I. MATEMATICA

UNELE FORMULE DE TIP RUNGE-KUTTA CU ORDINUL DE EXACTITATE PATRU ȘI INTERVALUL DE ABSOLUT STABILITATE MARE

de

IULIAN COROIAN

1. *Introducere*. Să presupunem că pentru rezolvarea numerică a problemei lui Cauchy

$$Y_n'(x) = f(x, Y_n(x)), \; Y_n(x_n) = y_n, \tag{1.1}$$

unde $f : D \subset \mathbf{R}^2 \to \mathbf{R}$, pe rețeaua de puncte echidistante $x_{n+1} = x_0 + (n+1)h$, $n = 0, 1, \ldots, N-1$, se folosește o metodă de tip Runge-Kutta explicită $R-K_{p,q}$, cu ordinul de exactitate p și rangul q; p, $q \in N^*$, definită prin

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{q} c_i k_i, \; n = 0, 1, 2, \ldots,$$

$$k_1 = f(x_n, y_n),$$

$$k_i = f(x_n + a_i h, \; y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j), \; i = 2, 3, \ldots, q$$

y_{n+1} fiind valoarea aproximativă a lui $Y_n(x_{n+1})$, iar a_i, c_i, b_{ij}, sînt niște parametri care se determină din condiția ca metoda (1.2) să aibă ordinul de exactitate p și eventual să satisfacă și alte condiții.

O metodă $R-K_{p,q}$ explicită, definită de relațiile (1.2) se mai poate reprezenta prin tabelul (matrice triunghiulară) (1.3)

$$\begin{array}{c|cccccc}
a_2 & b_{21} & & & & & \\
a_3 & b_{31} & b_{32} & & & & \\
a_4 & b_{41} & b_{42} & b_{43} & & & \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\
a_q & b_{q1} & b_{q2} & b_{q3} & \ldots & b_{q,q-1} & \\
\hline
 & c_1 & c_2 & c_3 & \ldots & c_{q-1} & c_q
\end{array} \tag{1.3}$$

2. *Definiții*. O noțiune foarte importantă ce trebuie să caracterizeze o metodă de integrare numerică aplicabilă cu succes în practică, este noțiu-

nea de „*absolut stabilitate*", [2]. Pentru a defini această noţiune să aplicăm metoda $R-K_{p,q}$ (1.2) la problema test

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = 1, \ \lambda \in \mathbf{R} \tag{2.1}$$

Se va obţine relaţia

$$y_{n+1} = P_q(h\lambda)y_n, \tag{2.2}$$

unde $P_q(u)$ este un polinom de gradul q în $u = h\lambda$

$$P_q(u) = \sum_{j=0}^{q} \beta_j u^j, \tag{2.3}$$

a cărui coeficienţi β_j, $j = 0, 1, \ldots, q$ se pot exprima în funcţie de parametri a_i, b_{ij}, c_i ai metodei (1.2)

Definiţia 1.2 Polinomul $P_q(u)$ se numeşte *polinomul de stabilitate* a metodei $R-K_{p,q}$ (1.2), iar mulţimea

$$S = \{u \in R \mid |P_q(u)| < 1\}, \tag{2.4}$$

se numeşte regiunea de absolut — stabilitate a metodei (1.2).

Definiţia 2.2 (J. D. Lambert, [2]) Metoda $R-K_{p,q}$ (1.2) se numeşte *absolut-stabilă* (sau tare-stabilă) pentru un $u = h\lambda$ dat, dacă pentru acest u avem

$$|P_q(u)| < 1, \tag{2.5}$$

adică $u \in S$. În caz contrar metoda (1.2) se numeşte *absolut-instabilă*.

Este cunoscut, [2], faptul că pentru o metodă $R-K_{p,q}$ polinomul de stabilitate devine

$$P_q(u) = \sum_{j=0}^{p} \frac{1}{j!} u^j + \sum_{j=p+1}^{q} \beta_j u^j, \tag{2.6}$$

şi deasemenea că regiunea de stabilitate S este un interval de forma $S = (-a, 0)$, cu $a > 0$.

