

MÉTODOS DE COLOCAÇÃO E MÉTODOS DO TIPO RK

Antonio Elias Fabris

Instituto de Matemática e Estatística

Universidade de São Paulo

Caixa Postal 20570 - São Paulo - Brasil

§0: INTRODUÇÃO.

Weiss [1] prova a equivalência entre um método de colocação por "splines" polinomiais e um método de Runge-Kutta para a resolução aproximada de um sistema de equações diferenciais de primeira ordem com valores de contorno.

Restringindo-nos a um sistema de equações diferenciais com valores iniciais enunciamos e demonstramos o teorema 2.2, que exhibe três condições para a realização da equivalência entre um método de colocação por funções pertencentes a um espaço vetorial S e um método de Runge-Kutta.

O resultado obtido em [1], que corresponde a escolher S como sendo o espaço dos polinômios de grau menor ou igual a m , resulta, no caso de condições iniciais, como caso particular.

No parágrafo 3, aplicamos o teorema 2.2 para obtermos resultados análogos em novas situações, adotando como espaço S o espaço dos "splines" naturais.

§1: DESCRIÇÃO DE UM MÉTODO TIPO RK. COMUTATIVIDADE DO DIAGRAMA DE DISCRETIZAÇÃO. EXEMPLO.

Consideremos o problema a valores iniciais

$$(1.1) \quad \begin{cases} y'(t) = f(y(t)), & a \leq t \leq b \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

onde $a, b \in \mathbb{R}$, $y_0 \in \mathbb{R}^d$ e $f \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d) \cap \text{Lip}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$.

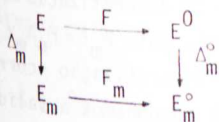
Dados $0 < \theta_1 < \theta_2 < \dots < \theta_m = 1$, seja $X \subset C^1([0, 1], \mathbb{R})$ subespaço de dimensão m tal que exista uma matriz real $A = [a_{ij}]$ satisfazendo

$$(1.2) \quad \int_0^{\theta_i} g(\theta) d\theta = \sum_{j=1}^m a_{ij} g(\theta_j), \quad i = 1, 2, \dots, m, \\ \forall g \in X.$$

Observemos que a matriz $A = [a_{ij}]$ existe se a condição abaixo for verificada.

Condição C_1 : "As formas lineares $U_j \in X^*$ definidas por $U_j g = g(\theta_j)$, $1 \leq j \leq m$, são linearmente independentes".

Seja o método de discretização (correspondente a um único passo de um método tipo RK) representado pelo diagrama



onde $E = C^2([a, b], \mathbb{R}^d)$, $E^0 = \mathbb{R}^d \times C^1([a, b], \mathbb{R}^d)$,

$$Fy = (y(a) - y_0, y' - f \circ y),$$

$$G_m = \{a = x_0 < x_1 < \dots < x_m = b\}, x_i = a + \theta_i(b-a), 1 \leq i \leq m,$$

$E_m = E_m^0$ = espaço das funções definidas na malha G_m com valores em $\mathbb{R}^d$,

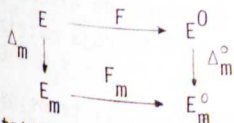
$$(F_m \eta)(x_i) = \begin{cases} \eta(a) - y_0 & , i = 0 \\ \frac{\eta(x_i) - \eta(a)}{b-a} - \sum_{j=1}^m a_{ij} f(\eta(x_j)), & i = 1, 2, \dots, m \end{cases}$$

$$(\Delta_m y)(x_i) = y_i, \quad 1 \leq i \leq m,$$

$$\Delta_m^0(d_0, d)(a) = d_0, \quad \Delta_m^0(d_0, d)(x_i) = \sum_{j=1}^m a_{ij} d(x_j), \quad 1 \leq i \leq m.$$

Definamos $T: C^1([a, b], \mathbb{R}^d) \rightarrow C^1([0, 1], \mathbb{R}^d)$ por $(Tv)(\theta) = v(a + \theta(b-a))$ e $D: C^2([a, b], \mathbb{R}^d) \rightarrow C^1([a, b], \mathbb{R}^d)$ por $Dv = v'$.

1.1. Proposição: Seja $S \in E$ tal que $TD(S) = X^d$. Então, para todo $s \in S$ o diagrama



é comutativo, isto é, $F_m \Delta_m s = \Delta_m^0 F s, \forall s \in S$.

1.2. Exemplo: Seja $S = P_{m+1}([a, b], \mathbb{R}^d)$ = espaço dos polinômios de grau m definidos no intervalo $[a, b]$ com valores em $\mathbb{R}^d$. Então: $TD(S) = P_m([0, 1], \mathbb{R}^d) \equiv (P_m([0, 1], \mathbb{R}))^d$ e para $X = P_m([0, 1], \mathbb{R})$ a condição C_1 é satisfeita.

