_t = \{(t'(i), i) : i = 2, 3, \dots, \rho(t)\}$ o conjunto de arcos de t . Deste modo:

$$\begin{aligned}
 (\sigma \times \sigma)(A_t) &= \{(\sigma t'(i), \sigma(i)) : i = 2, 3, \dots, \rho(t)\}, \\
 &= \{(u'(\sigma(i)), \sigma(i)) : i = 2, 3, \dots, \rho(t)\}, \\
 &= \{(u'(j), j) : j = 2, 3, \dots, \rho(u)\}, \\
 &= A_u,
 \end{aligned}$$

$$\text{e } t''(i) = u''(j) \quad \text{onde } j = \sigma(i).$$

Assim, uma PAR u é obtida a partir de uma PAR t , se os índices i são trocados por j . Pela Definição 2.2.2, são equivalentes, exatamente aqueles elementos da PAR que diferem somente pela rotulação dos índices algébricos.

Definição 2.2.3 - O conjunto $PAR/\approx$ de todas as classes de equivalência sob a relação da Definição 2.2.2 é denominada por PA, isto é, $PA := PAR/\approx$, e os elementos de PA são denominados de P-Árvores. Na sua representação geométrica as letras são deixadas de lado.

Definição 2.2.4 - Para $t \in PA$, define-se:

- i) - $w(\varphi_a) = a$, $w(\varphi_b) = b, \dots$, é o índice da raiz.
- ii) - $\rho(t)$ é a ordem de t , ou o número de vértices de t .
- iii) - $\alpha(t)$ é a cardinalidade, ou o número de possibilidades de se rotular monotonicamente os vértices de t , com números $1, 2, \dots, \rho(t)$, começando pela raiz.

Definição 2.2.5 - Sejam $t_1, t_2, \dots, t_m$, P-Árvores com $\rho(t_i) \geq 1$ e seja z um elemento arbitrário de A . Indica-se como em (1.6.1) a P-Árvore, a qual será obtida do seguinte modo: as raízes de $t_1, t_2, \dots, t_m$ são conectadas com um novo vértice por novos arcos. Este vértice, torna-se a raiz de uma nova P-Árvore e é rotulado por $z \in A$.

Exemplo 2.2.1 -

Fig. 2.2.1

Lema 2.2.1 - Cada P-Árvore com $\rho(t) \geq 2$ poderá ser representada na forma (1.6.1) com P-Árvores de ordem inferior. Esta representação é única, exceto, pelas permutações entre os t_i , $i = 1, 2, \dots, m$. □

Lema 2.2.2 - Sejam $t_1, t_2, \dots, t_m$, P-Árvores com $\rho(t_i) \geq 1$, $z \in A$ e t dado por (1.6.1), então:

$$w(t) = z \quad \text{e} \quad \rho(t) = 1 + \rho(t_1) + \rho(t_2) + \dots + \rho(t_m). \quad \square$$

Lema 2.2.3 - Os inteiros $\alpha(t)$ para $t \in PA$ podem ser calculados como se segue:

Para árvores de ordem:

- i) - $\rho(\varphi_z) = 0, \quad \alpha(\varphi_z) = 1.$
- ii) - $\rho(\tau_z) = 1, \quad \alpha(\tau_z) = 1.$
- iii) - $\rho(t) \geq 2,$

$$\alpha(t) = \left[\begin{matrix} \rho(t) - 1 \\ \rho(t_1), \rho(t_2), \dots, \rho(t_m) \end{matrix} \right] \alpha(t_1) \alpha(t_2) \dots \alpha(t_m) \frac{1}{\mu_1! \mu_2! \dots},$$

onde t é dado por (1.6.1) e $\mu_1, \mu_2, \dots$, são os números das P-Árvores mutuamente iguais entre $t_1, t_2, \dots, t_m$.

Prova - Esta afirmação é imediata para $\rho(t) \leq 1$. Para $\rho(t) > 1$, contam-se o número de rotulações monotonicas de t . O rótulo 1 (um) deve ser atribuído à raiz. O coeficiente multinomial expressa o número de possibilidades de particionar os números $2, 3, \dots, \rho(t)$ para as P-Árvores $t_1, t_2, \dots, t_m$ (vide Definição (1.2.1)). Para cada t_i , existe $\alpha(t_i)$ possibilidades de nomear estes rótulos. Finalmente, divide-se por $\mu_1! \mu_2! \dots$ porque, permutações de P-Árvores iguais entre $t_1, t_2, \dots, t_m$ não muda a rotulação. ■

Para as P-Árvores da Fig. 2.2.1. tem-se:

$$\begin{aligned} \alpha(t_1) &= \left[\begin{matrix} \rho(t_1) - 1 \\ \rho(\tau_a), \rho(\tau_b) \end{matrix} \right] \alpha(\tau_a) \alpha(\tau_b) \cdot \frac{1}{\mu(\tau_a)! \mu(\tau_b)!}, \\ &= \left[\begin{matrix} 2 \\ 1, 1 \end{matrix} \right] \cdot 1 \cdot 1 \cdot \frac{1}{1! \cdot 1!} = 2. \\ \alpha(t_2) &= \left[\begin{matrix} \rho(t_2) - 1 \\ \rho(t_1), \rho(\tau_a), \rho(\tau_a) \end{matrix} \right] \alpha(t_1) \alpha(\tau_a) \alpha(\tau_a) \cdot \\ &\quad \cdot \frac{1}{\mu(t_1)! \mu(\tau_a)!} = \left[\begin{matrix} 5 \\ 3, 1, 1 \end{matrix} \right] \cdot 2 \cdot 1 \cdot 1 \cdot \frac{1}{1! \cdot 2!} = 20. \end{aligned}$$

O número de possibilidades $\alpha(t_2) = 20$ é mostrado na figura a seguir.

Fig. 2.2.2

2.3 - DIFERENCIAIS ELEMENTARES

Seja o sistema particionado infinito de equações diferenciais:

$$(2.3.1) \quad \begin{cases} y_a^{(1)} = f_a(y_a, y_b, \dots), \\ y_b^{(1)} = f_b(y_a, y_b, \dots), \\ \dots\dots\dots \end{cases}$$

onde:

$$\begin{aligned} y_a &\in \mathbb{R}^{n_a}, y_b \in \mathbb{R}^{n_b}, \dots \text{ com } n = n_a + n_b + \dots, \\ y &= (y_a, y_b, \dots)^T, \\ f(y) &= [f(y_a), f(y_b), \dots]^T \end{aligned}$$

e $A = \{a, b, \dots\}$ é um conjunto finito de índices.

Por razões gráficas são usadas letras no lugar de números. Para simplicidade das notações e formulações dos Teoremas, assume-se que $f: U \rightarrow \mathbb{R}^n$ é arbitrária, e suficientemente diferenciável, onde U é um conjunto aberto do $\mathbb{R}^n$.

Considerando a expansão da solução exata do sistema acima pela série de Taylor, através do valor inicial

$$(2.3.2) \quad y(x_0) = y_0 = (y_{0_a}, y_{0_b}, y_{0_c}, \dots)^T,$$

calculam-se as derivadas de ordem superior de $y(x)$. Mostrando isto, para a primeira componente de $y(x_0)$, vem:

$$y_a^{(0)} = y_a,$$

$$y_a^{(1)} = f_a,$$

$$y_a^{(2)} = \frac{\partial f_a}{\partial y_a} f_a + \frac{\partial f_a}{\partial y_b} f_b + \dots,$$

$$\begin{aligned} y_a^{(3)} = & \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_a^2} (f_a, f_a) + \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_a \partial y_b} (f_a, f_b) + \frac{\partial f_a}{\partial y_a} \frac{\partial f_a}{\partial y_a} f_a + \frac{\partial f_a}{\partial y_a} \frac{\partial f_a}{\partial y_b} f_b + \\ & + \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_b \partial y_a} (f_b, f_a) + \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_b^2} (f_b, f_b) + \frac{\partial f_a}{\partial y_b} \frac{\partial f_b}{\partial y_a} f_a + \frac{\partial f_a}{\partial y_b} \frac{\partial f_b}{\partial y_b} f_b + \\ & + \dots \end{aligned}$$

Na notação acima, $(f_a, f_a) = f_a^2$, $(f_a, f_b) = f_a f_b$, $(f_b, f_a) = f_b f_a$.

Estes resultados podem ser resumidos na Tabela:

Ordem $\rho(t)$	No.	Diferencial Elementar	P-Árvore Rotulada	Notação	Cardinali- dade $\alpha(t)$
0	1	y_a	s/vértice	φ_a	1
1	2	f_a		τ_a	1
2	3	$\frac{\partial f_a}{\partial y_a} f_a$		$a[\tau_a]$	1
	4	$\frac{\partial f_a}{\partial y_b} f_b$		$a[\tau_b]$	1
3	5	$\frac{\partial^2 f_a}{\partial y_a^2} (f_a, f_a)$		$a[\tau_a \tau_a]$	1
	6	$\frac{\partial^2 f_a}{\partial y_a \partial y_b} (f_a, f_b)$		$a[\tau_a \tau_b]$	2
	7	$\frac{\partial f_a}{\partial y_a} \frac{\partial f_a}{\partial y_a} f_a$		$a[a[\tau_a]]$	1
	8	$\frac{\partial f_a}{\partial y_a} \frac{\partial f_a}{\partial y_b} f_b$		$a[a[\tau_b]]$	1
	9	$\frac{\partial^2 f_a}{\partial y_b \partial y_a} (f_b, f_a)$		$a[\tau_b \tau_a]$	2
	10	$\frac{\partial^2 f_a}{\partial y_b^2} (f_b, f_b)$		$a[\tau_b \tau_b]$	1
	11	$\frac{\partial f_a}{\partial y_b} \frac{\partial f_b}{\partial y_a} f_a$		$a[b[\tau_a]]$	1
	12	$\frac{\partial f_a}{\partial y_b} \frac{\partial f_b}{\partial y_b} f_b$		$a[b[\tau_b]]$	1

Tabela 2.3.1

A correspondência entre as diferenciais elementares e as respectivas árvores desta Tabela é a seguinte:

Cada f_a (ou f_b) é representado por um vértice com índice a (ou b); cada primeira derivada de f_a por um vértice com índice a de onde sai um ramo, etc. (O número índice indica o estágio no qual o nó é gerado).

Com estas considerações, retornando ao sistema particionado de equações diferenciais (2.3.1), vem:

Definição 2.3.1 - Para cada $t \in PA$ com índice de raiz $w(t) = a \in A$, define-se recursivamente uma função $F(t): U \rightarrow \mathbb{R}^n$, do seguinte modo:

Seja $y = (y_a, y_b, \dots)^T \in U$, então:

$$(2.3.3) \quad \begin{cases} F(\varphi_z)(y) = y_z, \\ F(\tau_z)(y) = f_z(y), \\ F(t)(y) = \frac{\partial^m f_z(y)}{\partial y_{w(t_1)} \dots \partial y_{w(t_m)}} (F(t_1)(y), \dots, F(t_m)(y)), \end{cases}$$

onde, $t = {}_z[t_1, t_2, \dots, t_m]$ e $z \in A$.

As funções F são chamadas de diferenciais elementares.

Exemplo 2.3.1 - As diferenciais elementares que correspondem às P-Árvores da Fig. 2.2.1 são:

$$F(t_1)(y) = \frac{\partial^2 f_a(y)}{\partial y_a \partial y_b} (f_a(y), f_b(y)),$$

$$F(t_2)(y) = \frac{\partial^3 f_b(y)}{\partial y_a^3} \left[\frac{\partial^2 f_a(y)}{\partial y_a \partial y_b} (f_a(y), f_b(y)), f_a(y), f_a(y) \right].$$

Teorema 2.3.1 - Seja $y(x) = (y_a(x), y_b(x), \dots)^T$ a solução do sistema (2.3.1). Assim, com a aplicação da Definição 2.3.1, resulta para a i -ésima derivada a expressão,

$$(2.3.4) \quad y_z^{(i)} = \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ t''(1)=z \\ \rho(t)=i}} F(t)(y(x)) = \sum_{\substack{t \in \text{PA} \\ w(t)=z \\ \rho(t)=i}} \alpha(t) F(t)(y(x)), \text{ com } z \in A.$$

O exemplo a seguir, facilitará o entendimento, da demonstração deste Teorema.

Exemplo 2.3.2 - Dada inicialmente a P-Árvore abaixo, com ordem $\rho(t) = 2$, a qual, será denominada, de árvore "primitiva"

vem para a diferencial elementar de t:

$$F(t)(y) = \frac{\partial f_a}{\partial y_b} f_b, \quad \text{usando (2.3.3).}$$

Derivando $F(t)(y)$ uma vez em relação a x, resulta:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}(F(t)(y)) &= \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_a \partial y_b} f_a f_b + \frac{\partial f_a}{\partial y_b} \frac{\partial f_b}{\partial y_a} f_a + \\ &+ \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_b^2} f_b f_b + \frac{\partial f_a}{\partial y_b} \frac{\partial f_b}{\partial y_b} f_b, \quad \text{usando (2.3.1).} \end{aligned}$$

Observa-se deste modo que, a derivada da diferencial elementar da P-Árvore "primitiva", contém uma soma de diferenciais elementares relativa às P-Árvores com $\rho(t) = 3$ (o que justificará (2.3.5)). Estas, serão chamadas de P-Árvores "derivadas".

Graficamente, diz-se que as P-Árvores "derivadas", foram obtidas da P-Árvore "primitiva", acrescentado-se um novo vértice "a", ou "b" (ou ainda "c"), etc., à estrutura inicial.

Agora, pode-se provar o Teorema 2.3.1.

Prova - A segunda igualdade em (2.3.4) é uma consequência imediata da Definição 2.2.4, item iii). A primeira pode ser pro-

vada por indução sobre i .

$$\text{Tomando } y_z^{(i)} = \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ t''(1)=z \\ \rho(t)=i}} F(t)(y(x)), \quad \text{vem:}$$

$$\text{Para } i = 0, \quad y_z^{(0)} = \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ t''(1)=z \\ \rho(t)=0}} F(t)(y(x)) = F(\varphi_z)(y) = y_z, \quad \text{usando (2.3.3)}$$

$$\text{Para } i = 1, \quad y_z^{(1)} = \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ t''(1)=z \\ \rho(t)=1}} F(t)(y(x)) = F(\tau_z)(y) = f_z(y), \quad \text{usando novamente (2.3.3).}$$

$$\text{Supondo verdadeira para } i = k, \text{ ou seja } y_z^{(k)} = \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ t''(1)=z \\ \rho(t)=k}} F(t)(y(x)),$$

calcula-se para $i = k+1$, derivando esta expressão em relação a x .

$$\text{Assim, } \frac{d}{dx} (y_z^{(k)}) = \frac{d}{dx} \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ t''(1)=z \\ \rho(t)=k}} F(t)(y(x)),$$

$$y_z^{(k+1)} = \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ t''(1)=z \\ \rho(t)=k}} \frac{d}{dx} F(t)(y(x)),$$

$$= \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ t''(1)=z \\ \rho(t)=k}} \sum F(u)(y(x)), \quad \text{considerando os resultados do Exemplo 2.3.2,}$$

$$= \sum_{\substack{u \in \text{PAR} \\ u''(1)=z \\ \rho(u)=k+1}} F(u)(y(x)) = y_z^{(k+1)}, \quad \text{usando (2.3.4).}$$

Esta soma é tomada sobre todo $u = (u', u'') \in \text{PAR}$ de ordem $i+1$, com: $u'|_{\langle 2, 3, \dots, i \rangle} = t'$ e $u''|_{\langle 1, 2, \dots, i \rangle} = t''$. ■

Portanto, o Teorema 2.3.1 permite estabelecer

que uma função analítica f , para a solução do sistema (2.3.1), com valor inicial (2.3.2), pode ser expandida pela série de Taylor:

$$\begin{aligned}
 (2.3.6) \quad y_z(x_0 + h) &= \sum_{i \geq 0} \left[\sum_{\substack{t \in PA \\ w(t)=z \\ \rho(t)=i}} \alpha(t) F(t)(y_0) \right] \frac{h^i}{i!} \\
 &= \sum_{\substack{t \in PA \\ w(t)=z}} \alpha(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}
 \end{aligned}$$

Esta fórmula será essencial nas Definições da próxima Seção.

2.4 - P - SERIES

Definição 2.4.1 - Sejam $f:U \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal como na Seção 2.3, e $y \in U$. Uma P-Série $P(\Phi(t), y)$ é uma série formal de potências (vide Definição 1.4.1), se tiver a forma:

$$P(\Phi(t), y) = \begin{bmatrix} P_a(\Phi(t), y) \\ P_b(\Phi(t), y) \\ \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{\substack{t \in PA \\ w(t)=a}} \Phi(t) \alpha(t) F(t)(y) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} \\ \sum_{\substack{t \in PA \\ w(t)=b}} \Phi(t) \alpha(t) F(t)(y) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} \\ \dots \end{bmatrix},$$

na qual $\Phi:PA \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função arbitrária.

Obeservação 2.4.1 - Com (2.3.6) e com a Definição 2.4.1, deduz-se que:

- i) - $y(x_0) \approx P(\Phi(t), y(x_0))$ onde $\Phi(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \rho(t) = 0 \\ 0 & \text{se } \rho(t) \neq 0 \end{cases}$.
- ii) - $hf(y(x_0)) \approx P(\Phi(t), y(x_0))$ onde $\Phi(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \rho(t) = 1 \\ 0 & \text{se } \rho(t) \neq 1 \end{cases}$.
- iii) - $y(x_0 + h) \approx P(\Phi(t), y(x_0))$ onde $\Phi(t) = 1$ para todo $t \in PA$

Definição 2.4.2 - Seja $g:(-h_0, h_0) \rightarrow \mathbb{R}^n$ suficientemente diferenciável, $h_0 > 0$ e $g(h) = (g_a(h), g_b(h), \dots)^T$. Deste modo, g pode ser representada como uma P-Série em y com relação à f , se e somente se, existe uma função $\Phi: PA \rightarrow \mathbb{R}$ de forma que para todo $z \in A$ e todo $i \geq 0$,

$$(2.4.1) \quad g_z^{(i)}(0) = \sum_{\substack{t \in PA \\ w(t)=z \\ \rho(t)=i}} \Phi(t) \alpha(t) F(t)(y),$$

isto é, a série de Taylor de g e $P(\Phi(t), y)$ são iguais, no sentido de série formal de potências. Nesta situação, é usada a notação:

$$(2.4.2) \quad g(h) \approx P(\Phi(t), y).$$

O teorema a seguir é o resultado central dessa teoria.

Teorema 2.4.1 - Seja $g(h)$ satisfazendo as hipóteses da Definição 2.4.2. Se $g(h) \approx P(\Phi(t), y)$, onde $\Phi: PA \rightarrow \mathbb{R}$ satisfaz, $\Phi(\varphi_z) = 1$, então

$$(2.4.3) \quad \begin{aligned} hf(g(h)) &\approx P(\Phi'(t), y) \quad \text{ou,} \\ hf(P(\Phi(t), y)) &\approx P(\Phi'(t), y), \quad \text{usando (2.4.2),} \end{aligned}$$

onde:

$$\Phi'(\varphi_z) = 0,$$

$$\Phi'(\tau_z) = 1 \quad \text{e}$$

$$\Phi'(t) = \rho(t) \Phi(t_1) \Phi(t_2) \dots \Phi(t_m),$$

para $t = {}_z[t_1, t_2, \dots, t_m]$ com $z \in A$.