Pentru metodele $R-K_{p,p}$, posibile pentru $p = 1, 2, 3, 4$ intervalul de absolut stabilitate este acelaşi pentru toate metodele de acelaşi ordin p, interval destul de restrictiv. Astfel, metodele $R-K_{4,4}$ au intervalul de absolut stabilitate $S = (-2{,}78; 0)$. Pentru a construi metode $R-K_{p,q}$ cu intervalul de absolut stabilitate mai mare este necesar că considerăm metode cu $q > p$, deoarece polinomul $P_q(u)$ conţine în acest caz un număr de parametri $\beta_{p+1}, \beta_{p+2}, \ldots, \beta_q$, care se determină în sensul optimizării intervalului de absolut stabilitate a metodei. Menţionăm în acest sens rezultatele obţinute de J.D. LAWSON [3], [4], C. METZGER [5], P.J. HOWEN [1].

P.J. Howen, [1], deduce valorile optimale ale coeficienţilor βj, $j = p+1, p+2, \ldots, q$ ai polinomului de stabilitate $P_q(u)$ în cazurile $p = 2, 3, 4$; $q = p+1, p+2, \ldots, 14$ şi intervalele de stabilitate optimale în fiecare din aceste cazuri.

3. *Construirea unei clase de metode* $R-K_{4,q}$. Plecînd de la cunoașterea coeficienților β_j, $j = p+1, p+2, \ldots, q$ vom construi o clasă de metode $R-K_{4,q}$ cu $q > 4$, avind coeficienții a_i, c_i, b_{ij} exprimați în funcție de β_j, $j = \overline{p+1, q}$. Dacă la aceste metode vom lua pentru β_j, $j = \overline{p+1, q}$ valorile optimale deduse în [1], atunci aceste metode vor fi optimale, adică dintre toate metodele $R-K_{4,q}$ cu q fixat metodele deduse de noi vor avea intervalul de absolut stabilitate cel mai mare.

Fără a face detaliat calculele, calcule foarte lungi dealtfel, vom da desvoltările în serie Taylor după puterile lui h pentru $Y_n(x_{n+1}) = Y_n(x_n+h)$ și pentru valoarea sa aproximativă y_{n+1}

$$Y_n(x_{n+1}) = y_n + hf + \frac{1}{2}h^2Df + \frac{1}{6}h^3(f_1Df + D^2f) + \tag{3.1}$$

$$+ \frac{1}{24}h^4(f_1^2Df + f_1D^2f + 3Df_1Df + D^3f) + 0(h^5),$$

unde $f = f(x_n, y_n)$, $f_1 = f'_y(x_n, y_n)$ iar

$$D^kf = \left(\frac{\partial}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial y}\right)^k f = \sum_{j=0}^{k} \binom{k}{j} \frac{\partial^k f(x_n, y_n)}{\partial x^{k-j}\,\partial y^j} \cdot f^j, \tag{3.2}$$

$$y_{n+1} = y_n + h\beta_1 f + h^2\beta_2 Df + h^3\left(\beta_3 f_1 Df + \frac{1}{2}\beta_{31}D^2f\right) + \tag{3.3}$$

$$+ h^4\left(\beta_4 f_1^2 Df + \frac{1}{2}\beta_{41}f_1D^2f + \beta_{42}Df_1Df + \frac{1}{6}\beta_{43}D^3f\right) + 0(h^5).$$