§2. CONDIÇÕES PARA A EQUIVALÊNCIA ENTRE UM MÉTODO DE COLOCAÇÃO E O MÉTODO DO TIPO RK. EXEMPLO.

2.1. Definição: Seja V um subespaço de E de dimensão $m+1$. O método de obtenção de uma solução aproximada do problema (1.1) que consiste em determinarmos $v \in V$ tal que $v(a) = y_0$ e $v'(x_i) = f(v(x_i)), 1 \leq i \leq m$, é chamado método de colocação relativo aos pontos $a = x_0 < x_1 < \dots < x_m = b$.
Seja $S \in E$, $TD(S) = X^d$ e admitamos que valha a condição C_1 . Seja $v \in S$

solução aproximada do problema (1.1) pelo método de colocação relativamente aos pontos $x_0, x_1, \dots, x_m$. Pela proposição 1.1, $F_m \Delta_m v = \Delta_m^0 F_m v$. Mas $\Delta_m^0 F_m v = 0$. Logo, $\xi = \Delta_m v$ é solução do método de discretização correspondente a um único passo de um método do tipo RK, pois $F_m \xi = F_m \Delta_m v = 0$.

Seja, agora, ξ a solução do método de discretização correspondente a um único passo de um método do tipo RK e suponhamos a validade da condição abaixo.

Condição C_2 : "Existe $V_m : E_m \rightarrow S$ tal que $\Delta_m V_m = \text{id}$ ". Então, $\Delta_m^0 F_m V_m \xi = F_m \Delta_m V_m \xi = F_m \xi = 0$. Resulta, daí, que $(V_m \xi)(a) - y_0 = 0$ e $\sum_{j=1}^m a_{ij} [(V_m \xi)'(x_j) - f((V_m \xi)(x_j))] = 0$, $i = 1, 2, \dots, m$. Portanto, se a condição $\det[a_{ij}] \neq 0$ for satisfeita, $v = V_m \xi$ é solução do método de colocação relativamente aos pontos $x_0, x_1, \dots, x_m$. Em presença da condição C_1 , a condição:

Condição C_3 : "As formas lineares $I_i \in X^*$ definidas por $I_i f = \int_0^{\theta_i} f(\theta) d\theta$, $1 \leq i \leq m$, são linearmente independentes", implica em $\det[a_{ij}] \neq 0$.

Podemos resumir os resultados acima como se segue.

2.2. Teorema: Com as definições já feitas e admitindo-se a condição C_1 , temos:

(i) Se $s \in S$ é solução do método de colocação relativamente aos pontos $x_0, x_1, \dots, x_m$ então $\Delta_m s$ é solução do método de discretização correspondente a um único passo do método do tipo RK cuja matriz A satisfaz (1.2).

(ii) Admitindo-se, também, as condições C_2 e C_3 , temos: se $\xi \in E_m$ é solução do método de discretização correspondente a um único passo do método do tipo RK cuja matriz A satisfaz (1.2), então $s = V_m \xi$ é solução do método de colocação relativamente aos pontos $x_0, x_1, \dots, x_m$.

2.3. Exemplo: Para $S = P_{m+1}([a, b], \mathbb{R}^d)$ já verificamos a condição C_1 . Verifiquemos C_2 e C_3 . Define-se $V_m : E_m \rightarrow S$ como segue: $(V_m \eta)^j$ é o polinômio interpolador de Lagrange de grau m tal que $(V_m \eta)^j(x_i) = \eta^j(x_i)$, $0 \leq i \leq m$ e $1 \leq j \leq d$. Por construção, $V_m \Delta_m = \text{id}$, provando, pois, a condição C_2 . Verifiquemos C_3 . Seja $\{p_k\}$ a base de X onde $p_k(\theta) = \theta^k$, $0 \leq k \leq m-1$. Logo

$$\det[I_i p_k] = \det \left[\int_0^{\theta_i} \theta^k d\theta \right] \neq 0.$$

§3: REFORMULAÇÃO DAS CONDIÇÕES PARA A EQUIVALÊNCIA ENTRE UM MÉTODO DE COLOCAÇÃO POR "SPLINES" NATURAIS E O MÉTODO TIPO RK.

Vamos estudar um exemplo em que no lugar de colocação por polinômios usaremos colocação por "splines".

3.1. Definição: O espaço $S_{k,m-1}(a=x_0 < x_1 < \dots < x_m=b) = \{s : s|_{[x_{i-1}, x_i]} \in P_k([x_{i-1}, x_i], \mathbb{R}), 1 \leq i \leq m, \text{ e } s^{(j)}(x_{i-}) = s^{(j)}(x_{i+}), 1 \leq i \leq m-1, 0 \leq j \leq k-2\}$ é chamado espaço dos "splines" de ordem k com nós simples $x_1, x_2, \dots, x_{m-1}$.