Exemplo 2.4.1 - Ilustrando a expressão (2.4.7) (a seguir), são calculadas as derivadas parciais de $f_z(y)$ em relação à h , onde $y \approx g(h)$ (entendendo y_a e y_b como as variáveis primeiras e h a variável última na aplicação da regra da cadeia), vem para a 1ª. derivada:

$$\frac{d}{dh} f_z(g(h)) = \frac{\partial f_z}{\partial g_a} \frac{dg_a}{dh} + \frac{\partial f_z}{\partial g_b} \frac{dg_b}{dh} = \frac{\partial f_z}{\partial y_a} \frac{dy_a}{dg_a} \frac{dg_a}{dh} + \frac{\partial f_z}{\partial y_b} \frac{dy_b}{dg_b} \frac{dg_b}{dh}.$$

Mas, as condições sobre Φ , implicam que $g(h) = y + O(h)$ e des-

te modo, $\frac{dy_a}{dg_a} = \frac{dy_b}{dg_b} = 1$, e então:

$$\frac{d}{dh} f_z(g(h)) = \frac{\partial f_z}{\partial y_a} \frac{dg_a}{dh} + \frac{\partial f_z}{\partial y_b} \frac{dg_b}{dh} = \frac{\partial f_z}{\partial y_a} g_a^{(1)} + \frac{\partial f_z}{\partial y_b} g_b^{(1)}.$$

Estas duas últimas parcelas poderiam ser entendidas como diferenciais elementares, se no lugar de $g_a^{(1)}$ fosse f_a e no lugar de $g_b^{(1)}$ fosse f_b e assim representadas pelo conjunto das P-Árvores:

Para a 2a. derivada,

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dh^2} f_z(g(h)) &= \frac{\partial^2 f_z}{\partial y_a^2} g_a^{(1)} g_a^{(1)} + \frac{\partial f_z}{\partial y_a} g_a^{(2)} + \frac{\partial^2 f_z}{\partial y_a \partial y_b} g_a^{(1)} g_b^{(1)} + \\ &+ \frac{\partial f_z}{\partial y_b} g_b^{(2)} + \frac{\partial^2 f_z}{\partial y_b \partial y_a} g_b^{(1)} g_a^{(1)} + \frac{\partial f_z}{\partial y_a} g_a^{(2)} + \frac{\partial^2 f_z}{\partial y_b^2} g_b^{(1)} g_b^{(1)} + \frac{\partial f_z}{\partial y_b} g_b^{(2)}. \end{aligned}$$

Estas oito parcelas, também poderiam ser representadas pelo conjunto das P-Árvores:

Cada um destes conjuntos (1a. e 2a. derivadas), os quais serão designados logo adiante por S, são constituídos das P-Árvores, cujas únicas possíveis ramificações estão na raiz. índices alfabéticos dos nós não diretamente ligados à raiz são irrelevantes. Assim, torna-se possível definir uma expressão para cada uma destas árvores, isto é, para cada uma das parcelas que compõem as derivadas do exemplo dado.

Definição 2.4.3 - Para $u \in S$, a correspondente classe de equivalência (a qual novamente indica-se por u) pode ser expressa por $u =_z [u_1, u_2, \dots, u_k]$. Fazendo $i_j = \rho(u_j)$ define-se:

(2.4.4)

$$G(u)(h) = \frac{\partial^k f_z(g(h))}{\partial y_{w(u_1)} \partial y_{w(u_2)} \dots \partial y_{w(u_k)}} (g^{(i_1)}(h), g^{(i_2)}(h), \dots, g^{(i_k)}(h)).$$

Com isto, pode-se demonstrar o Teorema 2.4.1.

Prova - Sendo $g(h) = y + O(h)$, a função

$$(2.4.5) \quad hf(g(h)) = c(h) = (c_a(h), c_b(h), \dots)^T$$

está definida na vizinhança de 0. As condições de f e g , respectivamente em (2.3.1) e na Definição (2.4.2), permitem garantir a diferenciabilidade da composta $f \circ g$. Deste modo por uma lado, derivando (2.4.5) i vezes no ponto $h = 0$ (ou usando o Teorema 1.3.1), resulta para $z \in A$,

$$(2.4.6) \quad i(f_z \circ g)^{(i-1)}(0) = c_z^{(i)}(0).$$

Por outro lado, do Exemplo 2.4.1, juntamente com a expressão (2.4.4), vem:

$$(2.4.7) \quad (f_z \circ g)^{(i-1)}(h) = \sum_{\substack{u \in S \\ w(u)=z \\ \rho(u)=i}} G(u)(h).$$

Fazendo $h = 0$ em (2.4.7) e comparando este resultado com (2.4.6), escreve-se:

$$\begin{aligned} c_z^{(i)}(0) &= i \sum_{\substack{u \in S \\ w(u)=z \\ \rho(u)=i}} G(u)(0), \\ &= i \sum_{\substack{u \in S \\ w(u)=z \\ \rho(u)=i}} \frac{\partial^k f_z(g(0))}{\partial y_{w(u_1)} \partial y_{w(u_2)} \dots \partial y_{w(u_k)}} \cdot \\ &\quad \cdot (g^{(i_1)}(0), g^{(i_2)}(0), \dots, g^{(i_k)}(0)), \text{ usando (2.4.4),} \\ &= i \sum_{\substack{u \in S \\ w(u)=z \\ \rho(u)=i}} \sum_{\substack{t_1 \in \text{PAR} \\ t''(1)=w(u_1) \\ \rho(t_1)=i_1}} \sum_{\substack{t_2 \in \text{PAR} \\ t''(2)=w(u_2) \\ \rho(t_2)=i_2}} \dots \sum_{\substack{t_k \in \text{PAR} \\ t''(k)=w(u_k) \\ \rho(t_k)=i_k}} \cdot \\ &\quad \cdot \Phi(t_1) \Phi(t_2) \dots \Phi(t_k) \frac{\partial^k f_z(y)}{\partial y_{w(u_1)} \partial y_{w(u_2)} \dots \partial y_{w(u_k)}} \cdot \\ &\quad \cdot (F(t_1)(y), F(t_2)(y), \dots, F(t_k)(y)), \text{ usando (2.4.1),} \end{aligned}$$

$$= i \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ w(t)=z \\ \rho(t)=i}} \frac{\Phi'(t)}{\rho(t)} F(t)(y), \quad \text{usando a hipótese.}$$

Esta última equação se verifica desde que exista uma correspondência um a um entre os dois conjuntos de somandos.

$$\begin{aligned} c_z^{(i)}(0) &= \sum_{\substack{t \in \text{PAR} \\ w(t)=z \\ \rho(t)=i}} \Phi'(t) F(t)(y), \quad \text{desde que } i = \rho(t), \\ &= \sum_{\substack{t \in \text{PA} \\ w(t)=z \\ \rho(t)=i}} \Phi'(t) \alpha(t) F(t)(y), \quad \text{usando (2.3.4),} \end{aligned}$$

e portanto, $hf_z(g(h)) \approx P_z(\Phi'(t), y)$, usando (2.4.5), (2.3.6) e a Definição 2.4.1, ou
 $hf(g(h)) \approx P_z(\Phi'(t), y)$, usando (2.3.1) e a Definição 2.4.1. ■

2.5 - CONCLUSÃO

O Lema 2.2.3 que permite a contagem das P-Arvores que constituem cada conjunto PA, a Definição 2.3.1 que define Diferencial Elementar e o Teorema 2.4.1 que posteriormente possibilitará estabelecer as condições de ordem, são os conceitos mais importantes a serem usados nos Capítulos seguintes.

CAPÍTULO III

MÉTODO DE VOLTERRA-RUNGE-KUTTA (MÉTODO-VRK)

Neste Capítulo, será apresentada a Teoria de Runge-Kutta para EIV de 2ª espécie, tanto na sua forma estendida como a não estendida. Esta última, se desenvolverá de dois modos: o "tradicional" e o auxiliado pela teoria de árvores. O estudo da combinação da forma estendida com a teoria de árvores, será um dos objetivos do Capítulo IV.

3.1 - INTRODUÇÃO - [BRUNNER - 82]

Considere a EIV de 2ª espécie não linear, como em (1.1.1), com $\lambda = 1$. Fazendo $x_{n-1} = x_0 + (n-1)h$, para $n = 1, 2, \dots, N$, $N = (X - x_0)/h$, com $X = x_n$, reescreve-se (1.1.1) do seguinte modo:

$$(3.1.1) \quad y(x) = g(x) + \int_{x_0}^{x_{n-1}} k(x, s, y(s)) ds + \int_{x_{n-1}}^x k(x, s, y(s)) ds,$$

com $x \in I_n = [x_{n-1}, X]$. Definindo em (3.1.1) a função

$$(3.1.2) \quad F_n(x) = g(x) + \int_{x_0}^{x_{n-1}} k(x, s, y(s)) ds,$$

que será denominada de "Cauda", escreve-se:

$$(3.1.3) \quad y(x) = F_n(x) + \int_{x_{n-1}}^x k(x, s, y(s)) ds.$$

De modo a introduzir a discretização em (3.1.3), será feito que $\tilde{F}_n(x)$ seja uma aproximação de $F_n(x)$ e que o termo integral seja substituído pela função incremento $\phi_n: D_n \rightarrow \mathbb{R}^m$, onde $D_n = \{(x, g_n, h): x \in I_n, g_n \in C(I_n), h \in [0, h_0]\}$ e $C(I_n)$ é o conjunto das funções contínuas de I_n em $\mathbb{R}^m$.

Assim sendo, um método de Volterra-Runge-Kutta

(método-VRK), de 1-passo e ν -estágios, é definido por:

$$(3.1.4) \left\{ \begin{array}{l} y_n = \tilde{F}_n(x_n) + h\phi_n(x_n, \tilde{F}_n, h), \\ \phi_n(x, g_n, h) = \sum_{i=1}^{\nu} b_i k(x + e_i h, x_{n-1} + c_i h, Y_i^{(n)}(g_n)), \\ Y_i^{(n)}(g_n) = \tilde{F}_n(x_{n-1} + \theta_i h) + h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} k(x_{n-1} + d_{ij} h, x_{n-1} + \\ \quad + c_j h, Y_j^{(n)}(g_n)), \\ c_i = \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij}, \quad \text{com } n = 1, 2, \dots, N. \end{array} \right.$$

Os métodos-VRK são chamados implícitos se, $j = 1, 2, \dots, i$ e explícitos se, $j = 1, 2, \dots, i-1$.

Para definir o erro local, causado somente pela função incremento ϕ_n , introduz-se a sequência

$$(3.1.5) \quad \bar{y}_n = F_n(x_n) + h\phi_n(x_n, F_n, h), \quad \text{com } n = 1, 2, \dots, N,$$

onde $\bar{y}_n$ deve ser interpretado como o resultado após o primeiro passo do método de 1-passo, com a função incremento ϕ_n aplicada à equação integral (3.1.3).

Definição 3.1.1 - O método de 1-passo e ν -estágios em (3.1.4) tem ordem local p se para cada equação integral (1.1.1), com $\lambda = 1$,

$$(3.1.6) \quad |y(x_n) - \bar{y}| = O(h^{p+1}), \quad h \rightarrow 0,$$

onde $y(\cdot)$ é a solução exata da equação (3.1.3).

Diferentes tipos de métodos de aproximação numérica para $\tilde{F}_n(x)$, podem ser usados. Basicamente estes se dividem em Métodos Mistos e Métodos Estendidos. No presente trabalho será dado enfoque especial ao segundo, o qual tem como característica, usar para $\tilde{F}_n(x)$, a mesma discretização usada em (3.1.4).

Definindo recursivamente $\tilde{F}_n(x)$,

$$(3.1.7) \quad \begin{cases} \tilde{F}_1(x) = g(x), \\ \tilde{F}_s(x) = \tilde{F}_{s-1}(x) + h \sum_{i=1}^{\nu} b_i k(x + e_i h, x_{n-1} + c_i h, Y_i^{(n)}(\tilde{F}_n)), \end{cases}$$

para $s = 2, 3, \dots, n$,

ou na forma explícita,

$$(3.1.8) \quad \tilde{F}_n(x) = g(x) + h \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=1}^{\nu} b_i k(x + e_i h, x_j + c_i h, Y_i^{(n)}(\tilde{F}_n)).$$

Segundo [HAIRER - 82], são interessantes os métodos-VRK estendidos com $e_i = 0$ se $b_i \neq 0$.

O método dado pelas equações (3.1.4) e (3.1.8) fica completamente caracterizado pela determinação dos parâmetros a_{ij} , d_{ij} , b_i , c_i , e_i e θ_i .

Exemplo 3.1.1 - Conforme [BEL'TYUKOV - 65], seja como ilustração, um método-VRK não estendido, de ordem 2, explícito de z -estágios, aplicado à particular EIV de 2ª espécie

$$(3.1.9) \quad y(x) = \int_{x_0}^x k(x, y(s)) ds,$$

isto é, o método:

$$\begin{cases} y_n = y_{n-1} + h\phi_n(x_{n-1}, y_{n-1}, h), \\ \text{onde } \phi_n(x, y, h) = b_1 K_1 + b_2 K_2, \\ \text{com } \begin{cases} K_1 = k(x + e_1 h, y), \\ K_2 = k(x + e_2 h, y + ha_{21} K_1). \end{cases} \end{cases}$$

Construindo este na sua forma "tradicional", resulta para (3.1.9) o seguinte desenvolvimento em série de Taylor até ordem 2 no ponto $x = x_0$, com $x_0 = 0$:

$$y(h) = (b_1 + b_2)kh + (2(b_1 e_1 + b_2 e_2)k_x + 2b_2 a_{21} k_y k) \frac{h^2}{2} + O(h^3).$$

Comparando termo a termo com (1.3.4) e considerando aquele desenvolvimento até $O(h^3)$, escreve-se o sistema:

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1, \\ 2(b_1 e_1 + b_2 e_2) = 2, \\ 2b_2 a_{21} = 1, \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} b_1 + b_2 = 1, \\ b_1 e_1 + b_2 e_2 = 1, \\ 2b_2 a_{21} = 1. \end{cases}$$

O sistema acima com 3 equações e 5 incógnitas, tem 2 parâmetros livres. Com o objetivo de facilitar a avaliação do núcleo em K_1 e em K_2 , será usada como hipótese simplificadora, atribuir valores iguais para e_1 e e_2 , ou seja $e_1 = e_2 = e$. Assim, este sistema se reduz para,

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1, \\ e = 1, \\ 2b_2 a_{21} = 1, \end{cases}$$

agora com 3 equações e 4 incógnitas, e portanto 1 parâmetro livre.

- i) - Caso seja adotado $b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$, que determina $a_{21} = 1$, resultará um método-VRK, semelhante ao método de RK para equações diferenciais ordinárias, descrito em [LAMBERT - 73], como sendo o método de Euler Melhorado.
- ii) - Caso seja adotado $b_1 = \frac{1}{4}$ e $b_2 = \frac{3}{4}$, que determina $a_{21} = \frac{2}{3}$, resultará um método-VRK descrito em [BEL'TYUKOV - 65].

Com o objetivo de ilustrar o método construído, o caso ii) será aplicado à EIV,

$$(3.1.10) \quad y(x) = \int_0^x (1 - \ln(x+1) + y(s)) ds,$$

cuja solução exata é $y(x) = \ln(x+1)$. Com isto, foram conseguidos os seguintes resultados numéricos:

x	h = 0.1		h = 0.01		h = 0.001	
	Solução	Erro	Solução	Erro	Solução	Erro
0.1	9499243	31775	9965953	434935	10011272	480254
0.2	19082287	850131	20026251	1794095	20117727	1885571
0.3	28831103	2594677	30270209	4033783	30409403	4172977
0.4	38825410	5178186	40784324	7137100	40973450	7326226
0.5	49144694	8598183	51654595	11108084	51896487	11349976

Tabela 3.1.1

Na Tabela acima:

- i) - A Solução Numérica aproximada é $y_n = \text{Solução} \cdot 10^{-8}$.
- ii) - O Erro Absoluto = $\text{Erro} \cdot 10^{-8}$.

Observação 3.1.1 - Percebe-se da Tabela 3.1.1, a propagação do erro da esquerda para a direita e de cima para baixo, sugerindo uma enorme instabilidade do método empregado. Sabemos que a solução exata coincide com a solução numérica no ponto $x = x_0$, cujo valor $y(x_0) = 0$. Quanto mais se afasta deste ponto, maior será o erro.

Uma alternativa, que contribui significativamente para melhorar a estabilidade do método, é introduzir a extensão citada no início deste Capítulo. Sejam a título de comparação, como métodos estendidos, os métodos citados na bibliografia utilizada. Por exemplo em [BRUNNER - 82].

Métodos do tipo "Pouzet" (método-PRK) - São métodos, nos quais em (3.1.4) e em (3.1.8), $d_{ij} = c_i$ e $e_i = 0$, com:

$a_{11} = a_{12} = a_{22} = c_1 = 0$ e $9a_{21} = 24b_1 = 8b_2 = 9c_2 = 6$, resultando:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{F}_n(x) = \frac{h}{4} \sum_{j=1}^{n-1} [k(x, x_j, Y_1^{(n)}) + 3k(x, x_j + \frac{2}{3}h, Y_2^{(n)})], \\ Y_1^{(n)} = \tilde{F}_n(x_{n-1}), \\ Y_2^{(n)} = \tilde{F}_n(x_{n-1} + \frac{2}{3}h) + \frac{2}{3}hk(x_{n-1} + \frac{2}{3}h, x_{n-1}, Y_1^{(n)}), \\ y_n = \tilde{F}_n(x_n) + \frac{h}{4} [k(x_n, x_{n-1}, Y_1^{(n)}) + 3k(x_n, x_{n-1} + \frac{2}{3}h, Y_2^{(n)})]. \end{array} \right.$$

Aplicando este, na forma estendida, explícito, de 2ª ordem e de 2-estágios à EIV (3.1.10), obteve-se os seguintes resultados numéricos:

x	h = 0.1		h = 0.01		h = 0.001	
	Solução	Erro	Solução	Erro	Solução	Erro
0.1	9514629	16389	9530851	167	9531016	2
0.2	18199130	33026	18231819	337	18232152	4
0.3	26186247	50179	26235914	512	26236421	5
0.4	33579130	68094	33646528	696	33647217	7
0.5	40459517	86994	40545621	890	40546502	9

Tabela 3.1.2

Na Tabela acima:

- i) - A Solução Numérica aproximada é $y_n = \text{Solução} \cdot 10^{-8}$.
- ii) - O Erro Absoluto = $\text{Erro} \cdot 10^{-8}$.

Métodos do tipo "Bel'tyukov" (método-BRK) - São métodos, nos quais em (3.1.4) e em (3.1.8), $d_{ij} = e_j$, com:

$a_{11} = a_{12} = a_{22} = c_1 = e_1 = e_2 = 0$ e $9a_{21} = 24b_1 = 8b_2 = 9c_2 = 6$, resultando:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{F}_n(x) = \frac{h}{4} \sum_{j=1}^{n-1} [k(x, x_j, Y_1^{(n)}) + 3k(x, x_j + \frac{2}{3}h, Y_2^{(n)})], \\ Y_1^{(n)} = \tilde{F}_n(x_{n-1}), \\ Y_2^{(n)} = \tilde{F}_n(x_{n-1} + \frac{2}{3}h) + \frac{2}{3}hk(x_n, x_{n-1}, Y_1^{(n)}), \\ y_n = \tilde{F}_n(x_n) + \frac{h}{4} [k(x_n, x_{n-1}, Y_1^{(n)}) + 3k(x_n, x_{n-1} + \frac{2}{3}h, Y_2^{(n)})]. \end{array} \right.$$

Aplicando este, na forma estendida, explícito, de 2ª ordem e de 2-estágios à EIV (3.1.10), obteve-se os seguintes resultados numéricos:

x	h = 0.1		h = 0.01		h = 0.001	
	Solução	Erro	Solução	Erro	Solução	Erro
0.1	09499243	31775	09530685	333	09531015	3
0.2	18168043	64113	18231484	672	18232149	7
0.3	26138908	97518	26235405	1021	26236416	10
0.4	33514772	132452	33645836	1388	33647210	14
0.5	40377165	169346	40544737	1774	40546493	18

Tabela 3.1.3

Na Tabela acima:

- i) - A Solução Numérica aproximada é $y_n = \text{Solução} \cdot 10^{-8}$.
- ii) - O Erro Absoluto = $\text{Erro} \cdot 10^{-8}$.

Observação 3.1.2 - Percebe-se uma significativa melhoria no erro absoluto das Tabelas (3.1.2) e (3.1.3), quando comparado com o da Tabela (3.1.1). Isto ocorre devido ao uso de métodos estendidos.