În desvolările acestea coeficienții β_i, β_{ij} se pot exprima în funcție de a_i, c_i, b_{ij} astfel

$$\beta_1 = \sum_{i=1}^{q} c_i,\quad \beta_2 = \sum_{i=2}^{q} c_i a_i,\qquad \beta_3 = \sum_{i=3}^{q} c_i \sum_{j=2}^{i-1} b_{ij}a_j,$$

$$\beta_4 = \sum_{i=4}^{q} c_i \sum_{j=3}^{i-1} b_{ij} \sum_{k=2}^{j-1} b_{jk}a_k, \tag{3.4}$$

$$\beta_{31} = \sum_{i=2}^{q} c_i a_i^2,\qquad \beta_{41} = \sum_{i=2}^{q} c_i \sum_{j=2}^{i-1} b_{ij}a_j^2,$$

$$\beta_{42} = \sum_{i=3}^{q} c_i a_i \sum_{j=2}^{i-1} b_{ij}a_j,\qquad \beta_{43} = \sum_{i=2}^{q} c_i a_i^3.$$

Nu intîmplător s-a folosit în (3.3) și (3.4) notația β_1, β_2, β_3, β_4, ci se constată, aplicînd o metodă $R-K_{p,q}$, cu $p = 4$ la problema (2.1), că β_1, β_2,

β_3, β_4 sînt chiar primii patru coeficienți ai polinomului $P_q(u)$, iar următorii coeficienți $\beta_5, \beta_6, \ldots, \beta_q$ sînt dați de relațiile

$$
\begin{aligned}
\beta_5 &= \sum_{i=5}^{q} c_i \sum_{j=4}^{i-1} b_{ij} \sum_{k=3}^{j-1} b_{jk} \sum_{s=2}^{k-1} b_{ks} a_s, \\
\beta_6 &= \sum_{i=6}^{q} c_i \sum_{j=5}^{i-1} b_{ij} \sum_{k=4}^{j-1} b_{jk} \sum_{s=3}^{k-1} b_{ks} \sum_{t=2}^{s-1} b_{st} a_t, \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
\beta_q &= c_q b_{q,q-1} b_{q-1,q-2} \ldots b_{43} b_{32} b_{21}.
\end{aligned}
\tag{3.5}
$$

Vom construi o metodă $R-K_{4,q}$ cu $q > 4$, generată de tabelul (3.6)

$$
\begin{array}{l|llllllllll}
1 & 1 \\
1/2 & 3/8 & 1/8 \\
1/2 & 0 & b_{42} & b_{43} \\
1/2 & 0 & b_{52} & 0 & b_{54} \\
1/2 & 0 & b_{62} & 0 & 0 & b_{65} \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
1/2 & 0 & b_{q-3,2} & \ldots & 0 & 0 & b_{q-3,q-4} \\
1/2 & 0 & b_{q-2,2} & \ldots & 0 & 0 & 0 & b_{q-2,q-3} \\
a_{q-1}=t/4-t & 0 & -t^2/(4-t)^2 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 & 4t/(4-t)^2 \\
a_q \;\; = 1 & 0 & -t^2/8(2-t) & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dfrac{(4-t)^2}{8(2-t)} \\
\hline
 & 1/6 & (1/6)-(1/3t) & 4/6 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3t
\end{array}
\tag{3.6}
$$

Propoziția 3.1. Metoda de tip Runge-Kutta definită de (3.6) are ordinul de exactitate $p = 4$.

În adevăr dacă ne servim de relațiile (3.4) în care a_i, c_i, b_{ij} sînt luați de la metoda (3.6) obținem

$$
\beta_1 = 1,\ \beta_2 = 1/2,\ \beta_3 = 1/6,\ \beta_4 = 1/24,\ \beta_{31} = 1/3,\ \beta_{41} = 1/12,
$$
$$
\beta_{42} = 1/8,\ \beta_{43} = 1/4.
$$

Cu acești coeficienți se constată că desvoltările (3.1) și (3.3) coincid pînă la termenii în h^4, inclusiv, astfel că metoda (3.6) care ordinul de exactitate $p = 4$.