3.2. Definição: $NS_{2k,m-1}(a=x_0 < x_1 < \dots < x_m=b) = \{s \in S_{2k,m-1}(a=x_0 < x_1 < \dots < x_m=b) : s^{(j)}(a) = s^{(j)}(b) = 0, j = k, k+1, \dots, 2k-2\}$ é o espaço dos "splines" naturais de ordem 2k com nós simples $x_1, x_2, \dots, x_{m-1}$.

Seja $S = NS_{2k,m-1}^d, k \geq 2$. Como $X^d = TD(S)$, tem-se $X = \{f \in S_{2k-1,m-1}(0 = \theta_0 < \theta_1 < \dots < \theta_m = 1) : f^{(j)}(0) = f^{(j)}(1) = 0, j = k-1, k, \dots, 2k-3\}$. Analisemos as condições C_1, C_2 e C_3 .

Condição C_1 : Temos que $\dim S_{2k-1,m-1}(0 = \theta_0 < \theta_1 < \dots < \theta_m = 1) = 2k+m-2$. Sejam U_i, L_j, R_j formas lineares sobre $S_{2k-1,m-1}(0 = \theta_0 < \theta_1 < \dots < \theta_m = 1)$ assim definidas: $U_i f = f(\theta_i), i = 1, 2, \dots, m, L_j f = f^{(j)}(0), j = k-1, k, \dots, 2k-3$ e $R_j f = f^{(j)}(1), j = k-1, k, \dots, 2k-3$. Como $X = \text{Ker}(L_{k-1}, \dots, L_{2k-3}, R_{k-1}, \dots, R_{2k-3})$, teremos que se as formas lineares U_i, L_j, R_j forem linearmente independentes, então $\dim X = 2k+m-2 - (2k-2) = m$ e $U_1, U_2, \dots, U_m$ restritas a X são linearmente independentes. Portanto, a condição C_1 estará satisfeita se a matriz M_1 do tipo $(2k+m-2) \times (2k+m-2)$, obtida calculando-se as formas lineares U_i, L_j, R_j nos elementos de uma base de $S_{2k-1,m-1}(0 = \theta_0 < \theta_1 < \dots < \theta_m = 1)$, tiver determinante diferente de zero.

Condição C_3 : Sejam I_i as formas lineares definidas por $I_i f = \int_0^{\theta_i} f(\theta) d\theta$. Por um argumento similar ao da condição C_1 , a condição C_3 será satisfeita se a matriz M_3 , do tipo $(2k+m-2) \times (2k+m-2)$, obtida calculando-se as formas lineares I_i, L_j, R_j nos elementos de uma base de $S_{2k-1,m-1}(0 = \theta_0 < \theta_1 < \dots < \theta_m = 1)$ tiver determinante diferente de zero.

A condição C_2 será satisfeita para $\nabla_m : E_m \rightarrow S$ assim definida: $\nabla_m \eta$ é

o "spline" natural de ordem $2k$ com nós simples $x_1, x_2, \dots, x_{m-1}$ tal que $(v_m \eta)(x_i) = x_i$.

De acordo com o exposto neste parágrafo, um método de colocação por "splines" naturais e o método do tipo RK serão equivalentes se $\det M_1 \neq 0$ e $\det M_3 \neq 0$. Em [2] isto foi por nós verificado para $k=2$ e $k=3$, isto é, para "splines" naturais cúbicos e quínticos.

Ao final deste artigo, quero externar meus agradecimentos ao Prof. Dr. Ivan de Queiroz Barros. Este trabalho não teria sido possível sem o seu inestimável e constante incentivo.

BIBLIOGRAFIA

- [1] WEISS, R. The application of implicit Runge-Kutta and collocation of methods of boundary-value problems. *Mathematics of Computation*, 28(126):449-64, 1974.
- [2] FABRIS, A.E. Tópicos sobre métodos de colocação. São Paulo, IME-USP, 1985. 127p. (Dissertação de Mestrado)
- [3] AHLBERG, J.H. & NILSON, E. & WALSH, J.L. *The theory of splines and their applications*. New York, Academic Press, 1967.
- [4] BARROS, I.Q. Discretização: métodos de passo progressivo para equações diferenciais ordinárias com condições iniciais. São Paulo, IME-USP, 1978. v.3. (RT-MAP-7808)
- [5] SCHUMAKER, L.L. *Spline functions: basic theory*. New York, John Wiley, 1981.
- [6] STETTER, H.J. *Analysis of discretization methods for ordinary differential equations*. Berlin, Springer, 1971. 388p.