3.2 - TEORIA DE ARVORES E EIV - [BRUNNER - 82]

No lugar da EIV (1.1.1), sem perda de generalidade, considere a particular EIV homogênea de 2ª espécie com $\lambda = 1$,

$$(3.2.1) \quad y(x) = \int_{x_0}^x k(x, y(s)) ds, \quad \text{onde } x \in I_1 := [x_0, X].$$

Assumindo k suficientemente diferenciável, e usando a Teoria das P-Árvores do Capítulo II, escreve-se (3.2.1) como um sistema particionado infinito de equações diferenciais. Com este objetivo fixa-se:

$$A = \{a_i : i = 0, 1, 2, \dots\} \cup \{x\}, \quad \text{com } a = a_0$$

e ainda,

$$(3.2.2) \quad \begin{cases} y_a(x) = y(x), \\ y_{a_i}(x) = \int_{x_0}^x \frac{\partial^i}{\partial x^i} k(x, y(s)) ds, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \\ y_x(x) = x. \end{cases}$$

Assim:

$$(3.2.3) \quad \begin{cases} y_{a_i}' = \frac{\partial^i}{\partial x^i} k(y_x, y_a) + y_{a_{i+1}}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \\ y_x' = 1; \quad y_x(x_0) = x_0, \end{cases}$$

$$\text{onde } f_{a_i} = y_{a_i}' \quad \text{e} \quad y_{a_i}(x_0) = 0.$$

Deste modo, calculam-se:

$$y(x_0) = 0,$$

$$y^{(1)}(x_0) = k,$$

$$y^{(2)}(x_0) = 2k_x + k_y k \quad \text{e}$$

$$y^{(3)}(x_0) = 3k_{xx} + 3k_{xy}k + k_{yy}kk + 2k_xk_y + k_yk_yk,$$

obtendo-se assim, as mesmas parcelas do desenvolvimento de Taylor, dado por (1.3.4). Com isto, propõe-se a solução de (3.2.1) por (2.3.6), onde se faz $z = a$. Portanto,

$$(3.2.4) \quad y_a(x_0 + h) = \sum_{\substack{t \in PA \\ w(t)=a}} \alpha(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!},$$

com $y_0 = (x_0, 0, 0, \dots)$.

Observação 3.2.1 - Devido a estrutura do sistema (3.2.3), dois fatos devem ser levados em consideração:

- i) - Muitas diferenciais elementares $F(t)(y_0)$ em (3.2.4) são nulas.
- ii) - Outras das que restam (não nulas), também em (3.2.4), são iguais.

Portanto em (3.2.4), somente um subconjunto do

conjunto PA é relevante na expansão em série de Taylor para a solução de (3.2.1). Tal subconjunto, assim será definido:

Definição 3.2.1 - Como Árvores de Volterra (VA), entende-se como o menor subconjunto de PA, satisfazendo as seguintes condições:

- i) - $\varphi_a \in VA$, $\tau_a \in VA$.
- ii) - Se $t_1, \dots, t_m \in VA$, $\rho(t_i) \geq 1$, então,

$$t = {}_a[\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m, t_1, \dots, t_m] = {}_a[\tau_1^k, t_1, \dots, t_m],$$

também está em VA, para cada $k \geq 0$.

Exemplo 3.2.1 - Segundo a Definição acima, para (3.2.4) até ordem $\rho(t) = 3$, as possíveis VA, são:

Definido o conjunto VA é necessário, segundo a Observação 3.2.1, encontrar quais árvores de PA, resultam diferenciais elementares nulas e quais resultam diferenciais elementares iguais.

Definição 3.2.2 - Para cada $t \in VA$ define-se recursivamente o conjunto Classe de Equivalência $E(t) \subset PA$ por:

- i) - $E(\varphi_a) = \{\varphi_a\}$, $E(\tau_a) = \{\tau_a\}$.
- ii) - Se $t = {}_a[\tau_1^k, t_1, \dots, t_m]$, $t_i \in VA$,

$$\rho(t_i) \geq 1, \quad \text{então} \quad E(t) = \bigcup_{i=0}^k E(t_i), \quad \text{onde}$$

$$E_j(t) = \left\{ \alpha_0 [\alpha_1 [\dots \alpha_j [\tau_x^{k-j}, u_1, \dots, u_m] \dots]] : u_j \in E(t_i) \right\},$$

com $j = 0, 1, \dots, k$.

Exemplo 3.2.2 - Do Exemplo 3.2.1, quando $\rho(t) = 3$, tem-se as seguintes classes de equivalência $E(t)$:

$$\text{Para } t = \alpha [\tau_x, \tau_x],$$

$$E(t) = \left\{ \alpha_0 [\tau_x, \tau_x], \alpha_0 [\alpha_1 [\tau_x]], \alpha_0 [\alpha_1 [\alpha_2 []]] = \alpha_0 [\alpha_1 [\tau_{\alpha_2}]] \right\}.$$

$$\text{Para } t = \alpha [\tau_x, \tau_\alpha],$$

$$E(t) = \left\{ \alpha_0 [\tau_x, \tau_\alpha], \alpha_0 [\alpha_1 [\tau_\alpha]] \right\}.$$

$$\text{Para } t = \alpha [\tau_\alpha, \tau_\alpha],$$

$$E(t) = \left\{ \alpha_0 [\tau_\alpha, \tau_\alpha] \right\}.$$

$$\text{Para } t = \alpha [\alpha [\tau_x]],$$

$$E(t) = \left\{ \alpha [\alpha_0 [\tau_x]], \alpha [\alpha_0 [\alpha_1 []]] = \alpha [\alpha_0 [\tau_{\alpha_1}]] \right\}.$$

$$\text{Para } t = \alpha [\alpha [\tau_\alpha]],$$

$$E(t) = \left\{ \alpha [\alpha [\tau_\alpha]] \right\}.$$

Tomando por base a Definição 3.2.2, segue-se o seguinte Teorema:

Teorema 3.2.1 - As diferenciais elementares de (3.2.4) com

base em (3.2.3) têm as seguintes propriedades:

- i) - $u \in E(t) \rightarrow F(u)(y_0) = F(t)(y_0)$.
- ii) - $u \notin \cup E(t)$ e $w(u) = a \rightarrow F(u)(y_0) = 0$.

Prova - Tomando $u \in E(t)$, escreve-se:

$$F(u)(y_0) = \frac{\partial f_{a_0}}{\partial y_{a_1}} \frac{\partial f_{a_1}}{\partial y_{a_2}} \dots \frac{\partial f_{a_{j-1}}}{\partial y_{a_j}} \frac{\partial^{k-j+m} f_{a_j}}{\partial y_x^{k-j} \partial y_{v(u_1)} \dots \partial y_{v(u_m)}} \cdot [F(\tau_x)(y_0)^{k-j}, F(u_1)(y_0), \dots, F(u_m)(y_0)], \text{ usando (2.3.3).}$$

Como,

$$\frac{\partial f_{a_{j-1}}}{\partial y_{a_j}} = \frac{\partial}{\partial y_{a_j}} \left(\frac{\partial^{j-1}}{\partial x^{j-1}} k(y_x, y_a) + y_{a_j} \right) = 1 \quad \forall j, \text{ usando (3.2.3) e}$$

$$\begin{aligned} (F(\tau_x)(y_0))^{k-j} &= (f_x(y_0))^{k-j}, \text{ por (2.3.3),} \\ &= (y_x^{(1)}(x_0))^{k-j}, \text{ por (2.3.1),} \\ &= 1^{k-j} = 1, \text{ por (3.2.3),} \end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned} F(u)(y_0) &= 1.1\dots 1. \frac{\partial^{k-j+m} f_{a_j}}{\partial x^{k-j} \partial y_{v(u_1)} \dots \partial y_{v(u_m)}} \cdot [1, F(u_1)(y_0), \dots, F(u_m)(y_0)], \\ &= \frac{\partial^{k-j+m} \left[\frac{\partial^j}{\partial x^j} k(y_x, y_a) + y_{a_{j+1}} \right]}{\partial x^{k-j} \partial y_{v(u_1)} \dots \partial y_{v(u_m)}} \cdot [F(u_1)(y_0), \dots, F(u_m)(y_0)], \text{ usando (3.2.3).} \\ &= \left[\frac{\partial^{k+m} k(y_x, y_a)}{\partial x^k \partial y_{v(u_1)} \dots \partial y_{v(u_m)}} + \frac{\partial^{k-j+m} y_{a_{j+1}}}{\partial x^{k-j} \partial y_{v(u_1)} \dots \partial y_{v(u_m)}} \right] \cdot [F(u_1)(y_0), \dots, F(u_m)(y_0)]. \end{aligned}$$

Sendo a variável $y_{\alpha_{j+1}}$ independente da variável x , $\frac{\partial y_{\alpha_{j+1}}}{\partial x} = 0$,

$$\text{então, } \frac{\partial^{k-j}(y_{\alpha_{j+1}})}{\partial x^{k-j}} = \frac{\partial^{k-j-1}}{\partial x^{k-j-1}} \left(\frac{\partial y_{\alpha_{j+1}}}{\partial x} \right) = \frac{\partial^{k-j-1}}{\partial x^{k-j-1}}(0) = 0.$$

Usando este fato em $F(u)(y_0)$, resulta,

$$\begin{aligned} F(u)(y_0) &= \left[\frac{\partial^{k+m} k(y_x, y_\alpha)}{\partial x^k \partial y_{\nu(u_1)} \cdots \partial y_{\nu(u_m)}} + \frac{\partial^m(0)}{\partial y_{\nu(u_1)} \cdots \partial y_{\nu(u_m)}} \right] \cdot \\ &\quad \cdot [F(u_1)(y_0), \dots, F(u_m)(y_0)]. \\ &= \frac{\partial^{k+m} k(y_x, y_\alpha)}{\partial x^k \partial y_{\nu(u_1)} \cdots \partial y_{\nu(u_m)}} [F(u_1)(y_0), \dots, F(u_m)(y_0)]. \end{aligned}$$

Este resultado é independente de j e portanto, todas as diferenciais elementares geradas dentro do conjunto $E(t)$ são iguais, e mais ainda, a P-Árvore de $E(t)$ com $j = 0$, é idêntica a V-Árvore t de VA. Fica deste modo, provada a afirmação i) do Teorema 3.2.1. Observa-se que, se $\nu(u_i) \neq \alpha$ para $i = 1, 2, \dots, \nu$, isto é $u \notin E(t)$, então $F(u)(y_0) = 0$ (porque a função $k(y_x, y_\alpha)$ a ser derivada, não contém variáveis além de y_x e de y_α . Espera-se, em alguns casos, mesmo sendo $\nu(u) = \alpha$, que $F(u)(y_0) = 0$. Fica assim também provada, a afirmação ii) do mesmo Teorema. ■

Teorema 3.2.2 - Para a solução exata de (3.2.1) e por analogia com (3.2.4), escreve-se:

$$(3.2.5) \quad y(x_0 + h) = \sum_{t \in VA} \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} \quad \text{onde} \quad \beta(t) = \sum_{u \in E(t)} \alpha(u)$$

e

(3.2.6)

$$\beta(t) = \frac{\rho(t)}{\rho(t) - k} \left[\underbrace{1, \dots, 1}_{k \text{ vezes}}, \rho(t_1), \dots, \rho(t_m) \right] \cdot \beta(t_1) \dots \beta(t_m) \frac{1}{k! \mu_1! \mu_2! \dots}.$$

Prova - Usando o Lema 2.2.3, juntamente com a Definição (3.2.2), item ii), pode-se determinar $\beta(t)$ recursivamente como se segue:

$$\begin{aligned} \beta(t) &= \sum_{i=0}^k \sum_{u \in E_i(t)} \alpha(u) \\ &= \sum_{i=0}^k \sum_{u_1 \in E(t_1)} \dots \sum_{u_m \in E(t_m)} \frac{(\rho(u) - i - 1)!}{\rho(u_1)! \dots \rho(u_m)!} \cdot \alpha(u_1) \dots \alpha(u_m) \frac{1}{(k-i)! \mu_1! \mu_2! \dots}, \quad \text{usando o Lema 2.2.3.} \end{aligned}$$

Como, $\rho(u_i) = \rho(t_i)$ e $\beta(t_i) = \sum_{u_i \in E(t_i)} \alpha(u_i)$, segundo a hipótese,

então:

$$(3.2.7) \beta(t) = \sum_{i=0}^k \frac{(\rho(t) - i - 1)!}{\rho(t_1)! \dots \rho(t_m)!} \beta(t_1) \dots \beta(t_m) \frac{1}{(k-i)! \mu_1! \mu_2! \dots}.$$

Onde $\mu_1, \mu_2, \dots$, são os números das P-Árvores mutuamente iguais entre $t_1, t_2, \dots, t_m$.

Desenvolvendo apenas parte do lado direito da expressão (3.2.7) se obtém, multiplicando e dividindo por $(\rho(t) - k - 1)!$, o resultado:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^k \frac{(\rho(t) - i - 1)!}{(k-i)!} &= (\rho(t) - k - 1)! \sum_{i=0}^k \frac{(\rho(t) - i - 1)!}{(k-i)! (\rho(t) - k - 1)!}, \\ &= (\rho(t) - k - 1)! \sum_{i=0}^k \binom{\rho(t) - i - 1}{k-i}, \quad \text{usando (1.2.1),} \end{aligned}$$

$$= (\rho(t) - k - 1)! \sum_{i=0}^k \binom{\rho(t) - i - 1}{\rho(t) - k - 1}, \quad \text{usando (1.2.2),}$$

$$= (\rho(t) - k - 1)! \binom{\rho(t)}{\rho(t) - k}, \quad \text{usando (1.2.3),}$$

$$= (\rho(t) - k - 1)! \binom{\rho(t)}{k}, \quad \text{usando novamente (1.2.2).}$$

Donde substituindo em (3.2.7), resulta:

$$\beta(t) = \frac{\rho(t)!}{\rho(t_1)! \dots \rho(t_m)!} \cdot \frac{\beta(t_1) \dots \beta(t_m)}{(\rho(t) - k)!} \cdot \frac{1}{k! \mu_1! \mu_2! \dots} \quad \text{ou,}$$

$$= \frac{\rho(t)}{\rho(t) - k} \binom{\rho(t) - 1}{\underbrace{1, \dots, 1}_{k \text{ vezes}}, \rho(t_1), \dots, \rho(t_m)}.$$

k vezes

$$\cdot \beta(t_1) \dots \beta(t_m) \frac{1}{k! \mu_1! \mu_2! \dots}, \quad \text{usando (1.2.4).} \quad \blacksquare$$

Exemplo 3.2.3 - Considere $t \in VA$, tal que:

Aplicando (3.2.6), vem:

$$\beta(t_1) = \frac{3}{2} \cdot \frac{2!}{1!1!} \cdot 1 \cdot \frac{1}{1!1!} = 3 \quad \text{e} \quad \beta(t) = \frac{5}{4} \cdot \frac{4!}{1!3!} \cdot 3 \cdot \frac{1}{1!0!} = 15.$$

As 15 VA árvores monotonicamente rotuladas a partir de t , que tem a mesma diferencial elementar, são:

Onde para qualquer delas a diferencial elementar vale:

$$\begin{aligned}
 F(t_1)(y_0) &= \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_x \partial y_a} (F(\tau_x)(y_0), F(\tau_a)(y_0)), \\
 &= \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_x \partial y_a} (1, f_a) = \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_x \partial y_a} (k(y_x, y_a) + y_{a_1}) = k_{xy} k,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F(t)(y_0) &= \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_x \partial y_{\nu}(t_1)} (F(\tau_x)(y_0), F(t_1)(y_0)), \\
 &= \frac{\partial^2 f_a}{\partial y_x \partial y_a} (1, k_{xy} k) = k_{xy} (1, k_{xy} k) = k_{xy} k_{xy} k.
 \end{aligned}$$

Segundo [BRUNNER - 82], para árvores com até $\rho(t) = 3$, relativas à EIV (3.2.1), quando $x = x_0$ com $x_0 = 0$, tem-se a seguinte Tabela:

Ordem $\rho(t)$	No.	V-Árvore t	Cardinalidade $\alpha(t)$ de PA	Cardinalidade $\beta(t)$ de VA	Diferencial Elementar $F(t)(y_0)$
0	1	ϕ_a	1	1	0
1	2	$\begin{array}{c} \circ \\ \\ \circ_a \end{array}$	1	1	k
2	3	$\begin{array}{c} \circ x \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \\ \quad \\ \circ_a \quad \circ_a \end{array}$	1	2	k_x
	4	$\begin{array}{c} \circ a \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \\ \quad \\ \circ_a \quad \circ_a \end{array}$	1	1	$k_y k$
3	5	$\begin{array}{c} \circ x \quad \circ x \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \\ \quad \\ \circ_a \quad \circ_a \end{array}$	1	3	k_{xx}
	6	$\begin{array}{c} \circ x \quad \circ a \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \\ \quad \\ \circ_a \quad \circ_a \end{array}$	2	3	$k_{xy} k$
	7	$\begin{array}{c} \circ a \quad \circ a \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \\ \quad \\ \circ_a \quad \circ_a \end{array}$	1	1	$k_{yy} k k$
	8	$\begin{array}{c} \circ x \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ a \\ \quad \\ \circ_a \quad \circ_a \end{array}$	1	2	$k_y k_x$
	9	$\begin{array}{c} \circ a \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ a \\ \quad \\ \circ_a \quad \circ_a \end{array}$	1	1	$k_y k_y k$

Tabela 3.2.1

Para a Tabela acima, escreve-se:

$$\begin{aligned}
 (3.2.8) \quad y(h) = & kh + (2k_x + k_y k) \frac{h^2}{2!} + (3k_{xx} + 3k_{xy} k + k_{yy} k k + \\
 & + 2k_x k_y + k_y k_y k) \frac{h^3}{3!} + O(h^4), \quad \text{usando (3.2.5)}.
 \end{aligned}$$

Esta expressão é exatamente igual a expressão (1.3.4), e o correspondente método-VRK (3.1.4) para (3.2.1), assume a forma

$$(3.2.9) \quad \begin{cases} Y_i = h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} k(x_0 + d_{ij} h, Y_j), & i = 1, 2, \dots, \nu, \\ y_1 = h \sum_{i=1}^{\nu} b_i k(x_0 + e_i h, Y_i). \end{cases}$$

Se, do Teorema (3.2.2) a solução exata tem uma expansão em termos de VA, é portanto natural esperar que y_1 (solução aproximada após o primeiro passo), também tenha uma expansão daquela forma, exceto os $\beta(t)$ em (3.2.5), os quais seriam outros coeficientes.

A determinação destes coeficientes decorre do que se segue:

Definição 3.2.3 - Sejam, k suficientemente diferenciável e $\Psi: VA \rightarrow \mathbb{R}$. Uma V-Série, é uma série formal de potências, quando possuir a forma

$$(3.2.10) \quad V(\Psi(t), y_0) = \sum_{t \in VA} \Psi(t) \beta(t) F(t) (y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}.$$

Observe que a expressão (3.2.5) do Teorema 3.2.2 é um exemplo de V-Série, onde se fez $\Psi(t) = 1$.