Să analizăm metodele generate de (3.6) în cazurile particulare $q = 5$ și $q = 6$. Pentru $q = 5$ metodele $R-K_{4,5}$ sînt definite de următoarea schemă

$$
\begin{array}{l|lllll}
1 & 1 \\
1/2 & 3/8 & 1/8 \\
t/4-t & 0 & -t^2/(4-t)^2 & 4t/(4-t) \\
1 & 0 & -t^2/8(2-t) & 0 & (4-t)^2/8(2-t) \\
\hline
 & 1/6 & (1/6)-(1/3t) & 4/6 & 0 & 1/3t
\end{array}
\tag{3.7}
$$

Din egalitățile (3.5) se pot obține coeficienții necunoscuți ai acestei metode in funcție de coeficientul β_5 rămas nedeterminat, adică de fapt parametrul t in funcție de β_5

$$t = 2 - 1/48\beta_5. \tag{3.8}$$

Dacă pentru β_5 se ia valoarea optimală din [1], atunci metoda (3.7) astfel obținută va avea intervalul de absolut stabilitate $S = (-6{,}06\,;\,0)$. Pentru $q = 6$ metodele $R-K_{4,6}$ de forma (3.6) sint

$$\begin{array}{c|cccccc}
1 & 1 & & & & & \\
1/2 & 3/8 & 1/8 & & & & \\
1/2 & 0 & b_{42} & b_{43} & & & \\
t/4-t & 0 & -t^2/(4-t)^2 & 0 & 4t/(4-t)^2 & & \\
1 & 0 & -t^2/8(2-t) & 0 & 0 & (4-t)^2/8(2-t) & \\
\hline
 & 1/6 & (1/6)-(1/3t) & 4/6 & 0 & 0 & 1/3t
\end{array} \tag{3.9}$$

Din nou cu relațiile (3.5) se obțin coeficienții necunoscuți din (3.9) in funcție de β_5 și β_6

$$b_{42} = \frac{1}{2} - \frac{4\beta_6}{\beta_5 + 4\beta_6},\quad b_{43} = \frac{4\beta_6}{\beta_5 + 4\beta_6},\quad t = 2 - \frac{1}{12(\beta_5 + 4\beta_6)}. \tag{3.10}$$

Dacă acum pentru β_5 și β_6 se iau valorile optimale deduse in [1], atunci intervalul de absolut stabilitate al metodei (3.9) va fi $S = (-9{,}82\,;\,0)$.

În cazul general al metodelor $R-K_{4,q}$ cu $q > 4$ definite prin tabelul (3.6) avem

PROPOZIȚIA 3.2. Coeficienții metodei $R-K_{4,q}$, $q \geq 6$, generate de tabelul (3.6) se exprimă in funcție de coeficienții β_j, $j = \overline{5, q}$ ai polinomului de stabilitate $P_q(u)$ prin relațiile

$$b_{m,2} = \frac{1}{2} - \frac{A_{m-1}}{A_m},\qquad b_{m,m-1} = \frac{A_{m-1}}{A_m}, \tag{3.11}$$

$$t = 2 - 1/12A_{q-2},$$

unde

$$A_m = \sum_{i=q-m+3}^{q} \beta_i + 3\beta_5,\qquad m = \overline{5, q-2}. \tag{3.12}$$

Pentru demonstrație să considerăm relațiile (3.5), scrise pentru coeficienții metodei (3.6). Se obțin următoarele ecuații

$$\begin{aligned}
&b_{q-2,2} + \frac{1}{2}\, b_{q-2,q-3} = 6(2-t)\beta_5,\\
&b_{q-2,q-3}\left(b_{q-3,2} + \frac{1}{2}\, b_{q-3,q-4}\right) = 6(2-t)\beta_6,\\
&b_{q-2,q-3}\, b_{q-3,q-4}\left(b_{q-4,2} + \frac{1}{2}\, b_{q-4,q-5}\right) = 6(2-t)\beta_7,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&b_{q-2,q-3}\, b_{q-3,q-4}\,\ldots\, b_{65}\, b_{54}\left(b_{42} + \frac{1}{2}\, b_{43}\right) = 6(2-t)\beta_{q-1},\\
&b_{q-2,q-3}\, b_{q-3,q-4}\,\ldots\, b_{65}\, b_{54} b_{43} = 8 \cdot 6(2-t)\beta_q.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Egalitățile (3.13) constitue un sistem neliniar de $q - 4$ ecuații cu $q - 4$ necunoscute $b_{42}, b_{52}, \ldots, b_{q-2,2}, t$ deoarece