Teorema 3.2.3 - Seja $\Psi: VA \rightarrow \mathbb{R}$ com $\Psi(\varphi_a) = 1$, então:

$$(3.2.11) \quad hk(x_0 + dh, V(\Psi(t), y_0)) = V(\Psi'(d, t), y_0),$$

onde:

$$\Psi'(d, t) = 0,$$

$$\text{para } t = \varphi_a,$$

$$\Psi'(d, t) = 1,$$

$$\text{para } t = \tau_a \quad e$$

$$\Psi'(d, t) = (\rho(t) - k) d^k \Psi(t_1) \dots \Psi(t_m), \text{ para } t = \tau_a^k [\tau_x^k, t_1, \dots, t_m].$$

Prova - Definindo $\Phi: PA \rightarrow \mathbb{R}$ por:

$$(3.2.12) \quad \Phi(t) = \begin{cases} \Psi(t) \frac{\beta(t)}{\alpha(t)}, & \text{se } t \in VA, \\ d, & \text{se } t = \tau_x, \\ 1, & \text{se } t = \varphi_a, \\ 0, & \text{nos demais casos.} \end{cases}$$

Assim, tomando a Definição 2.4.1 de P-Série, vem:

$$\begin{aligned} i) \quad - P_a(\Phi(t), y_o) &= \sum_{\substack{t \in PA \\ v(t)=a}} \Phi(t) \alpha(t) F(t) (y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \\ &= \sum_{t \in VA} \Psi(t) \beta(t) F(t) (y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} = V(\Psi(t), y_o), \quad \text{usando (3.2.10).} \end{aligned}$$

$$ii) \quad - P_x(\Phi(t), y_o) = \sum_{\substack{t \in PA \\ v(t)=x}} \Phi(t) \alpha(t) F(t) (y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} = x_o + dh, \quad \text{desde que só exista o vértice } x.$$

$$iii) \quad - P_{a_i}(\Phi(t), y_o) = \sum_{\substack{t \in PA \\ v(t)=a}} \Phi(t) \alpha(t) F(t) (y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} = 0, \quad i = 1, 2, \dots$$

Resumindo:

$$\begin{aligned} P_a(\Phi(t), y_o) &= V(\Psi(t), y_o), \\ P_x(\Phi(t), y_o) &= x_o + dh, \\ P_{a_i}(\Phi(t), y_o) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Assim, juntamente com o Teorema 2.4.1 (sobre P-Árvores, que relaciona $\Phi(t)$ com $\Phi'(t)$), vem:

$$\begin{aligned} hk(x_o + dh, V(\Psi(t), y_o)) &= hk(P_x, P_a), \quad \text{usando i) e ii) acima,} \\ &= hf_a(P(\Phi(t), y_o)), \quad \text{usando (2.4.3),} \\ &= P_a(\Phi'(t), y_o), \quad \text{usando (2.4.6),} \\ &= \sum_{\substack{t \in PA \\ w(t)=a}} \Phi'(t) \alpha(t) F(t) (y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \quad \text{usando a Definição (2.4.1).} \end{aligned}$$

Para que a última igualdade seja verificada, toma-se $\Phi'(t) = 0$ para as P-Árvores com índice "a" na raiz, mas que não são V-Árvores.

Fazendo:

$$(3.2.13) \quad \Psi'(d, t) := \bar{\Phi}'(t) \frac{\alpha(t)}{\beta(t)}, \quad \text{para } t \in VA,$$

tem-se:

$$hk(x_0 + dh, V(\Psi(t), y_0)) = \sum_{t \in VA} \Psi'(d, t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}.$$

Assim

$$hk(x_0 + dh, V(\Psi(t), y_0)) = V(\Psi'(d, t), y_0), \quad \text{usando (3.2.10).}$$

Do Teorema 2.4.1:

Se $t = \varphi_a \rightarrow \bar{\Phi}'(\varphi_a) = 0$, então de (3.2.13), $\Psi'(d, \varphi_a) = 0$.

Se $t = \tau_a \rightarrow \bar{\Phi}'(\tau_a) = 1$, então de (3.2.13), $\Psi'(d, \tau_a) = 1$.

(isto porque $\alpha(\varphi_a) = \beta(\varphi_a) = \alpha(\tau_a) = \beta(\tau_a) = 1$)

Se $t \neq \varphi_a$ e $t \neq \tau_a$, então de (3.2.13) e do Teorema 2.4.1,

$$\Psi'(d, t) = \bar{\Phi}'(t) \frac{\alpha(t)}{\beta(t)} = \rho(t) \cdot \underbrace{\bar{\Phi}(\tau_x) \dots \bar{\Phi}(\tau_x)}_{k \text{ vezes}} \cdot \bar{\Phi}(t_1) \dots \bar{\Phi}(t_m).$$

$$\frac{\left[\begin{matrix} \rho(t) - 1 \\ 1, \dots, 1, \rho(t_1), \dots, \rho(t_m) \end{matrix} \right] \cdot 1 \dots 1 \cdot \alpha(t_1) \dots \alpha(t_m)}{\frac{\rho(t)}{\rho(t) - k} \left[\begin{matrix} \rho(t) - 1 \\ 1, \dots, 1, \rho(t_1), \dots, \rho(t_m) \end{matrix} \right] \cdot \beta(t_1) \dots \beta(t_m)}$$

$$\frac{1}{k! \mu_1! \mu_2! \dots} \cdot \frac{1}{k! \mu_1! \mu_2! \dots}, \quad \text{usando o Lema 2.2.3, e (3.2.6).}$$

$$= \rho(t) \cdot \underbrace{d \dots d}_{k \text{ vezes}} \cdot \bar{\Phi}(t_1) \dots \bar{\Phi}(t_m) \cdot \frac{\rho(t) - k}{\rho(t)} \frac{\alpha(t_1)}{\beta(t_1)} \dots \frac{\alpha(t_m)}{\beta(t_m)}$$

$$= d^k \bar{\Phi}(t_1) \dots \bar{\Phi}(t_m) (\rho(t) - k) \frac{\Psi(t_1)}{\bar{\Phi}(t_1)} \dots \frac{\Psi(t_m)}{\bar{\Phi}(t_m)}, \quad \text{usando (3.2.12),}$$

$$= (\rho(t) - k) d^k \Psi(t_1) \dots \Psi(t_m), \quad \text{para } t \in VA. \quad \blacksquare$$

Teorema 3.2.4 - Se o núcleo k é suficientemente diferenciável, então as soluções numéricas y_1 e Y_i ($i = 1, 2, \dots, \nu$) dadas por (3.2.9) são V-Séries, ou sejam:

$$(3.2.14) \quad Y_i = V(\Psi_i(t), y_0) \quad \text{e} \quad y_1 = V(\Psi(t), y_0),$$

onde os coeficientes são dados por:

$$(3.2.15) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi_i(\varphi_a) = 0 \quad \text{e} \quad \Psi(\varphi_a) = 0, \\ \Psi_i(\tau_a) = \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} = c_i \quad \text{e} \quad \Psi(\tau_a) = \sum_{i=1}^{\nu} b_i, \\ \Psi_i(t) = (\rho(t) - k) \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} d_{ij}^k \Psi_j(t_1) \dots \Psi_j(t_q), \\ \Psi(t) = (\rho(t) - k) \sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i^k \Psi_i(t_1) \dots \Psi_i(t_q), \end{array} \right.$$

se $t = {}_a[\tau_x^k, t_1, \dots, t_q]$.

Prova - Substituindo (3.2.14) em (3.2.9), vem:

$$\begin{aligned} V(\Psi_i(t), y_o) &= h \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} k(x_o + d_{ij} h, V(\Psi_j(t), y_o)), \\ &= \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} V(\Psi_j'(d_{ij}, t), y_o), \quad \text{usando (3.2.11),} \\ V(\Psi(t), y_o) &= h \sum_{j=1}^{\nu} b_j k(x_o + e_j h, V(\Psi_j(t), y_o)), \\ &= \sum_{j=1}^{\nu} b_j V(\Psi_j'(e_j, t), y_o), \quad \text{também usando (3.2.11),} \end{aligned}$$

onde por comparação dos coeficientes,

$$\Psi_i(t) = \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} \Psi_j'(d_{ij}, t) \quad \text{e} \quad \Psi(t) = \sum_{j=1}^{\nu} b_j \Psi_j'(e_j, t).$$

Aplicando este resultado ao Teorema 3.2.3, resulta (3.2.15). ■

Teorema 3.2.5 - Seja $\Psi: VA \rightarrow \mathbb{R}$ dado por (3.2.15), então o erro de truncamento local do método-VRK (3.2.9) é

$$y_1 - y(x_1) = \sum_{t \in VA} (\Psi(t) - 1) \beta(t) F(t) (y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!},$$

e o método-VRK tem ordem p , se

$$(3.2.16) \quad \Psi(t) = 1, \quad \text{para } \rho(t) \leq p, \quad t \in VA.$$

Prova - Como a solução aproximada y_1 é dada por (3.2.14) e (3.2.10), isto é,

$$y_1 = V(\Psi(t), y_0) = \sum_{t \in VA} \Psi(t) \beta(t) F(t) (y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \text{ usando (3.2.10)}$$

e a solução exata $y(x_1)$, por (3.2.5),

$$y(x_1) = y(x_0 + h) = \sum_{t \in VA} \beta(t) F(t) (y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}.$$

Então,

$$y_1 - y(x_1) = \sum_{t \in VA} (\Psi(t) - 1) \beta(t) F(t) (y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}.$$

Fazendo $\Phi(t) = 1$ para $\rho(t) \leq p$, resultará $y_1 - y(x_1) = 0$ e o método-VRK é exato até ordem p . ■

Retornando às VA até ordem $\rho(t) = 3$ da Tabela 3.2.1 e aplicando (3.2.16) e (3.2.15), vem:

$$1 = (1 - 0) \sum_{i=1}^v b_i e_i^0 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^v b_i = 1$$

$$1 = (2 - 1) \sum_{i=1}^v b_i e_i^1 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^v b_i e_i = 1$$

$$1 = (2 - 0) \sum_{i=1}^v b_i e_i^c \Psi_i(\tau_\alpha) \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^v b_i c_i = \frac{1}{2}$$

$$1 = (3 - 2) \sum_{i=1}^v b_i e_i^2 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^v b_i e_i^2 = 1$$

$$1 = (3 - 1) \sum_{i=1}^v b_i e_i^1 \Psi_i(\tau_\alpha) \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^v b_i e_i c_i = \frac{1}{2}$$

$$1 = (3 - 0) \sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i^0 \Psi_i(\tau_a) \Psi_i(\tau_a) \rightarrow \sum_{i=1}^{\nu} b_i c_i^2 = \frac{1}{3}$$

$$1 = (3 - 0) \sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i^0 \Psi_i(t_i) = 3 \sum_{i=1}^{\nu} b_i (2 - 1) \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} d_{ij}^1 \rightarrow$$

$$\rightarrow \sum_{i=1}^{\nu} b_i \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} d_{ij}^1 = \frac{1}{3}$$

$$1 = (3 - 0) \sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i^0 \Psi_i(t_i) = 3 \sum_{i=1}^{\nu} b_i (2 - 0) \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} d_{ij}^0 \Psi_j(\tau_a) \rightarrow$$

$$\rightarrow \sum_{i=1}^{\nu} b_i \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} c_j = \frac{1}{6}$$

Resumindo:

Ordem $\rho(t)$	No.	V-Árvore t	Condição de Ordem $\Psi(t) = 1$
1	1		$\sum_{i=1}^{\nu} b_i = 1$
2	2		$\sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i = 1$
	3		$\sum_{i=1}^{\nu} b_i c_i = \frac{1}{2}$
3	4		$\sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i^2 = 1$
	5		$\sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i c_i = \frac{1}{2}$
	6		$\sum_{i=1}^{\nu} b_i c_i^2 = \frac{1}{3}$

(continua)

(continuação)

3	7		$\sum_{i=1}^{\nu} b_i \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} d_{ij} = \frac{1}{3}$
	8		$\sum_{i=1}^{\nu} b_i \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} c_i = \frac{1}{6}$

Tabela 3.2.2

Exemplo 3.2.4 - Considere o método-VRK de 4ª ordem, aplicado à EIV (3.2.1). São as seguintes todas as possíveis árvores de VA com 4 vértices:

De maneira análoga, aplicando (3.2.16) e (3.2.15) obtem-se a tabela:

No.	V-Árvore t	$\beta(t)$	$F(t)(y_o)$	Condição de Ordem $\Psi(t) = 1$
1		4	k_{xxx}	$\sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i^3 = 1$
2		6	$k_{xxy}k$	$\sum_{i=1}^{\nu} b_i e_i^2 c_i = \frac{1}{2}$

(continua)

(continuação)

3		4	$k_{xyy}kk$	$\sum_{i=1}^v b_i e_i c_i^2 = \frac{1}{3}$
4		1	$k_{yyy}kkk$	$\sum_{i=1}^v b_i c_i^3 = \frac{1}{4}$
5		8	$k_{xy}k_x$	$\sum_{i=1}^v b_i e_i \sum_{j=1}^v a_{ij} d_{ij} = \frac{1}{3}$
6		4	$k_{xy}k_yk$	$\sum_{i=1}^v b_i e_i \sum_{j=1}^v a_{ij} c_j = \frac{1}{6}$
7		6	$k_{yy}k_xk$	$\sum_{i=1}^v b_i c_i \sum_{j=1}^v a_{ij} d_{ij} = \frac{1}{4}$
8		3	$k_{yy}k_ykk$	$\sum_{i=1}^v b_i c_i \sum_{j=1}^v a_{ij} c_j = \frac{1}{8}$
9		3	k_yk_{xx}	$\sum_{i=1}^v b_i \sum_{j=1}^v a_{ij} d_{ij}^2 = \frac{1}{4}$
10		3	$k_yk_{xy}k$	$\sum_{i=1}^v b_i \sum_{j=1}^v a_{ij} d_{ij} c_j = \frac{1}{8}$
11		1	$k_{yy}k_ykk$	$\sum_{i=1}^v b_i \sum_{j=1}^v a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}$
12		2	$k_yk_yk_x$	$\sum_{i=1}^v b_i \sum_{j=1}^v a_{ij} \sum_{k=1}^v a_{jk} d_{jk} = \frac{1}{12}$

(continua)

(continuação)

13		1	$k_y k_y k_y k_y$	$\sum_{i=1}^v b_i \sum_{j=1}^v a_{ij} \sum_{k=1}^v a_{jk} c_k = \frac{1}{12}$
----	--	---	-------------------	---

Tabela 3.2.3

Segundo [HAIRER - 85] as condições de ordem da Tabela 3.2.3 para um método-VRK (tipo Bel'tyukov), de 4ª ordem e s-estágios, podem ser condensadas nas expressões:

$$\sum_{i=1}^v b_i e_i^\alpha c_i^\beta = \frac{1}{(\beta + 1)}, \quad \text{para } 0 \leq \alpha + \beta \leq 3,$$

$$\sum_{i=1}^v \sum_{j=1}^v b_i e_i^\alpha c_i^\beta a_{ij} e_j^\gamma c_j^\delta = \frac{1}{(\beta + \gamma + \delta + 2)(\delta + 1)},$$

para $1 \leq \gamma + \delta \leq \alpha + \beta + \gamma + \delta \leq 2$ e

$$\sum_{i=1}^v \sum_{j=1}^v \sum_{k=1}^v b_i a_{ij} a_{ik} e_k^\gamma c_k^\delta = \frac{1}{(\gamma + \delta + 3)(\gamma + \delta + 2)(\delta + 1)},$$

para $\gamma + \delta = 1$,

nas quais α , β , γ e δ são inteiros não negativos.

3.3 - CONCLUSÃO

A simplicidade, que se estabelece pela imposição da condição de ordem (3.2.16) nas expressões (3.2.15), com a finalidade de se determinar os coeficientes de um método-VRK, é notável. Porém, um problema mais difícil aparece. É o de solucionar um sistema de equações, em geral, com mais parâmetros que equações e com isto, possuindo um número elevado de soluções (métodos-VRK) possíveis. Decidir qual solução escolher, é uma opção técnica relativa ao esforço computacional requerido na implementação do método-VRK. Pode-se também, com o objetivo de reduzir o conjunto de soluções, impor condições simplificadoras, tal como será visto no Capítulo IV.

CAPÍTULO IV

EXTENSÃO NATURAL CONTINUA DOS MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA PARA EQUAÇÕES INTEGRAIS DE VOLTERRA DE SEGUNDA ESPÉCIE E SUAS APLICAÇÕES

4.1 - INTRODUÇÃO

Comparando com aquela estudada no Capítulo anterior, a solução numérica das EIV de 2ª espécie será novamente estudada neste Capítulo, dentro de uma classe mais geral de métodos-RK. Serão incluídos agora, métodos os quais são considerados por vários autores como "análogos de RK". Tal estudo será baseado em [BELLEN - 89]. Existe um modo natural de se obter as fórmulas de RK através da aproximação por colocação. No entanto, muitas outras classes de métodos-RK não podem ser obtidas deste modo. Os métodos citados no início do Capítulo III, ou sejam, de Pouzet e de Bel'tyukov, são exemplos destes casos especiais.

O objetivo principal agora, é analisar a existência das Extensões Naturais Contínuas (ENC), dos métodos de RK, ou sejam, das funções polinomiais contínuas por partes, as quais estendem a aproximação nos pontos da malha para todo o intervalo de integração. As propriedades particulares requeridas para as ENC, permitem construir aproximações para a Cauda, bem eficientes em termos de avaliações do núcleo.

Para que isto seja conseguido, será proposto nas fórmulas de RK para as EIV, a introdução de um conjunto maior de parâmetros, permitindo tanto o tratamento único de todos esses métodos, como o desenvolvimento da teoria da ENC. Além de que, de acordo com [BELLEN - 89], sendo maior o número de graus de liberdade, devido ao maior número de parâmetros, melhor será as propriedades de estabilidade destes métodos.

Considere a EIV de segunda espécie,

$$(4.1.1) \quad y(x) = g(x) + \int_{x_0}^x k(x,s,y(s))ds$$

com $g:[x_0, X] \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $k:\Delta \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\Delta := \{(x, s): x_0 \leq s \leq x \leq X\}$ suficientemente diferenciáveis. Será indicado por Y a solução única deste problema.

Dada a partição $x_0 < x_1 < \dots < x_n = X$ do intervalo de integração $[x_0, X]$, e fazendo $h_n = x_n - x_{n-1}$, $n = 1, 2, \dots, N$, define-se a seguinte classe geral de métodos-VRK de ν -estágios para (4.1.1),

$$(4.1.2) \quad \begin{cases} Y_i^{(n)} = \tilde{F}_n(x_{n-1} + \theta_i h_n) + \\ + h_n \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} k(x_{n-1} + d_{ij} h_n, x_{n-1} + e_{ij} h_n, \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ljl} Y_l^{(n)}) \\ y_n = \sum_{i=1}^{\nu} w_i Y_i^{(n)}, \end{cases}$$

onde $i = 1, 2, \dots, \nu$, $n = 1, 2, \dots, N$ e $\tilde{F}_n(x)$ é uma aproximação para a Cauda

$$F_n(x) = g(x) + \int_{x_0}^{x_{n-1}} k(x, s, y(s)) ds$$

a qual, será escolhida de forma a preservar a ordem de convergência do método de RK, e que ainda, como dito anteriormente, seja a mais eficiente possível em termos de número de avaliações da função núcleo k .

Será estudada as condições de ordem dos métodos (4.1.2), usando uma generalização da teoria de [BRUNNER - 82].

4.2 - CONDIÇÕES DE ORDEM DOS MÉTODOS-VRK

Na presente análise, sobre as ENC dos métodos-VRK, serão feitas generalizações a respeito dos métodos-VRK discutidos no Capítulo III, especificamente em relação a Seção 3.2 e aos Teoremas 3.2.3 e 3.2.4. Deste modo, as condições de ordem que aqui serão mostradas, possuem uma complexidade maior do que aquelas do Capítulo anterior. Apesar disto, com algumas definições complementares serão conseguidas as condições de

ordem para os métodos em (4.1.2), de forma análoga aquela que foi determinada no final do Capítulo III para os métodos-VRK na forma não estendida.

Definição 4.2.1 - Um método-VRK de ν -estágios (4.1.2) para a solução numérica da EIV (4.1.1) tem ordem $p \geq 1$ (ordem local $p+1$) em cada intervalo $[x_{n-1}, x_n]$, se:

$$(4.2.1) \quad \|y_n(x_n) - y_n\| = O(h_n^{p+1}), \quad h_n \rightarrow 0,$$

onde $y_n(\cdot)$ é a solução da equação

$$z(x) = \tilde{F}_n(x) + \int_{x_{n-1}}^x k(x, s, z(s)) ds, \quad x \in [x_{n-1}, x_n].$$

Aqui, $\|\cdot\|$ se refere à uma norma vetorial adequada e a função y_n é chamada de uma solução local no sub-intervalo $[x_{n-1}, x_n]$.

Observação 4.2.1 -

i) - Para uso posterior define-se:

$$(4.2.2) \quad c_i = \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{i,j}, \quad i = 1, 2, \dots, \nu$$

ii) - Comparando em (4.1.2) o núcleo k com o núcleo genérico $k(x, s, y(s))$, pode-se identificar que:

$$y(s) = \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{i,j,l} Y_l^{(n)},$$

$$\text{onde } s = x_{n-1} + e_{i,j}h \quad \text{e} \quad Y_l^{(n)} = y(x_{n-1} + c_l h)$$

e assim,

$$y(x_{n-1} + e_{i,j}h) = \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{i,j,l} y(x_{n-1} + c_l h).$$

Desenvolvendo ambos os lados até $O(h^2)$ pela Fórmula de Taylor, vem:

$$y(x_{n-1}) + h e_{i,j} y^{(1)}(x_{n-1}) + O(h^2) =$$

$$= \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{i,j,l} y(x_{n-1}) + h \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{i,j,l} c_l y^{(1)}(x_{n-1}) + O(h^2),$$

e deste modo, fazendo:

$$(4.2.3) \quad e_{i,j} = \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{i,j,l} c_l, \quad \begin{cases} i = 1, 2, \dots, \nu \\ j = 1, 2, \dots, \mu \end{cases},$$

as condições de ordem do método-VRK (4.1.2), para a EIV (4.1.1) são as mesmas quando aplicadas à equação simplificada,

$$(4.2.4) \quad y(x) = g(x) + \int_{x_0}^x k(x, y(s)) ds, \quad x \in [x_0, X],$$

que por sua vez, sem perda de generalidade, restringindo-se ao primeiro intervalo $[x_0, x_0 + h]$, com $h = h_1$, resulta o método-VRK:

$$(4.2.5) \quad \begin{cases} Y_i = g(x_0 + \theta_i h) + h \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{i,j} k(x_0 + d_{i,j} h, \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{i,j,l} Y_l), \\ y_1 = \sum_{i=1}^{\nu} w_i Y_i, \end{cases}$$

onde se faz $Y_i = Y_i^{(1)}$, $i = 1, 2, \dots, \nu$.

Para que seja usada a teoria de P-Séries, se fará, como na Seção 3.2, a transformação de (4.2.4) num sistema particionado infinito de equações diferenciais. Com este objetivo, fixa-se:

$$(4.2.6) \quad A = \{\alpha_i : i = 0, 1, 2, \dots\} \cup \{x\}, \quad \text{com } \alpha = \alpha_0$$

e define-se:

$$(4.2.7) \quad \begin{cases} y_a(x) = y(x), \\ y_{a_i}(x) = g^{(i)}(x) + \int_{x_0}^x \frac{\partial^i}{\partial x^i} k(x, y(s)) ds, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \\ y_x(x) = x, \end{cases}$$

onde y é a solução de (4.2.4). Assim:

$$(4.2.8) \quad \begin{cases} y_{a_i}^{(1)} = \frac{\partial^i}{\partial x^i} k(y_x, y_a) + y_{a_{i+1}}, & i = 0, 1, 2, \dots, \\ y_x^{(1)} = 1; & y_x(x_0) = x_0, \end{cases}$$

onde: $f_{a_i} = y_{a_i}^{(1)}$ e $y_{a_i}(x_0) = g^{(i)}(x_0)$.

Observação 4.2.2 – Este sistema difere do correspondente sistema dado por (3.2.3) desde que, não se considere $g \equiv 0$ em (4.2.4).

Em vista disto, pode-se reescrever a Definição 3.2.1. da seguinte maneira.

Definição 4.2.2 – Como Árvores de Volterra (VA), entende-se como o menor subconjunto de PA, satisfazendo as seguintes condições:

i) – $\varphi_a \in VA$ (φ_a é a única árvore de ordem zero em PA).

ii) – $\sigma_k = a[a_1[\dots[a_k[\]]\dots]] \in VA$, para cada $k \geq 0$.

($\sigma_0 = a[\] = \tau_a$, é a única árvore de ordem um em PA).

iii) – Se $t_1, \dots, t_m \in VA$, $\rho(t_i) \geq 1$, então:

$$t = a[\underbrace{\tau_x, \tau_x, \dots, \tau_x}_k \text{ vezes}, t_1, t_2, \dots, t_m] = [\tau_x^k, t_1, t_2, \dots, t_m]$$

também está em VA, para cada $k \geq 0$.

Observe que o conjunto das VA assim definido, é maior que o conjunto das VA dado pela Definição 3.2.1.

Tomando por base a Definição 2.3.1 e fazendo $y_0 = (x_0, g(x_0), g^{(4)}(x_0), \dots)^T$, seguem-se os seguintes Teoremas:

Teorema 4.2.1 - Considerando a relação de equivalência em PA_α (árvores de PA com raízes indexadas por α), tal que $u \approx t$, se e somente se, $F(u)(y_0) = F(t)(y_0)$ para todas as funções g e k em (4.2.8) e denominando por $E(t)$ esta classe de equivalência de t , tem-se:

i) - $E(\varphi_\alpha) = \{\varphi_\alpha\}$.

ii) - $E(\sigma_k) = \{\sigma_k\}$, $k \geq 0$

iii) - $E([\tau_x^k]) = \{[\alpha_{\alpha_1} \dots \alpha_{\alpha_j} [\tau_x^{k-j}] \dots] : j = 0, 1, \dots, k-1\}$,

com $k \geq 1$,

iv) - Se $t = [\tau_x^k, t_1, t_2, \dots, t_m]$ com $m \geq 1$, $t_i \in VA$, $\rho(t_i) \geq 1$ e $k \geq 0$, então:

$$E(t) = \bigcup_{i=0}^k \{[\alpha_{\alpha_1} \dots \alpha_{\alpha_i} [\tau_x^{k-i}, u_1, \dots, u_m] \dots] : u_j \in E(t_j)\},$$

v) - Se $u, t \in VA$ e $u \neq t$, então $E(u) \neq E(t)$,

vi) - $u \notin \bigcup \{E(t) : t \in VA\} \iff F(u)(y_0) = 0$ para todas as funções g e k em (4.2.8).

Prova - Para i) e ii) a prova é imediata, porque $E(\varphi_\alpha)$ e $E(\sigma_k)$ têm apenas uma árvore cada, e estas por sua vez, são equivalentes a si mesmas. Para iii) e iv) separadamente, a prova é análoga a do Teorema 3.2.1. Para v), as três condições distintas da Definição 4.2.2, produzem V-Árvores distintas, implicando também em classes de equivalências distintas. Para vi), ainda da Definição 4.2.2, sendo $t \in VA$ é necessário que $w(t) = \alpha$. Se $w(t) \neq \alpha$, então $t \notin VA$ e $u \notin \bigcup \{E(t), t \in VA\}$ e assim, pelo Teorema 3.2.1, $F(u)(y_0) = 0$. ■

Teorema 4.2.2 - Para a solução exata da EIV (4.2.4), tem-se:

$$(4.2.9) \quad y(x_0 + h) = \sum_{t \in VA} \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!},$$

onde $\beta(t)$ pode ser computado recursivamente por:

$$(4.2.10) \quad \beta(\varphi_a) = 1,$$

$$(4.2.11) \quad \beta(\sigma_k) = 1, \quad k \geq 0,$$

$$(4.2.12) \quad \beta(\alpha[\tau_x^k]) = k, \quad k \geq 1,$$

$$(4.2.13) \quad \beta(t) = \frac{\rho(t)}{\rho(t) - k} \left[\underbrace{1, 1, \dots, 1}_{k \text{ vezes}}, \rho(t_1), \dots, \rho(t_m) \right] \cdot \frac{1}{\beta(t_1) \dots \beta(t_m) k! \mu_1! \mu_2! \dots},$$

onde, $t = \alpha[\tau_x^k, t_1, t_2, \dots, t_m]$, $m \geq 1$, $\rho(t_i) \geq 1$, $k \geq 0$ e $\mu_1, \mu_2, \dots$ são os números das P-Árvores mutuamente iguais entre, $t_1, \dots, t_m$.

Prova - Similar à do Teorema 3.2.2. ■

De modo a obter as condições de ordem do método (4.2.5), define-se:

Definição 4.2.3 - Para todo $\Psi: VA \rightarrow \mathbb{R}$, associa-se a série formal de potências:

$$(4.2.14) \quad V(\Psi(t), y_0) = \sum_{t \in VA} \Psi(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}.$$

Agora pode-se formular o resultado principal desta Seção.

Teorema 4.2.3 - Assumindo que:

$$(4.2.15) \quad \theta_i = c_i, \quad i = 1, 2, \dots, \nu,$$

$$(4.2.16) \quad \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{i,j,l} = 1 \quad \text{com} \quad \begin{cases} l = 1, 2, \dots, \nu, \\ j = 1, 2, \dots, \mu, \end{cases}$$

(A condição (4.2.16) pode ser obtida da Observação 4.2.1, item ii)), tem-se para as soluções numéricas de (4.2.5),

$$(4.2.17) \quad \begin{cases} Y_i = V(\Psi_i(t), y_0), & i = 1, 2, \dots, \nu, \end{cases}$$

$$(4.2.18) \quad \begin{cases} y_i = V(\Psi(t), y_0), \end{cases}$$

onde $\Psi_i, \Psi: VA \rightarrow \mathbb{R}$ são definidos recursivamente por:

$$(4.2.19) \quad \Psi_i(\varphi_\alpha) = 1,$$

$$(4.2.20) \quad \Psi_i(\sigma_k) = c_i^{k+1}, \quad k \geq 0,$$

$$(4.2.21) \quad \Psi_i(\alpha[\tau_x^k]) = \frac{1}{k} \left((k+1) \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij}^k - c_i^{k+1} \right), \quad k \geq 1,$$

$$(4.2.22) \quad \begin{aligned} \Psi_i(t) = & (\rho(t) - k) \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij}^k \left(\sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \Psi_l(t_1) \right) \dots \\ & \dots \left(\sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \Psi_l(t_m) \right). \end{aligned}$$

onde, $t = \alpha[\tau_x^k, t_1, t_2, \dots, t_m]$, $m \geq 1$, $\rho(t_i) \geq 1$, $k \geq 0$,

$$(4.2.23) \quad \Psi(t) = \sum_{i=1}^{\nu} w_i \Psi_i(t).$$

Prova - Definindo $\psi_{ij}: VA \rightarrow \mathbb{R}$ por:

$$(4.2.24) \quad \psi_{ij}(t) = \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \Psi_l(t), \quad \begin{cases} i = 1, 2, \dots, \nu \\ j = 1, 2, \dots, \mu \end{cases}$$

e $\phi_{ij}: PA \rightarrow \mathbb{R}$ por:

$$(4.2.25) \quad \phi_{ij}(t) = \begin{cases} \psi_{ij}(t) \frac{\beta(t)}{\alpha(t)} & \text{se } t \in VA, \\ d_{ij} & \text{se } t = \tau_x, \\ 1 & \text{se } t = \sigma_\alpha, \\ 0 & \text{nos demais casos,} \end{cases}$$

tem-se analogamente, ao que foi mostrado, na prova do Teorema 3.2.3,

$$P_\alpha(\phi_{ij}(t), y_0) = V(\psi_{ij}(t), y_0),$$

$$P_x(\phi_{ij}(t), y_0) = x_0 + d_{ij}h,$$

e $P_{\alpha_i}(\phi_{ij}(t), y_0) = g^{(i)}(x_0) = f_{\alpha_i}$, $i = 1, 2, \dots$,
 desde que aqui $g \neq 0$. Assim, de (4.2.8) e da Observação 2.4.1,
 item 1), escreve-se:

$$k(y_x, y_{\alpha}) + g^{(1)}(x_0) = f_{\alpha}(y_{\alpha}) = f_{\alpha}(P_{\alpha}(\phi_{ij}(t), y_0))$$

com $\phi_{ij}(\varphi_{\alpha}) = 1$.

Como $x = y_x = x_0 + d_{ij}h$ e $y_{\alpha} = V(\psi_{ij}(t), y_0)$, então:

$$k(x_0 + d_{ij}h, V(\psi_{ij}(t), y_0)) + g^{(1)}(x_0) = f_{\alpha}(P_{\alpha}(\phi_{ij}(t), y_0)),$$

$$hk(x_0 + d_{ij}h, V(\psi_{ij}(t), y_0)) + hg^{(1)}(x_0) = hf_{\alpha}(P_{\alpha}(\phi_{ij}(t), y_0)),$$

multiplicando por h ou,

(4.2.26)

$$hk(x_0 + d_{ij}h, V(\psi_{ij}(t), y_0)) + hg^{(1)}(x_0) = P_{\alpha}(\phi'_{ij}(t), y_0),$$

usando (2.4.3),

onde,

(4.2.27)

$$\phi'_{ij}(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } t = \varphi_{\alpha}, \\ 1, & \text{se } t = \tau_{\alpha}, \\ \rho(t)\phi_{ij}(t_1) \dots \phi_{ij}(t_m), & \text{se } t = z[t_1, t_2, \dots, t_m], z \in A \end{cases}$$

e será feito $\phi'_{ij}(t) = 0$, para todo $t \in PA_{\alpha} - VA$.

Deste modo (4.2.26) é escrito como:

$$(4.2.28) \quad P_{\alpha}(\phi'_{ij}(t), y_0) = V(\psi'_{ij}(t), y_0), \quad \text{usando (3.2.11),}$$

Desenvolvendo esta expressão, para todo $t \in VA$, vem:

$$\sum_{t \in PA} \phi'_{ij}(t) \alpha(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} = \sum_{t \in VA} \psi'_{ij}(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!},$$

e por comparação,

$$\phi'_{ij}(t) \alpha(t) = \psi'_{ij}(t) \beta(t) \Rightarrow \psi'_{ij}(t) = \frac{\alpha(t)}{\beta(t)} \phi'_{ij}(t), \quad \text{para todo } t \in VA.$$

Pelo Lema 2.2.3, por (2.2.1), (4.2.10), ..., (4.2.13) e (4.2.27) conclui-se que:

$$(4.2.29) \quad \psi'_{ij}(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } t = \varphi_a, \\ 1, & \text{se } t = \tau_a, \\ 0, & \text{se } t = \sigma_k, \quad k \geq 1, \\ \frac{k+1}{k} d_{ij}^k, & \text{se } t = \alpha[\tau_x^k], \quad k \geq 1, \\ (\rho(t) - k) d_{ij}^k \psi_{ij}(t_1) \dots \psi_{ij}(t_m), & \text{se } t \in VA^*, \end{cases}$$

onde,

$$VA^* = \{t \in VA : t = \alpha[\tau_x^k, t_1, \dots, t_m], \quad m \geq 1, \quad \rho(t_i) \geq 1, \quad k \geq 0\}.$$

Agora, será mostrado que:

$$Y_i = V(\Psi_i(t), y_0), \quad i = 1, 2, \dots, \nu, \quad \text{satisfaz (4.2.5).}$$

Seja,

$$(4.2.30) \quad R = g(x_0 + \theta_i h) + h \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} k(x_0 + d_{ij} h, \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} V(\Psi_l(t), y_0)).$$

Tomando (4.2.24) e multiplicando ambos os membros por

$$\beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \quad \text{vem:}$$

$$\psi_{ij}(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} = \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \Psi_l(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!},$$

com $i = 1, 2, \dots, \nu$ e $j = 1, 2, \dots, \mu$. Somando ambos os lados sobre $t \in VA$, resulta:

$$\begin{aligned} \sum_{t \in VA} \psi_{ij}(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} &= \sum_{t \in VA} \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \Psi_l(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \\ &= \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \sum_{t \in VA} \Psi_l(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \end{aligned}$$

$$(4.2.31) \quad V(\psi_{ij}(t), y_0) = \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} V(\Psi_l(t), y_0), \quad \text{usando (4.2.14).}$$

Substituindo agora, (4.2.31) junto com (4.2.15) em (4.2.30), obtem-se:

$$R = g(x_0 + c_i h) + h \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} k(x_0 + d_{ij} h, V(\psi_{ij}(t), y_0))$$

$$= g(x_0 + c_i h) + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} [P_a(\phi'_{ij}(t), y_0) - hg^{(1)}(x_0)], \quad \text{usando} \quad (4.2.26),$$

$$= g(x_0 + c_i h) + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} V(\psi'_{ij}(t), y_0) - \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} hg^{(1)}(x_0), \quad \text{usando} \quad (4.2.28),$$

$$= g(x_0 + c_i h) + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} V(\psi'_{ij}(t), y_0) - hg^{(1)}(x_0) \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij},$$

onde usando (4.2.2), resulta:

$$(4.2.32) \quad R = g(x_0 + c_i h) + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} V(\psi'_{ij}(t), y_0) - hg^{(1)}(x_0) c_i.$$

Desenvolvendo $g(x_0 + c_i h)$ pela Fórmula de Taylor e substituindo em (4.2.32), vem:

$$(4.2.33) \quad R = g(x_0) + \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{k+1} g^{(k+1)}(x_0) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} V(\psi'_{ij}(t), y_0).$$

Como por (4.2.8)

$$\begin{aligned} g^{(k+1)}(x_0) &= y_{a_{k+1}}(x_0) = y_{a_k}^{(1)}(x_0) - \frac{\partial^k}{\partial x^k} k(y_x, y_a), \\ &= f_{a_k}(y_0) - \frac{\partial^k}{\partial x^k} k(y_x, y_a) = F(\sigma_k)(y_0) - F(a[\tau_x^k])(y_0) \end{aligned}$$

resulta substituindo em (4.2.33),

$$\begin{aligned} R &= g(x_0) + \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{k+1} \left[F(\sigma_k)(y_0) - F(a[\tau_x^k])(y_0) \right] \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\ &\quad + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} V(\psi'_{ij}(t), y_0), \end{aligned}$$

$$= g(x_0) + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_i(\sigma_k) F(\sigma_k)(y_0) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} -$$

$$- \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{k+1} F(a[\tau_x^k])(y_0) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} V(\psi'_{ij}(t), y_0), \quad \text{usando} \quad (4.2.19).$$

Expandindo $V(\psi'_{ij}(t), y_0)$,

$$\begin{aligned}
R &= g(x_o) + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi(\sigma_k) F(\sigma_k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} - \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{k+1} F(\alpha[\tau_x^k])(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
&+ \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \psi'_{ij}(\varphi_a) \beta(\varphi_a) F(\varphi_a)(y_o) \frac{h^0}{0!} + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \psi'_{ij}(\tau_a) \beta(\tau_a) F(\tau_a)(y_o) \frac{h^1}{1!} + \\
&\quad + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{k=1}^{\infty} \psi'_{ij}(\sigma_k) \beta(\sigma_k) F(\sigma_k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
&\quad + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{k=1}^{\infty} \psi'_{ij}(\alpha[\tau_x^k]) \beta(\alpha[\tau_x^k]) F(\alpha[\tau_x^k])(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
&\quad + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{t \in VA^*} \psi'_{ij}(t) \beta(t) F(t)(y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \\
&= g(x_o) + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi(\sigma_k) F(\sigma_k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} - \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{k+1} F(\alpha[\tau_x^k])(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
&\quad + 0 + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \beta(\sigma_a) F(\sigma_a)(y_o) h + 0 + \\
&\quad + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k+1}{k} d_{ij}^k \beta(\alpha[\tau_x^k]) F(\alpha[\tau_x^k])(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
&\quad + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{t \in VA^*} (\rho(t) - k) d_{ij}^k (\psi_{ij}(t_1) \dots \psi_{ij}(t_m)) \beta(t) F(t)(y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \\
&\hspace{25em} \text{usando (4.2.29).}
\end{aligned}$$

Reordenando e usando (4.2.12) e (4.2.24) vem,

$$\begin{aligned}
R &= g(x_o) + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \beta(\sigma_a) F(\sigma_a)(y_o) h + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi(\sigma_k) F(\sigma_k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
&\quad + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k+1}{k} d_{ij}^k \beta(\alpha[\tau_x^k]) F(\alpha[\tau_x^k])(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{k+1} \frac{\beta(\tau_x^k)}{k} F(\tau_x^k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
& + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{t \in VA^*} (\rho(t) - k) d_{ij}^k \left(\sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \Psi_l(t_1) \dots \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \Psi_l(t_m) \right) \cdot \\
& \cdot \beta(t) F(t)(y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \\
& = g(x_o) + c_i F(\sigma_a)(y_o) h + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_i(\sigma_k) \beta(\sigma_k) F(\sigma_k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
& + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k+1}{k} d_{ij}^k \beta(\tau_x^k) F(\tau_x^k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} - \\
& - \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{k+1} \frac{\beta(\tau_x^k)}{k} F(\tau_x^k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
& + \sum_{t \in VA^*} \Psi_i(t) \beta(t) F(t)(y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \text{ usando (4.2.2), (4.2.11) e (4.2.22)} \\
& R = g(x_o) + \Psi_i(\tau_a) \beta(\tau_a) F(\tau_a)(y_o) h + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_i(\sigma_k) \beta(\sigma_k) F(\sigma_k) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
& + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \left((k+1) \sum_{j=1}^{\nu} \alpha_{ij} d_{ij}^k - c_i^{k+1} \right) \beta(\tau_x^k) F(\tau_x^k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
& + \sum_{t \in VA^*} \Psi_i(t) \beta(t) F(t)(y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \text{ usando (4.2.20),} \\
& = g(x_o) + \sum_{k=0}^{\infty} \Psi_i(\sigma_k) \beta(\sigma_k) F(\sigma_k) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
& + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi_i(\tau_x^k) \beta(\tau_x^k) F(\tau_x^k)(y_o) \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} + \\
& + \sum_{t \in VA^*} \Psi_i(t) \beta(t) F(t)(y_o) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \text{ usando (4.2.2).}
\end{aligned}$$

$R = V(\Psi_i(t), y_0)$, usando (4.2.14), o que satisfaz (4.2.5). ■

Observação 4.2.3 - A condição (4.2.15), é necessária para a validade de (4.2.17). Com este propósito, é notado que se isto não ocorresse no lado direito de (4.2.30), haveria a parcela $h(\theta_i - c_i)g^{(1)}(x_0)$ e assim, não existiria a possibilidade de isolar o termo contendo somente $g^{(1)}(x_0)$ na V-Série (4.2.14). Também pode-se argumentar heurísticamente a validade de (4.2.15) pela aplicação de (4.1.2) na equação,

$$y(x) = x - x_0 = \int_{x_0}^x ds \quad \text{que por um lado resulta,}$$

$$Y_i^{(n)} = y(x_{n-1} + \theta_i h) = x_{n-1} + \theta_i h - x_0$$

e por outro (aplicando o método-VRK),

$$Y_i^{(n)} = \int_{x_0}^{x_{n-1}} ds + h \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{i,j} = x_{n-1} - x_0 + hc_i.$$

Comparando os dois lados das duas expressões acima, se é levado à condição (4.2.15).