$$b_{m,m-1} = 1/2 - b_{m,2}\,;\ m = 4, 5, \ldots, q - 2. \tag{3.14}$$

Rezolvarea acestui sistem se poate face din aproape în aproape, începînd cu ultimele două ecuații și se deduce, pentru $m = 4, 5, \ldots, q$

$$\begin{aligned} b_{m,2} &= \frac{\beta_{q-m+3} - \beta_{q-m+4} - \ldots - \beta_{q-1} - 4\beta_q}{2(\beta_{q-m+3} + \beta_{q-m+4} + \ldots + \beta_{q-1} + 4\beta_q)}, \\ b_{m,m-1} &= \frac{\beta_{q-m+4} + \beta_{q-m+5} + \ldots + \beta_{q-1} + 4\beta_q}{\beta_{q-m+3} + \beta_{q-m+4} + \ldots + \beta_{q-1} + 4\beta_q}. \end{aligned} \tag{3.15}$$

Din prima ecuație (3.13) se găsește

$$t = 2 - 1/12(\beta_5 + \beta_6 + \ldots + \beta_{q-1} + 4\beta_q). \tag{3.16}$$

În sfîrșit, dacă facem notația (3.12) în (3.15) și (3.16), rezultă concluzia propoziției 3.2.

OBSERVAȚIE. În afara faptului că metodele $R-K_{4,q}$, $q > 4$ de forma (3.6), au un interval de absolut stabilitate optimal dacă β_j, $j = \overline{5, q}$ se înlocuiesc cu valorile optimale din [1], ele mai prezintă avantajul că au mulți coeficienți nuli și astfel se poate economisi din capacitatea de memorie a calculatorului.

BIBLIOGRAFIE

1. HOWEN, P., J. van der: „*Explicit Runge-Kutta formulas with increased stability boundaries*", Numer. Math., 20, 149–164, 1972.
2. LAMBERT, J., D.: „*Computational methods in ordinary differential equations*", John Wiley and Sons, 1973.
3. LAWSON, J., D.: "*An order five Runge-Kutta process with extended region of stability*", SIAM J. Numer. Anal., 3, 593–597, 1966.
4. LAWSON, J., D.: „*An order six Runge-Kutta process with extended region of stability*", SIAM J. Numer. Anal, 4, 620–625, 1967.
5. METZGER, C.: *Methodes de Runge-Kutta de rang supérieur a l'ordre*", Teză de doctorat, Univ. Grenoble, 1967.

REZUMAT

În lucrare se construiește o clasă de metode de integrare numerică de tip Runge-Kutta, pentru problema lui Cauchy (1.1), metode avînd ordinul $p = 4$ și rangul q, $q > 4$, definite de schema (3.6). Coeficienții acestor formule se exprimă în funcție de coeficienții β_j, $j = \overline{5, q}$, ai polinomului (2.6) de stabilitate a metodei, iar în cazul că pentru β_j, $j = \overline{5, q}$, se iau valorile optimale din [1], formulele generate de (3.6) devin optimale în sensul lungimii intervalului de absolut stabilitate.

SOME RUNGE-KUTTA TYPE FORMULAS WITH LARGE REGION OF ABSOLUTE STABILITY

(Abstract)

A class of Runge-Kutta type integration formulas for problem (1.1) are presented, formulas generated by the scheme (3.6). The methods have fourth order accuracy and q-stages, $q > 4$. The coefficients of these formulas are expressed in terms of β_j, $j = \overline{5, q}$, the coefficients of stability polynomial, by the equations (3.11) and if β_j, $j = \overline{5, q}$, take the optimal values from [1], then these formulas become optimal from the stability point of view.