Agora, as condições de ordem para o método-VRK (4.1.2) podem ser obtidas pelo Teorema seguinte, o qual é uma consequência trivial de (4.2.1), Teorema 4.2.2 e Teorema 4.2.3.

Teorema 4.2.4 - Para a solução numérica de (4.2.4) o método-VRK (4.2.5), tem ordem p , se:

- i) - São verificadas as condições (4.2.15) e (4.2.16).
- ii) - $\Psi(t) = 1$ para todo $t \in VA$, tal que $\rho(t) \leq p$, onde $\Psi(t)$ é definido por (4.2.19)...(4.2.23).

Prova - É análoga ao do Teorema 3.2.5. ■

Corolário 4.2.1 - Assumindo que as hipóteses i) e ii) do Teo-

rema 4.2.4, sejam satisfeitas e em adição (4.2.2) e (4.2.3) se verificam, então o método-VRK (4.1.2) para a solução numérica da EIV (4.1.1) também tem ordem p .

Prova - Vide Observação 4.2.1. ■

Para ilustrar esta teoria, considere como exemplo, o cálculo da condição de ordem da árvore no. 11 da Tabela (4.2.1) (a seguir). Tem-se:

$$\begin{array}{c} x \\ \circ \\ \diagdown \\ \circ \\ \diagup \\ \circ \\ a \end{array} a \equiv t = a[a[\tau_x]] = a[t_1] \quad \text{onde} \quad t_1 = a[\tau_x].$$

$$\Psi_i(t_1) = \frac{1}{1}((1+1)\sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij}^1 - c_i^{1+1}) = 2\sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij} - c_i^2, \quad \text{usando} \quad (4.2.21).$$

$$\Psi(t) = \sum_{i=1}^{\nu} w_i \Psi_i(t) = \sum_{i=1}^{\nu} w_i (3-0) \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij}^0 \left(\sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \Psi_l(t_1) \right), \quad \text{usando} \quad (4.2.23).$$

Como $\Psi(t) = 1$ (condição de ordem), então:

$$1 = 3 \sum_{i=1}^{\nu} w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \left(2 \sum_{k=1}^{\mu} \alpha_{lk} d_{lk} - c_l^2 \right),$$

$$\sum_{i=1}^{\nu} w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \sum_{k=1}^{\mu} \alpha_{lk} d_{lk} = \frac{1}{3},$$

usando a condição de ordem da árvore no.10 da mesma Tabela.

Ordem $\rho(t)$	No.	Árvore t	Condição de Ordem $\Psi(t)$
0	1	ρ_a	$\sum_{i=1}^v w_i = 1$
1	2	ρ_a	$\sum_{i=1}^v w_i c_i = 1$
2	3		$\sum_{i=1}^v w_i c_i^2 = 1$
	4		$\sum_{i=1}^v w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij} = 1$
	5		$\sum_{i=1}^v w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} e_{ij} = \frac{1}{2}$
3	6		$\sum_{i=1}^v w_i c_i^3 = 1$
	7		$\sum_{i=1}^v w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij}^2 = 1$
	8		$\sum_{i=1}^v w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij} e_{ij} = \frac{1}{2}$
	9		$\sum_{i=1}^v w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} e_{ij}^2 = \frac{1}{3}$
	10		$\sum_{i=1}^v w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{l=1}^v \beta_{ijl} c_l^2 = \frac{1}{3}$
	11		$\sum_{i=1}^v w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{l=1}^v \beta_{ijl} \sum_{k=1}^{\mu} \alpha_{lk} d_{lk} = \frac{1}{3}$
	12		$\sum_{i=1}^v w_i \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{l=1}^v \beta_{ijl} \sum_{k=1}^{\mu} \alpha_{lk} e_{lk} = \frac{1}{6}$

Tabela 4.2.1

Observação 4.2.4 - Comparando as Tabelas 3.2.2 com 4.2.1, verifica-se fazendo:

$$\mu = \nu - 1 = m$$

$$\alpha_{ij} = a_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, m,$$

$$\alpha_{m+1,j} = b_j, \quad j = 1, 2, \dots, m,$$

$$d_{m+1,j} = e_j, \quad j = 1, 2, \dots, m,$$

$$e_{ij} = c_j, \quad i = 1, 2, \dots, m+1; \quad j = 1, 2, \dots, m,$$

$$\beta_{ijl} = \delta_{jl}, \quad i, l = 1, 2, \dots, m+1; \quad j = 1, 2, \dots, m,$$

$$w_i = \delta_{m+1,i}, \quad i = 1, 2, \dots, m+1, \quad -$$

$$c_{m+1} = 1,$$

$$\text{onde } \delta_{rs} = \begin{cases} 0 & \text{se } r \neq s \\ 1 & \text{se } r = s \end{cases},$$

que as condições de ordem do método-VRK (4.1.2) se reduz às condições de ordem do método-VRK (3.1.5).

4.3. HIPÓTESES SIMPLIFICADORAS - [BELLEN - 88]

Com o custo de algumas hipóteses adicionais, é possível simplificar as condições de ordem da Tabela 4.2.1. Isto será ilustrado para um método de ordem $p = 3$.

Aplicando (4.1.2) à equação

$$y(x) = g(x_0) + \int_{x_0}^x g^{(1)}(s) ds$$

cujas solução exata, é $Y(x) = g(x)$ e assumindo que Y_i é uma aproximação de $Y(x_0 + c_i h)$, é natural exigir para o método de ordem três, que:

$$Y(x_0 + c_i h) = g(x_0 + c_i h) = g(x_0) + h \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} g^{(1)}(x_0 + e_{ij} h) + O(h^4)$$

onde, desenvolvendo as parcelas $g(x_0 + c_i h)$ e $g^{(1)}(x_0 + e_{ij} h)$ por Taylor, resulta por comparação,

$$(4.3.1) \quad \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} e_{ij}^{q-1} = \frac{c_i^q}{q} \quad \text{para} \quad \begin{cases} q = 1, 2, 3, \\ \mu = 1, 2, \dots, m. \end{cases}$$

Usando a mesma idéia para com a equação

$$y(x) = g(x_0) + \int_{x_0}^x \frac{g(s) - g(x_0)}{s - x_0} ds$$

para a qual, a solução exata também é $Y(x) = g(x)$, escreve-se,

$$g(x_0 + c_i h) = g(x_0) + \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \frac{g(x_0 + d_{ij} h) - g(x_0)}{d_{ij}} + O(h^4),$$

onde, desenvolvendo as parcelas $g(x_0 + c_i h)$ e $g^{(1)}(x_0 + d_{ij} h)$ por Taylor, resulta por comparação

$$(4.3.2) \quad \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} d_{ij}^{q-1} = c_i^q \quad \text{para} \quad \begin{cases} q = 1, 2, 3, \\ \mu = 1, 2, \dots, m. \end{cases}$$

Analogamente, lembrando que Y_l é uma aproximação de $Y(x_0 + c_l h)$

e que $\sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} Y_l$ é uma aproximação de $Y(x_0 + e_{ij} h)$ e também é um

argumento do núcleo do método (4.1.2), é razoável supor que:

$$Y(x_0 + e_{ij} h) = \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} Y(x_0 + c_l h) + O(h^3)$$

onde, desenvolvendo as parcelas $Y(x_0 + c_l h)$ e $Y(x_0 + e_{ij} h)$ por Taylor, resulta por comparação

$$(4.3.3) \quad \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} c_l^q = e_{ij}^q \quad \text{para} \quad \begin{cases} q = 1, 2, 3, \\ \nu = 1, 2, \dots, m. \end{cases}$$

Pacientemente, segundo [BELLEN - 89], outras condições simplificadoras, além de (4.3.1), (4.3.2) e (4.3.3), poderiam ser construídas, bastaria para tanto, serem descobertas por tentativas, equações integrais bem específicas.

Assim, da Tabela 4.2.1, percebe-se que, quando são aplicadas as condições simplificadoras (4.3.1), (4.3.2) e (4.3.3), ocorre o seguinte esquema:

Ou seja: Aplicando a condição simplificadora (4.3.2) na condição de ordem da árvore nº 11, resulta a condição de ordem da árvore nº 10.

4.4. EXTENSÃO NATURAL CONTINUA DOS MÉTODOS-VRK

A implementação do método-VRK (4.1.2), pode exigir a cada passo, a avaliação da solução aproximada no interior do intervalo $[x_{n-1}, x_n]$. Este procedimento, será muito facilitado, caso se estenda a solução obtida nos pontos da malha para os pontos intermediários. Para tal, são exigidas funções contínuas que satisfaçam algumas propriedades requeridas e que não interfiram na ordem do método.

Definição 4.4.1 - Um método-VRK de ν -estágios e de ordem $p \geq 1$ tem uma ENC u de grau d , se existem polinômios w_i , $i = 1, 2, \dots, \nu$ de grau menor ou igual a d , independente das funções g e k , tal que, fazendo

$$(4.4.1) \quad u(x_{n-1} + \theta h_n) := \sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) Y_i^{(n)}, \quad \text{com } \theta \in [0, 1],$$

verificam-se as seguintes igualdades em cada sub-intervalo $[x_{n-1}, x_n]$, onde y_n é a solução local (ver Definição 4.2.1):

$$(4.4.2) \quad u(x_n) = y_n,$$

$$(4.4.3) \quad \max\{\|y_n(x) - u(x)\| : x_{n-1} \leq x \leq x_n\} = O(h_n^{d+1}),$$

$$(4.4.4) \quad \int_{x_{n-1}}^{x_n} G(x)(y_n(x) - u(x)) dx = O(h_n^{p+1}),$$

para toda a função matricial G suficientemente diferenciável.

Observação 4.4.1 - Como em geral $u(x_{n-1}) \neq y_{n-1}$, a ENC pode possuir descontinuidades nos pontos x_n da malha.

Sendo u um polinômio, a condição (4.4.3) implica no seguinte limitante do erro, para as derivadas da ENC u .

$$\max\{\|y_n^{(k)}(x) - u^{(k)}(x)\| : x_{n-1} \leq x \leq x_n\} = O(h_n^{d-k+1}),$$

com $k = 1, 2, \dots, d$ e obviamente, $u^{(k)}(x) = 0$ para todo $k \geq d+1$.

É interessante notar que, se a ENC u tem grau $d = p-1$, então (4.4.4) segue diretamente de (4.4.3). Mais ainda, se $d = p$ (o que, será mostrado no próximo Teorema, é o maior grau possível de u), então a ENC, satisfaz a condição mais forte,

$$(4.4.5) \quad \int_{x_{n-1}}^{x_n} G(x) (y_n(x) - u(x)) dx = O(h_n^{p+2}).$$

Será assumido (4.2.2) e (4.2.3) e tal como na seção anterior, este estudo será confinado ao intervalo $[x_0, x_0 + h]$. De imediato é escrita a versão contínua de (4.2.9).

$$(4.4.6) \quad y(x_0 + \theta h) = \sum_{t \in VA} \beta(t) F(t) (y_0) \frac{(\theta h)^{\rho(t)}}{\rho(t)!}.$$

Teorema 4.4.1 - Se existe uma ENC u , então em vista de (4.4.1),

$$(4.4.7) \quad u(x_0 + \theta h) = V(\Psi(\theta), y_0)$$

onde,

$$(4.4.8) \quad \Psi(\theta)(t) = \sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) \Psi_i(t), \quad \text{com } t \in VA.$$

Prova - De (4.4.1)

$$\begin{aligned} u(x_0 + \theta h) &= \sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) Y_i^{(1)}, \\ &= \sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) V(\Psi_i(t), y_0), \quad \text{usando (4.2.17)} \end{aligned}$$

$$= \sum_{t \in VA} \sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) \Psi_i(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \text{ usando (4.2.14)}$$

(4.4.9)

$$u(x_0 + \theta h) = \sum_{t \in VA} \Psi(\theta)(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \quad \text{usando (4.4.8),}$$

$$= V(\Psi(\theta), y_0), \quad \text{usando novamente (4.2.14).} \quad \blacksquare$$

Observação 4.4.2 -

i) - Fazendo $\theta = 1$ em (4.4.9), usando (4.4.2) e comparando com (4.2.18), vem,

$$(4.4.10) \quad \Psi(1)(t) = \Psi(t) \quad \text{para } t \in VA.$$

ii) - Fazendo também $\theta = 1$ e comparando (4.4.8) com (4.2.23), resulta,

$$(4.4.11) \quad w_i(1) = w_i \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, \nu.$$

iii) - Comparando ainda, (4.4.6) (solução exata) com (4.4.9) (solução aproximada estendida), escreve-se,

$$(4.4.12) \quad \Psi(\theta)(t) = \theta^{\rho(t)}, \quad \theta \in [0, 1],$$

para todo $t \in VA$, tal que $0 \leq \rho(t) \leq d$.

iv) - Tanto de (4.4.10), usando o Teorema 4.2.4, item ii) como de (4.4.12), fazendo $\theta = 1$, vem,

$$\Psi(1)(t) = 1.$$

A condição (4.4.4) da Definição 4.4.1, será re-escrita, para uso posterior, numa forma mais conveniente. Para isto, em (4.4.4), se $x \in [x_0, x_0 + h]$, toma-se $x = x_0 + \theta h$ e $G(x) = [(x - x_0)/h]^r = \theta^r$, com r a ser determinado. Assim,

1

$$\int_0^1 \theta^r \left[\sum_{t \in VA} \beta(t) F(t)(y_0) \frac{(\theta h)^{\rho(t)}}{\rho(t)!} - \right.$$

$$\left. - \sum_{t \in VA} \Psi(\theta)(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} \right] h d\theta = O(h_0^{p+1}) = O(h^{p+1}),$$

$$\sum_{t \in VA} \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} \int_0^1 (\theta^{r+\rho(t)} - \theta^r \Psi(\theta)(t)) d\theta = O(h^p),$$

onde até ordem $p-1$, este resultado, deve ser exato, logo,

$$\int_0^1 \theta^{r+\rho(t)} d\theta = \int_0^1 \theta^r \Psi(\theta)(t) d\theta \quad \text{e assim,}$$

vale a condição:

$$(4.4.13) \quad \int_0^1 \theta^r \Psi(\theta)(t) d\theta = \int_0^1 \theta^{r+\rho(t)} d\theta = \frac{1}{r+\rho(t)+1}, \quad \text{para todo}$$

$t \in VA$, tal que $d+1 \leq \rho(t) \leq p-1$ e $r = 0, 1, \dots, p-\rho(t)-1$.

Definindo agora o inteiro $q = [\frac{p}{2}]$, onde $[x]$, representa a parte inteira de x , e sendo ν^* o número de valores distintos de c_i , $i = 1, 2, \dots, \nu$ (vide 4.2.15), pode-se obter os seguintes resultados a respeito da existência das ENC.

Teorema 4.4.2 - Se u é uma ENC do método-VRK (4.1.2) de ν -estágios de ordem p então seu grau d satisfaz a condição:

$$(4.4.14) \quad q \leq d \leq \min\{\nu^*-1, p\}.$$

Além disto, os polinômios w_i , $i = 1, 2, \dots, \nu$, geram o espaço Π_d dos polinômios de grau menor ou igual a d .

Prova - Observe que (4.2.1), (4.4.2) e (4.4.3), implicam que,
(4.4.15) $d \leq p$.

De (4.4.8),

$$\sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) \Psi_i(\varphi_\alpha) = \Psi(\theta)(\varphi_\alpha), \quad \text{fazendo } t = \varphi_\alpha,$$

$$\sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) \cdot 1 = \theta^0, \quad \text{usando (4.2.19) e (4.4.12).}$$

Portanto,

$$(4.4.16) \quad \sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) = 1.$$

Analogamente:

De (4.4.8),

$$\sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) \Psi_i(\sigma_k) = \Psi(\theta)(\sigma_k), \quad \text{fazendo } t = \sigma_k,$$

$$(4.4.17) \quad \sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) c_i^{k+1} = \theta^{k+1}, \quad \text{usando (4.2.20) e (4.2.12).}$$

De modo que (4.4.17), inclua (4.4.16), fazemos $k := k + 1$ em (4.4.17) e assim,

$$(4.4.18) \quad \sum_{i=1}^{\nu} w_i(\theta) c_i^k = \theta^k \quad \text{para } k = 0, 1, \dots, d.$$

Definindo as matrizes:

$$W = [w_i(\theta_j)] \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, \nu \quad \text{e } j = 0, 1, \dots, d,$$

$$C = [c_i^k] \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, \nu \quad \text{e } k = 0, 1, \dots, d,$$

$$\Theta = [\theta_j^k] \quad \text{para } j = 0, 1, \dots, d \quad \text{e } k = 0, 1, \dots, d,$$

as quais têm as formas:

$$W = \begin{pmatrix} w_1(\theta_0) & w_2(\theta_0) & \dots & w_\nu(\theta_0) \\ w_1(\theta_1) & w_2(\theta_1) & \dots & w_\nu(\theta_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ w_1(\theta_d) & w_2(\theta_d) & \dots & w_\nu(\theta_d) \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} c_1^0 & c_1^1 & \dots & c_1^d \\ c_2^0 & c_2^1 & \dots & c_2^d \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_\nu^0 & c_\nu^1 & \dots & c_\nu^d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & c_1^1 & \dots & c_1^d \\ 1 & c_2^1 & \dots & c_2^d \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & c_\nu^1 & \dots & c_\nu^d \end{pmatrix} \quad \text{e}$$

$$\Theta = \begin{pmatrix} \theta_0^0 & \theta_0^1 & \dots & \theta_0^d \\ \theta_1^0 & \theta_1^1 & \dots & \theta_1^d \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \theta_d^0 & \theta_d^1 & \dots & \theta_d^d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \theta_0^1 & \dots & \theta_0^d \\ 1 & \theta_1^1 & \dots & \theta_1^d \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \theta_d^1 & \dots & \theta_d^d \end{pmatrix}$$

onde, os θ_j são abscissas distintas no intervalo $[0, 1]$, ($\theta_0^0 = 1$) então (4.4.18) pode ser escrito como:

$$WC = \Theta$$

onde:

$$\begin{aligned}\text{posto } W &= \min(d+1, \nu) \\ \text{posto } C &= \min(d+1, \nu^*) \\ \text{posto } \Theta &= d+1\end{aligned}$$

Por argumentos de Álgebra Linear,

$$\text{posto } \Theta \leq \min\{\text{posto } W, \text{posto } C\},$$

$$\begin{aligned}d+1 &\leq \min\{\min(d+1, \nu), \min(d+1, \nu^*)\}, \\ &\leq \min(d+1, \nu^*), \\ &\leq \nu^*,\end{aligned}$$

$$(4.4.19) \quad d \leq \nu^* - 1.$$

Para que se possa provar que $q \leq d$, observe que para $\rho(t) = d + 1$ a condição (4.4.15) deve ser respeitada para cada $r = 0, 1, \dots, p - \rho(t) - 1$ ou $r = 0, 1, \dots, p - d$. Isto implica em haver $p - d + 1$ condições linearmente independentes para os polinômios $w(\theta)$, cujo grau é $\leq d$. Assim, deve-se ter:

$$p - d + 1 \leq d + 1,$$

$$p \leq 2d,$$

$$\frac{p}{2} \leq d,$$

$$\left[\frac{p}{2}\right] \leq d,$$

$$(4.4.20) \quad q \leq d.$$

Unindo (4.4.14), (4.4.18) e (4.4.19), vem:

$$q \leq d \leq \min\{\nu^* - 1, p\}.$$

■

Lema 4.4.1 - Se n é um inteiro, tal que, $q \leq n \leq p-1$ (isto, deve ser verdadeiro para $p \geq 2$), então, existe uma projeção linear P_n do espaço C^0 das funções contínuas em $[0, 1]$, sobre o espaço Π_n dos polinômios de grau $\leq n$, tal que:

$$(4.4.21) \quad \begin{cases} P_n f(1) = f(1), \\ \int_0^1 \theta^r P_n f(\theta) d\theta = \int_0^1 \theta^r f(\theta) d\theta \quad \text{com } r = 0, 1, \dots, p-n-2, \end{cases}$$

Esta última condição, não deve ser considerada se $n = p-1$.

Prova - Se $q \leq n \leq p-1$, onde $q = [\frac{p}{2}]$, então:

$$[\frac{p}{2}] \leq n \leq p-1,$$

$$1 \leq p-n \leq p-[\frac{p}{2}],$$

$$1 \leq p-n \leq [\frac{p}{2}]+1, \quad \text{desde que } p-[\frac{p}{2}] \leq [\frac{p}{2}]+1 \text{ ou,}$$

$$1 \leq p-n \leq q+1,$$

$$1 \leq p-n \leq n+1,$$

usando a hipótese e

portanto o valor máximo de r é:

$$r_{\max} = p-n-2 = n+1-2 = n-1.$$

Logo, existem n condições linearmente independentes, que podem ser escolhidas em (4.4.21), para gerar o espaço Π_n . ■

Teorema 4.4.3 - Se o método-VRK (4.1.2) de ν -estágios de ordem p tem uma ENC u com grau $d \geq q$, então ele também tem uma ENC $\tilde{u}$ com grau n para cada $n = q, q+1, \dots, d-1$.

Prova - Como $q \leq n \leq d-1 \leq p-1$, então pelo Lema 4.4.1, é verificada a existência do operador linear P_n de modo que (4.4.21), seja satisfeito. Fazendo,

$$(4.4.22) \quad \tilde{w}_i(\theta) := P_n w_i(\theta)$$

e considerando analogamente a (4.4.1) o polinômio

$$\tilde{u}(x_0 + \theta h) := \sum_{i=1}^{\nu} \tilde{w}_i(\theta) Y_i, \quad \text{com } \theta \in [0,1] \text{ e } Y_i^{(1)} = Y_i, \quad \text{vem:}$$

$$:= \sum_{i=1}^{\nu} P_n w_i(\theta) Y_i, \quad \text{usando (4.4.22),}$$

$$:= \sum_{i=1}^{\nu} P_n w_i(\theta) V(\Psi_i(t), y_0), \quad \text{usando (4.2.17),}$$

$$:= \sum_{i=1}^{\nu} P_n w_i(\theta) \sum_{t \in VA} \Psi_i(t) \beta(t) F(t) (y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \quad \text{usando (4.2.14)}$$

$$:= \sum_{t \in VA} P_n \Psi(\theta)(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!}, \quad \text{usando (4.4.8).}$$

e assim, definir

$$(4.4.23) \quad \tilde{\Psi}(\theta)(t) := P_n \Psi(\theta)(t), \quad \text{para cada } n = q, q+1, \dots, d-1.$$

de modo que exista

$$\tilde{u}(x_0 + \theta h) := \sum_{t \in VA} \tilde{\Psi}(\theta)(t) \beta(t) F(t)(y_0) \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!},$$

tal com em (4.4.9). ■

Teorema 4.4.4 - Se (4.4.13) se verifica para u , então também para u ,

$$(4.4.24) \quad \int_0^1 \theta^r \tilde{\Psi}(\theta)(t) d\theta = \frac{1}{r + \rho(t) + 1},$$

para todo $t \in VA$, $n+1 \leq \rho(t) \leq p-1$ e $r = 0, 1, \dots, p - \rho(t) - 1$.

Prova - Como $\rho(t) \geq n+1$,

$$p - \rho(t) \leq p - n - 1,$$

$$p - \rho(t) - 1 \leq p - n - 2,$$

logo

$$r_{\max} = p - n - 2.$$

Assim, pelo Lema 4.4.1,

$$\begin{aligned} \int_0^1 \theta^r \tilde{\Psi}(\theta)(t) d\theta &= \int_0^1 \theta^r P_n \Psi(\theta)(t) d\theta, \quad \text{usando (4.4.23),} \\ &= \int_0^1 \theta^r \Psi(\theta)(t) d\theta, \quad \text{usando (4.4.21),} \\ &= \frac{1}{r + \rho(t) + 1}, \quad \text{usando (4.4.13).} \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Lema 4.4.2 - Para cada inteiro $s \geq 1$, o sistema,

$$(4.4.25) \quad \sum_{n=1}^s \lambda_{s,n} \frac{\rho!}{(\rho+n)!} = \frac{1}{\rho+s} \quad \text{para cada } \rho \geq 0$$

tem uma única solução $\lambda_{s,1}, \lambda_{s,2}, \dots, \lambda_{s,s}$. E mais, vale também a fórmula de recorrência,

$$(4.4.26) \quad \lambda_{s,1} = 1 \quad \text{e} \quad \lambda_{s+1,n+1} = -s\lambda_{s,n}, \quad \text{para todo } s, n \geq 1.$$

Prova - Para $s = 1$, (4.4.25) é verificada com $\lambda_{1,1} = 1$. Para $s \geq 2$, multiplicando (4.4.25) por $\frac{(\rho+s)!}{\rho!}$, obtem-se:

$$(4.4.27) \quad \sum_{n=1}^s \lambda_{s,n} \frac{(\rho+s)!}{(\rho+n)!} = \frac{1}{\rho+s} \cdot \frac{(\rho+s)!}{\rho!},$$

Fazendo,

$$Q_s(\rho) = \frac{(\rho+s-1)!}{\rho!} \quad \text{e} \quad P_{s,n}(\rho) = \frac{(\rho+s)!}{(\rho+n)!}, \quad \text{com } n = 1, 2, \dots, s,$$

escreve-se (4.4.27) como:

$$\sum_{n=1}^s \lambda_{s,n} P_{s,n}(\rho) = Q_s(\rho),$$

Como o grau de $Q_s(\rho)$ é $s-1$ e o grau de $P_{s,n}$ é $s-n$, obtem-se de imediato que $\lambda_{s,1} = 1$ e que, para $n = 2, \dots, s$ os $\lambda_{s,n}$ são, recursivamente, dados pelo primeiro coeficiente com grau $s-n$ dos polinômios

$$Q_s - \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_{s,k} P_{s,k}$$

(porque $s-n$ é o grau de $P_{s,n}$ e os $\lambda_{s,k}$ multiplicam estes $P_{s,k}$).

Para provar (4.4.26), fixa-se $s \geq 1$ e define-se $\lambda_{s+1,1} = 1$ e para, $n = 1, \dots, s$, $\lambda_{s+1,n+1} = -s\lambda_{s,n}$. Por indução em (4.4.25), vem:

$$\sum_{n=1}^{s+1} \lambda_{s+1,n} \frac{\rho!}{(\rho+n)!} = \frac{1}{\rho+1} + \sum_{n=1}^s \lambda_{s+1,n+1} \frac{\rho!}{(\rho+n+1)!},$$

$$= \frac{1}{\rho+1} + \sum_{n=1}^s (-s\lambda_{s,n}) \frac{(\rho+1)!}{(\rho+1)(\rho+n+1)!}, \quad \text{usando} \\ (4.4.26),$$

$$= \frac{1}{\rho+1} - \frac{s}{\rho+1} \sum_{n=1}^s \lambda_{s,n} \frac{(\rho+1)!}{(\rho+n+1)!}, \\ = \frac{1}{\rho+1} - \frac{s}{\rho+1} \cdot \frac{1}{\rho+s+1} = \frac{1}{\rho+s+1},$$

que também verifica (4.4.25).

Pela unicidade da solução $\lambda_{s+1,1}, \dots, \lambda_{s+1,s+1}$, completa-se a prova. ■

Teorema 4.4.5 - Todo método-VRK de ordem p , tem uma ENC u de grau mínimo $d = q$.

Prova - Considerando a matriz A , cujos elementos são:

$$a_{il} = \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \beta_{ljl}, \quad i, l = 1, 2, \dots, \nu,$$

e considerando também para todo $s \geq 1$, os números $\lambda_{s,n}$ com $n = 1, 2, \dots, s$, que satisfazem o Lema 4.4.2, define-se os polinômios w_i de grau menor ou igual a q com $i = 1, 2, \dots, \nu$, por:

$$(4.4.28) \begin{cases} w_i(1) = w_i, \\ \int_0^1 \theta^r w_i(\theta) d\theta = \sum_{n=1}^{r+1} \lambda_{r+1,n} [(A^T)^n w]_i, \text{ para } r = 0, 1, \dots, q-1, \\ 0 \end{cases}$$

onde $w := [w_1, w_2, \dots, w_\nu]^T$, e $[(A^T)^n w]_i$ é a i -ésima componente do vetor $(A^T)^n w$. A segunda condição não deve ser considerada para $q = 0$, isto é, $p = 1$, pois neste caso o teorema é trivial. Observa-se que os polinômios w_i , $i = 1, 2, \dots, \nu$ são unicamente determinados pela condição (4.4.28). Para $q \geq 1$, isto é, para $p \geq 2$, será provado que a aplicação $\Psi(\theta): VA \rightarrow \mathbb{R}$ com $\theta \in [0, 1]$, definida por (4.4.7), com os w_i determinados por (4.4.28), satisfaz (4.4.10), (4.4.12) e (4.4.13). Por (4.4.11) a primeira condição de (4.4.28) é imediata. Se for possível

provar que:

$$(4.4.29) \quad \int_0^1 \theta^r \Psi(t) d\theta = \frac{1}{r+\rho(t)+1},$$

para $0 \leq \rho(t) \leq p-1$ e $r = 0, 1, \dots, \min\{q-1, p-\rho(t)-1\}$ então desde que em (4.4.14) $d = q$ (assim, para $\rho(t) \geq q+1$, tem-se $p-\rho(t)-1 \leq q-1$), também se estará provando (4.4.14). Além do mais, (4.4.10) e (4.4.29) implicam em (4.4.12). Na verdade, neste caso, para $\rho(t) \leq q$ o polinômio $\Psi(\theta)(t) - \theta^{\rho(t)}$ de grau menor ou igual a q , está no núcleo dos $q+1$ funcionais linearmente independentes sobre Π_q e assim, ele deve ser identicamente nulo. Para se provar (4.4.29), considere uma P-Árvore $t \in VA$, tal que $0 \leq \rho(t) \leq p-1$ e um inteiro r , com $0 \leq r \leq \min\{q-1, p-\rho(t)-1\}$.

Multiplicando (4.4.8) por $\theta^r d\theta$ e integrando para $\theta \in [0, 1]$, vem:

$$\begin{aligned} \int_0^1 \theta^r \Psi(\theta)(t) d\theta &= \int_0^1 \theta^r \left[\sum_{i=1}^v w_i(\theta) \Psi_i(t) \right] d\theta = \sum_{i=1}^v \left[\int_0^1 \theta^r w_i(\theta) d\theta \right] \Psi_i(t), \\ &= \sum_{i=1}^v \sum_{n=1}^{r+1} \lambda_{r+1,n} [(A^T)^n w]_i \Psi_i(t), \quad \text{onde é usada a} \end{aligned}$$

segunda equação de (4.4.28).

Assim,

$$(4.4.30) \quad \int_0^1 \theta^r \Psi(\theta)(t) d\theta = \sum_{n=1}^{r+1} \lambda_{r+1,n} \sum_{i=1}^v [(A^T)^n w]_i \Psi_i(t).$$

Para $n = 1, 2, \dots, r+1$, define-se a P-Árvore $t_n := \underbrace{[a [\dots [t] \dots]]}_{n \text{ vezes}} \in VA$ com $\rho(t_n) = \rho(t) + n \leq p$,

ou seja a P-Árvore:

$$\begin{aligned} t_1 &= a[t] \\ t_2 &= a[t_1] \\ &\vdots \\ t_n &= a[t_{n-1}] \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned} \Psi_i(t_n) &= (\rho(t) + n) \dots (\rho(t) + z) (\rho(t) + 1) \left[\sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} \sum_{l=1}^{\nu} \beta_{ijl} \right. \\ &\quad \left. \cdot \sum_{m=1}^{\mu} \alpha_{lm} \sum_{n=1}^{\nu} \beta_{lmn} \dots \sum_{x=1}^{\mu} \alpha_{vx} \sum_{z=1}^{\nu} \beta_{vxz} \right] \Psi_i(t) \\ \Psi(t_n) &= \frac{(\rho(t) + n)!}{\rho(t)!} \sum_{i=1}^{\nu} [(A^T)w]_i^n \Psi_i(t), \quad \text{usando (4.2.23).} \end{aligned}$$

Assim, assumindo que o método (4.1.2) tem ordem p , devemos ter $\Psi(t_n) = 1$ e portanto:

$$(4.4.31) \quad \sum_{i=1}^{\nu} [(A^T)w]_i^n \Psi_i(t) = \frac{\rho(t)!}{(\rho(t) + n)!},$$

Substituindo esta expressão em (4.4.30), vem:

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^{r\theta} \Psi(\theta)(t) d\theta &= \sum_{n=1}^{r+1} \lambda_{r+1,n} \frac{\rho(t)!}{(\rho(t) + n)!}, \\ &= \frac{1}{\rho(t) + r + 1}, \quad \text{usando (4.4.25),} \end{aligned}$$

e isto completa a prova. ■

4.5 - APROXIMAÇÕES PARA A CAUDA

Tal como em [HARIER - 83], [HOUWEN - 80] e [HOUWEN - 81], diferentes tipos de aproximações numéricas para a cauda $F_n(x)$ têm sido propostas. Estas basicamente, podem ser divididas em duas classes de métodos: Estendidos e Mistos. Aqui, será apresentado um novo tipo de aproximação para $F_n(x)$, distinto daquele dado por (3.1.8), usando para tal, as ENCs

apresentadas na Seção anterior.

Será preciso o Lema:

Lema 4.5.1 - Seja u uma ENC (com grau d) do método-VRK (4.1.2) de ordem p , para a solução numérica de (4.1.1). Assim, em cada sub-intervalo $[x_{n-1}, x_n]$,

$$(4.5.1) \quad \int_{x_{n-1}}^{x_n} [k(x, s, y_n(s)) - k(x, s, u(s))] ds = O(h_n^r),$$

onde,

$$(4.5.2) \quad r = \begin{cases} p+1, & \text{se é verificado (4.4.4),} \\ p+2, & \text{se é verificado (4.4.5).} \end{cases}$$

Aqui, y_n é a solução local da Definição (4.2.1).

Prova - Tomando k suficientemente diferenciável, tal como fora assumido em (4.1.1), usando a série de Taylor, escreve-se:

$$\begin{aligned} k(x, s, y_n(s)) &= k(x, s, u(s)) + \frac{\partial k(x, s, u(s))}{\partial y} \cdot (y_n(s) - u(s)) + \\ &\quad + \frac{\partial^2 k(x, s, u(s))}{\partial y^2} \cdot \frac{(y_n(s) - u(s))^2}{2!} + \dots, \\ &= k(x, s, u(s)) + \frac{\partial k(x, s, u(s))}{\partial y} \cdot (y_n(s) - u(s)) + \\ &\quad + O(h_n^{2d+2}), \quad \text{usando (4.4.3).} \end{aligned}$$

Integrando no intervalo $[x_{n-1}, x_n]$, vem:

$$\begin{aligned} \int_{x_{n-1}}^{x_n} [k(x, s, y_n(s)) - k(x, s, u(s))] ds &= \int_{x_{n-1}}^{x_n} \frac{\partial k(x, s, u(s))}{\partial y} \cdot \\ &\quad \cdot (y_n(s) - u(s)) ds + O(h_n^{2d+3}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{x_{n-1}}^{x_n} G(s) (y_n(s) - u(s)) ds + \\
&\quad + O(h_n^{2d+3}), \\
&= O(h_n^r) + O(h_n^{2d+3}), \quad \text{usando} \\
&\quad (4.4.4) \text{ ou } (4.4.5), \\
&= O(h_n^r) + O(h_n^v), \quad r \text{ dado por} \\
&\quad (4.5.2)
\end{aligned}$$

Como

$$\begin{aligned}
v &= 2d+3, \\
&\geq 2q+3, \quad \text{usando (4.4.14),} \\
&\geq 2\left[\frac{p}{2}\right]+3 = 2\left[\frac{p}{2}\right]+1+2 \\
&\geq p+2, \\
&\geq r, \quad \text{usando (4.4.4) ou (4.4.5),}
\end{aligned}$$

logo,

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} [k(x, s, y_n(s)) - k(x, s, u(s))] ds = O(h_n^r). \quad \blacksquare$$

Considere agora, no intervalo $[0,1]$, uma regra de quadratura de ordem polinomial maior ou igual a $r-2$, com pesos $v_1, v_2, \dots, v_m$, e abscissas $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$. Assim, desde que todas as derivadas da ENC u estão uniformemente limitadas quando $h_n \rightarrow 0$, então por (4.5.1), obtem-se:

(4.5.3)

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} (k(x, s, y_n(s))) ds - h_n \sum_{j=1}^m v_j k(x, x_{n-1} + \xi_j h_n, u(x_{n-1} + \xi_j h_n)) = O(h_n^r)$$

onde r é dado por (4.5.2).

Em [BELLEN - 89] é proposta a seguinte aproximação para a Cauda,

$$(4.5.4) \quad \tilde{F}_n(x) = g(x) + \sum_{k=1}^{n-1} h_k \sum_{j=1}^m v_j k(x, x_{k-1} + \xi_j h_k, u(x_{k-1} + \xi_j h_k)).$$

Com a proposta (4.5.4), tem-se o seguinte re-

sultado para o erro global.

Teorema 4.5.1 - Segundo [BELLEN - 88] e [HARRIER - 83], o erro global para o método-VRK (4.1.2) de ordem p , com ENC, para a solução numérica de (4.1.1), com aproximação de Cauda dada por (4.5.4), satisfaz

$$\max\{\|y(x_n) - y_n\| : 1 \leq n \leq N\} = O(h^{r-1})$$

onde $h = \max\{h_n : 1 \leq n \leq N\}$ e r é dado por (4.5.2).

Prova - Para o erro global, vem:

$$\begin{aligned} \max\{\|y(x_n) - y_n\| : 1 \leq n \leq N\} &= |y(x_k) - y_k| \\ &= |y(x_k) - y_k(x_k) + y_k(x_k) - y_k| \\ &\leq |y(x_k) - y_k(x_k)| + |y_k(x_k) - y_k| \\ &\leq O(h_k^{p+1}) + |y(x_k) - y_k(x_k)|, \\ &\quad \text{usando (4.2.1)}. \end{aligned}$$

Tomando

$$\begin{aligned} y(x_k) &= F_k(x_k) + \int_{x_{k-1}}^{x_k} k(x, s, y(s)) ds \quad e \\ y_k(x_k) &= \tilde{F}_k(x_k) + \int_{x_{k-1}}^{x_k} k(x, s, y(s)) ds, \quad \text{escreve-se:} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \max\{\|y(x_n) - y_n\| : 1 \leq n \leq N\} &\leq O(h_k^{p+1}) + |F_k(x_k) - \tilde{F}_k(x_k)| \\ &\leq O(h_k^{p+1}) + O(h_k^{r-1}), \quad \text{usando} \\ &\quad (4.5.3), \end{aligned}$$

$$\max\{\|y(x_n) - y_n\| : 1 \leq n \leq N\} = O(h^{r-1}), \quad \text{usando (4.5.2)}. \quad \blacksquare$$

Observação 4.5.1 - O inteiro $r-1$ é a ordem global do método-VRK (4.1.2). Em geral, este é igual a ordem p . No entanto, se a ENC satisfizer a condição (4.4.5), então a ordem global é maior e é igual a ordem local $p+1$.

4.6 - MÉTODOS DE COLOCAÇÃO

Nesta Seção, será estudada uma classe de métodos de Colocação para a solução numérica de (4.1.1). Estes métodos foram investigados em detalhe por [BRUNNER - 81].

Para definir um método de Colocação, escolhe-se ν pontos de colocação $0 \leq c_1 \leq c_2 \leq \dots \leq c_\nu \leq 1$, e define-se em cada sub-intervalo $[x_{n-1}, x_n]$ um polinômio u de grau $\nu-1$, pelas equações:

$$(4.6.1) \quad \tilde{u}(x_{n-1} + c_i h_n) = g(x_{n-1} + c_i h_n) + \int_{x_0}^{x_{n-1} + c_i h_n} k(x_{n-1} + c_i h_n, s, \tilde{u}(s)) ds,$$

$i = 1, 2, \dots, \nu$. Observe, a menos que $c_1 = 0$ e $c_\nu = 1$, que $\tilde{u}$ pode ter descontinuidades do tipo salto nos pontos x_n da malha.

Sejam dadas as regras de quadratura:

$$\int_0^{c_i} f(s) ds \cong \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} f(e_{ij}), \quad i = 1, 2, \dots, \nu,$$

$$\int_0^1 f(s) ds \cong \sum_{j=1}^m v_j f(\xi_j),$$

as quais são de ordem polinomial s_i , $i = 1, 2, \dots, \nu$, e t respectivamente. Naturalmente, $s_i \geq \mu-1$ e $t \geq m-1$. Na prática (4.6.1) é recolocada pela sua versão discretizada

$$(4.6.2) \quad u(x_{n-1} + c_i h_n) = \tilde{F}_n(x_{n-1} + c_i h_n) + h_n \sum_{j=1}^{\mu} \alpha_{ij} k(x_{n-1} + c_i h_n, x_{n-1} + e_{ij} h_n, u(x_{n-1} + e_{ij} h_n)),$$

$i = 1, 2, \dots, \nu$, onde $\tilde{F}_n(x)$ é dado por (4.5.4). Estabelecendo,

$$(4.6.3) \quad Y_i^{(n)} := u(x_{n-1} + c_i h_n), \quad i = 1, 2, \dots, \nu,$$

$$(4.6.4) \quad y_n := u(x_{n-1} + h_n),$$

$$(4.6.5) \quad \beta_{ijl} := L_l(e_{ij}), \quad i, l = 1, 2, \dots, \nu, \quad j = 1, 2, \dots, \mu,$$

$$(4.6.6) \quad w_i := L_i(1), \quad i = 1, 2, \dots, \nu,$$

onde os L_i são os polinômios fundamentais de Lagrange

$$(4.6.7) \quad L_i(\theta) := \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{\nu} \frac{(\theta - c_j)}{(c_i - c_j)},$$

o método de colocação (4.6.2) assume a forma (4.1.2) com $\theta_i = d_{ij} = c_i$, $i = 1, 2, \dots, \nu$, e $j = 1, 2, \dots, \mu$.

Será mostrado que o polinômio de colocação u é uma ENC do equivalente método VRK (4.1.2) desde que, as ordens polinomiais s_i e t das regras de quadratura empregadas para a discretização de (4.6.1) sejam suficientemente altas. Para tal, se tem o seguinte:

Teorema 4.6.1 - Assumindo que os pontos de colocação c_i que aparecem em (4.6.2) são as abscissas da regra de quadratura de ordem polinomial δ ($\delta \geq \nu-1$). Tem-se:

- i) - Se $c_\nu = 1$, $s_i \geq \delta$, $i = 1, 2, \dots, \nu$, e $t \geq \delta$, então o correspondente método-VRK (4.1.2) tem ordem $p=\delta+1$, u é uma ENC de grau $d=\nu-1$ e a ordem global do método também é $\delta+1$.
- ii) - Se $c_\nu < 1$, $s_i \geq \nu-2$, $i = 1, 2, \dots, \nu$, e $t \geq \nu-1$, então o correspondente método-VRK (4.1.2) tem ordem $p=\nu-1$, u é uma ENC de grau $d=\nu-1$, satisfazendo a condição (4.4.5), e a ordem global do método é $p+1=\nu$.

Prova - Em primeiro lugar é observado que por (4.6.3) u é dado por (4.4.1) com

$$(4.6.8) \quad w_i = L_i, \quad i = 1, 2, \dots, \nu,$$

onde os L_i são definidos por (4.6.7), e (4.6.4) é exatamente a condição (4.4.2). [BRUNNER - 81] mostrou que existe uma função $H_n(x, s)$, cujas derivadas são uniformemente limitadas quando $h_n \rightarrow 0$, tal que:

$$(4.6.9) \quad y_n(x) - u(x) = r_n(x) + \int_{x_{n-1}}^x H_n(x, s) r_n(s) ds,$$

$x \in [x_{n-1}, x_n]$. Aqui, y_n é a solução local dada na Definição 4.2.1 e r_n é um defeito local definido por

$$(4.6.10) \quad r_n(x) := \tilde{F}_n(x) + \int_{x_{n-1}}^x k(x,s,u(s))ds - u(x).$$

Através da análise elementar, prova-se que as derivadas da solução por colocação u são uniformemente limitadas quando $h_n \rightarrow 0$. Deste modo, comparando (4.6.10) com (4.6.2), obtem-se:

$$(4.6.11) \quad \max\{\|r_n(x_{n-1} + c_i h_n)\| : 1 \leq i \leq \nu\} = O(h_n^{s+2}),$$

onde

$$(4.6.12) \quad s := \min\{s_i : 1 \leq i \leq \nu\}.$$

Assim desde que r_n é suficientemente diferenciável,

$$\max\{\|r_n(x)\| : x_{n-1} \leq x \leq x_n\} = O(h_n^{\min(\nu, s+2)}),$$

e, por (4.6.9)

$$(4.6.13) \quad \max\{\|y_n(x) - u(x)\| : x_{n-1} \leq x \leq x_n\} = O(h_n^{\min(\nu, s+2)}).$$

Além disso, se G é uma função matricial suficientemente diferenciável então em vista de (4.6.9)

$$(4.6.14) \quad \int_{x_{n-1}}^{x_n} G(x)(y_n(x) - u(x))dx = \int_{x_{n-1}}^{x_n} R_n(x)r_n(x)dx,$$

onde,

$$R_n(x) := G(x) + \int_x^{x_n} G(s)H_n(s,x)ds.$$

- 1) - Desde que $c_\nu = 1$ e por (4.6.12) $s \geq \delta$, (4.6.4), (4.6.9), e (4.6.11) segue

$$(4.6.15) \quad y_n(x_n) - y_n = \int_{x_{n-1}}^{x_n} H_n(x_n, s)r_n(s)ds + O(h_n^{\delta+2}).$$

Por outro lado, os c_i são as abcissas da regra de quadratura de ordem polinomial δ sobre $[0,1]$, e assim por (4.6.11) e (4.6.15)

$$\|y_n(x_n) - y_n\| = O(h^{\delta+2}),$$

o que significa que $p = \delta+1$. Além disso, desde que $s+2 \geq \delta+2 \geq \nu+1$, (4.6.13) implica (4.4.3) com $d=\nu+1$, enquanto como antes (4.6.11) e (4.6.14) implicam em (4.4.4). Finalmente, em vista de (4.5.2) $t \geq \delta = p-1 = r-2$ e vem do Teorema 4.5.1 que a ordem global do método é $p = \delta+1$.

- ii) - Desde que $c_\nu < 1$ não se pode tirar vantagem de (4.6.11) para estimar a ordem do método. No entanto, desde que por (4.6.12) se tem $s \geq \nu-2$, da relação (4.6.13) segue

$$\|y_n(x_n) - y_n\| = O(h_n^\nu),$$

o que significa que a ordem do método (4.1.2) é $p = \nu-1$. Tem-se também (4.4.3) com $d = \nu-1$ e (4.4.5). Finalmente, em vista de (4.5.2) $t \geq \nu-1 = p = r-2$, e segue do Teorema 4.5.1 que a ordem global do método (4.1.2) é $p+1 = \nu$. ■

4.7 - APLICAÇÃO NUMÉRICA

Com o propósito de comparar os resultados obtidos nas Tabelas 3.1.1, 3.1.2 e 3.1.3, para a EIV

$$y(x) = \int_0^x (1 - \ln(x+1) + y(s)) ds,$$

foi construído um método-VRK (4.1.2) de ordem 2 e de 2-estágios, só que agora possuindo uma ENC do tipo Colocação. Com este objetivo fixou-se:

$\nu = 2$ $m = 2$ e $\mu = 1$ com $h_n = h$,
resultando,

$$\left\{ \begin{aligned} \tilde{F}_n(x) &= h \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=1}^2 (v_i k(x, x_{k-1} + \xi_i h, u(x_{k-1} + \xi_i h)), \\ u(x_{n-1} + \xi_i h) &= \sum_{i=1}^2 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^2 \frac{(\xi_i - c_j)}{(c_i - c_j)} Y_i^{(n)}, \\ Y_i^{(n)} &= \tilde{F}_n(x_{n-1} + \theta_i h) + \\ &\quad + h \alpha_{i1} k(x_{n-1} + d_{i1} h, x_{n-1} + e_{i1} h, \beta_{i11} Y_1^{(n)} + \beta_{i12} Y_2^{(n)}), \\ y &= \sum_{i=1}^2 w_i Y_i^{(n)}. \end{aligned} \right.$$

Para que fossem satisfeitas as condições de ordem da Tabela (4.2.1), juntamente com (4.2.15) e (4.2.16) foram adotados os seguintes parâmetros:

$$\alpha_{11} = 2\alpha_{21} = \beta_{112} = \beta_{122} = \beta_{211} = \beta_{222} = c_1 = 2c_2 = d_{11} = d_{12} = 2d_{21} = 2d_{22} = 2e_{11} = 2e_{12} = e_{21} = 2e_{22} = w_1 = \theta_1 = \theta_2 = 1.$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{22} = \beta_{111} = \beta_{121} = \beta_{212} = \beta_{221} = w_2 = 0.$$

$$v_1 = 0.5000000000, \quad \xi_1 = 0.7886751346.$$

$$v_2 = 0.5000000000, \quad \xi_2 = 0.2113248654.$$

Foram conseguidos os seguintes resultados numéricos:

x	h = 0.1		h = 0.01		h = 0.001	
	Solução	Erro	Solução	Erro	Solução	Erro
0.1	9570355	39337	9531432	414	9531022	4
0.2	18311285	79129	18232987	832	18232164	8
0.3	26356483	120057	26237688	1261	26236439	13
0.4	33809946	162723	33648932	1708	33647241	17
0.5	40754199	207688	40548690	2180	40546533	22

Tabela 4.6.1

Na tabela acima:

- i) - A solução numérica aproximada é $y_n = \text{Solução} \cdot 10^{-8}$.
- ii) - O Erro Absoluto = $\text{Erro} \cdot 10^{-8}$.

4.8 - CONCLUSÃO

Nota-se da Tabela (4.6.1), que o método-VRK com a ENC implementada, apresenta uma estabilidade semelhante àquela verificada nos resultados das Tabelas (3.1.2) e (3.1.3), respectivamente, métodos PRK e BRK.

Apesar da aparente simplicidade numérica dos parâmetros adotados, existe o caráter implícito na determinação dos $Y_i^{(n)}$ em função da condição (4.2.16).

Nos métodos estendidos (para os quais $c_v = 1$) a aproximação da Cauda $F_n(x)$ é construída por uma regra de quadratura composta, de 1-passo, a qual em cada sub-intervalo $[x_{n-1}, x_n]$ é igual àquele do último estágio do próprio método. Isto, usualmente implica, para cada valor de x , em $(n-1)(p-1)$ avaliações do núcleo. Também isto, se contrasta com a aproximação da Cauda (4.5.4), onde é escolhida uma regra de quadratura Gaussiana composta e assim, em geral, o número de avaliações do núcleo é reduzido. Além do mais enquanto que, para os métodos com ENC, é algumas vezes possível alcançar a ordem global $p+1$ (vide Observação 4.5.2), para os métodos estendidos a ordem global é sempre p (vide Teorema 4 em [HAIRER - 83]). Nos métodos mistos, a aproximação da Cauda $F_n(x)$ é construída por meio de regras de quadratura de passo múltiplo, baseadas somente nos pontos de aproximação y_k da malha. Esta aproximação requer, para cada valor de x , n avaliações do núcleo. Assim, em relação ao esforço computacional, os métodos mistos podem ser mais eficientes que os métodos (4.1.2) com aproximação de Cauda (4.5.4).

Segundo [BELLEN - 88], a desvantagem deste, é que as regras de quadratura de passo múltiplo, destroem a natureza de 1-passo dos métodos-VRK, podendo resultar numa perda de estabilidade. Isto não acontece para os métodos propostos (4.1.2) com (4.5.4). Resumindo esta conclusão, pode-se dizer que, o uso de (4.5.4) resulta em métodos, os quais são bastante eficientes.

Foi também observado, que a implementação do método-VRK com ENC, exige computadores velozes, isto porque, o

número de parcelas do somatório envolvido no cálculo da cauda discretizada, aumenta na proporção que se progride nos passos do método. Por este motivo, aconselha-se o uso de co-processador numérico em máquinas de pequeno porte.

Os métodos-VRK que produziram as Tabelas 3.1.1, 3.1.2, 3.1.3 e 4.6.1, foram programados num computador do tipo PC-XT sem co-processador numérico, usando linguagem Turbo Pascal versão 5.5 em dupla precisão, consumindo cada tabela, aproximadamente 310 minutos de processamento. O mesmo foi feito num computador PC-AT 286 com co-processador numérico, reduzindo aquele tempo para aproximadamente 40 minutos.

BIBLIOGRAFIA

- [BAKER - 78] - BAKER, C. T. H. and KEECH, M.S.: Stability Regions in the Numerical Treatment of Volterra Integral Equations. SIAM J. of Numerical Analysis, volume 15, pp 394-417, 1978.
- [BELLEN - 87] - BELLEN, A., JACKIEWICZ, Z., VERMIGLIO, R. and ZENNARO, M.: Natural Continuous Extensions of Runge-Kutta Methods for Volterra Integral Equations of the Second Kind and Their Applications. Numerical Analysis Technical Report 65R20-7, University of Arkansas, 1987.
- [BELLEN - 88] - BELLEN, A., JACKIEWICZ, Z., VERMIGLIO, R. and ZENNARO, M.: Stability Analysis of Runge-Kutta Methods for Volterra Integral Equations of the Second Type. Technical Report 107, Arizona State University.
- [BELLEN - 89] - BELLEN, A., JACKIEWICZ, Z., VERMIGLIO, R. and ZENNARO, M.: Natural Continuous Extensions of Runge-Kutta Methods for Volterra Integral Equations of the Second Kind and Their Applications. Mathematics of Computation, volume 52, number 185, pp 49-63, 1989.
- [BEL'TYUKOV - 65] - BEL'TYUKOV, B. A.: An Analog of the Runge-Kutta Method for Solution of Nonlinear Volterra Type Integral Equations. Differentsial'nye Uravneniya, volume 1, number 4, pp 545-556, 1965.

- [BERMAN - 72] - BERMAN, G. and FRYER, K. D.: Introduction to Combinatorics - Academicpress Inc., 1972.
- [BRUNNER - 81] - BRUNNER, H., HAIRER, E., and NØRSETT, S. P.: Superconvergence of Collocation Methods for Volterra and Abel Integral Equations of the Second Kind. Numerische Mathematic 36, pp 347-358, 1981.
- [BRUNNER - 82] - BRUNNER, H., HAIRER, E., and NØRSETT, S. P.: Runge-Kutta Theory for Volterra Integral Equations of the Second Kind. Mathematics of Computation, volume 39, number 159, pp 147-163, 1982.
- [BUTCHER - 87] - BUTCHER, J. C.: The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations - Runge-Kutta and General Linear Methods. John Wiley & Sons, pp 79-87, 1987.
- [DELVES - 85] - DELVES, L. M., and MOHAMED, J. L.: Computational methods for integral equations. Cambridge University Press, pp 115-151, 1985.
- [DELVES - 74] - DELVES, L. M., and WALSH, J.: Numerical Solution of Integral Equations. Oxford University Press, 1974.
- [HAIRER - 81] - HAIRER, E.: Order Conditions for Numerical Methods for Partitioned Ordinary Differential Equations. Numerische Mathematic 36, pp 431-445, 1981

- [HAIRER - 83] - HAIRER, E., LUBICH, Ch. and NØRSETT, S. P.: Order of Convergence of One-Step Methods for Volterra Integral Equations of the Second Kind. SIAM J. of Numerical Analysis, volume 20, number 3, pp 569-579, 1983.

- [HAIRER - 84] - HAIRER, E., LUBICH, Ch.: On the Stability of Volterra-Runge-Kutta Methods. SIAM J. of Numerical Analysis, volume 21, number 1, pp 123-135, 1984.

- [HAIRER - 85] - HAIRER, E.: Extended Volterra-Runge-Kutta Methods. University of Heidelberg, pp 221-230, 1985.

- [HAIRER - 87] - HAIRER, E., NØRSETT, S. P. and WANNER, G.: Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems. Springer-Verlag, 1987.

- [HENRICI - 74] - HENRICI, P.: Applied and Computational Complex Analysis, volume I, John Wiley & Sons, 1974

- [HOUWEN - 80] - HOUWEN, P. J. Van der: Convergence and Stability Results in Runge-Kutta Type Methods For Volterra Integral Equations of the Second Kind. BIT, 20, pp 375-377, 1980.

- [HOUWEN - 81] - HOUWEN, P. J. Van der and Wolkenfelt, P. H. M.: Convergence and Stability Analysis for Modified Runge-Kutta Methods in the Numerical Treatment of Second-Kind Volterra Integral Equations. IMA Journal of Numerical Analysis, 1, pp 303-328, 1981.

- [JERRY - 85] - JERRY, A. J.: Introduction to Integral Equations With Applications. Pure and Applied Mathematics, volume 93, Marcel Dekker, 1985.

- [LAMBERT - 73] - LAMBERT, J. D.: Computational Methods in Ordinary Differential Equations. John Wiley & Sons, 1973.

- [LINZ - 67] - LINZ, P.: The Numerical Solution of Volterra Integral Equations by Finite Difference Methods. Mathematics Research Center. University of Wisconsin, Technical Summary Report # 825, 1967.

- [LIPSCHUTZ - 72] - LIPSCHUTZ, S.: Probabilidade. Coleção Schaum, McGraw-Hill, 1972.

- [LIU - 68] - LIU, C. L.: Introduction To Combinatorial Mathematics, McGraw-Hill, 1968.

- [PISKUNOV - 83] - PISKUNOV, N.: Calculo Diferencial e Integral. Tomo I, Editorial Mir, 1983.

- [POUZET - 63] - POUZET, P.: Etude en vue de leur traitement numerique des equations integrales de type Volterra. Revue Française de Traitement de L'Information, pp 79-112, 1963-2.

- [ZENNARO - 86] - ZENNARO, M.: Natural Continuous Extensions of Runge-Kutta Methods. Mathematics of Computation, volume 46, number 173, pp 119-133, 1986.