O METODĂ DE INTEGRARE NUMERICĂ CU ORDIN ÎNALT DE EXACTITATE ŞI O FORMULĂ DE CUADRATURĂ CORESPUNZĂTOARE

de

IULIAN COROIAN

1. *Introducere.* Pentru integrarea numerică a problemei lui Cauchy

$$\bar{y}'(x) = \bar{f}(x, \bar{y}(x)); \quad \bar{y}(x_0) = \bar{y}_0, \tag{1.1}$$

$\bar{f}: \mathscr{D} \subset \mathbf{R}^2 \to \mathbf{R}$, este cunoscută metoda lui E. Fehlberg [4], [5], de a face o transformare a ecuaţiei diferenţiale (1.1) şi a funcţiei necunoscute $y(x)$, de aşa manieră încît funcţia necunoscută a noii ecuaţii diferenţiale va avea o serie de termeni nuli în desvoltarea sa în seria Taylor, fapt ce permite obţinerea unor formule de integrare de tip Runge-Kutta, cu ordin înalt de exactitate. Transformarea lui E. Fehlberg a fost extinsă de A. Coţiu [2], [3] la forma

$$\bar{y}(x) = y(x) + \sum_{i=1}^{m-1} \frac{(x - x_0)^i}{i!} \bar{y}_0^{(i)} + (x - x_0)(y - \bar{y}_0)\left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}}\right)_0 +$$
$$+ \frac{1}{2}(x - x_0)^2 (y - y_0)\left[\left(\frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial x \partial \bar{y}}\right)_0 + \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}}\right)_0^2\right], \tag{1.2}$$

unde $m > 1$ este un număr natural, $y(x)$ este noua funcţie necunoscută, iar $\bar{y}_0^{(i)} = \bar{y}^{(i)}(x_0)$, $i = 1, 2, \ldots, m + 1$, derivatele parţiale care intervin fiind luate în punctul (x_0, y_0).

Efectuînd transformarea (1.2) ecuaţia diferenţială (1.1) devine

$$y'(x) = f(x, y(x)) = \frac{1}{Q}\Bigg\{\bar{f}(x, \bar{y}) - \sum_{i=0}^{m} \frac{(x - x_0)^i}{i!} y_0^{(i+1)} - (y - \bar{y}_0)\left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}}\right)_0 -$$
$$- (x - x_0)(y - \bar{y}_0)\left[\left(\frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial x \partial \bar{y}}\right)_0 + \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}}\right)_0^2\right]\Bigg\}, \tag{1.3}$$

unde

$$Q = 1 + (x - x_0)\left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}}\right)_0 + \frac{1}{2}(x - x_0)^2\left[\left(\frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial x \partial \bar{y}}\right)_0 + \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}}\right)_0^2\right].$$

Ecuația (1.3) satisface, după cum se poate verifica ușor, condițiile

$$
\begin{aligned}
&y(x_0) = y_0 = \bar{y}_0, \\
&y_0' = y_0'' = \dots = y_0^{(m+1)} = 0, \\
&\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_0 = \dots \left(\frac{\partial^m f}{\partial x^m}\right)_0 = 0, \\
&\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\right)_0 = 0.
\end{aligned}
\tag{1.4}
$$

2. *Construirea unei metode de integrare de tip Runge-Kutta-Fehlberg.* Utilizînd transformarea (1.2) vom construi pentru noua problemă a lui Cauchy

$$y'(x) = f(x,\ y(x)),\ y(x_0) = y_0 = \bar{y}_0, \tag{2.1}$$

o metodă de tip Runge-Kutta-Fehlberg avind ordinul de exactitate $m + 6$ și folosind 4 evaluări ale funcției f(asemenea metode se vor nota $R-K-F_{m+6,4}$).

În cele ce urmează vom presupune că problema (2.1) are soluție unică și că funcția f este continuă și admite derivate parțiale continue pînă la un ordin suficient de mare intr-o vecinătate suficient de largă a punctului $(x_0,\ y_0)$.

Dacă $h = x - x_0 > 0$ și y_1 este valoarea aproximativă a soluției exacte $y(x_1) = y(x_0 + h)$ a problemei (2..1), atunci vom considera formule de integrare numerică de următoarea structură

$$
\begin{aligned}
&y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^{4} c_i k_i, \\
&k_1 = f(x_0 + a_1 h,\ y_0), \\
&k_i = f(x_0 + a_i h,\ y_0 + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j)\ ;\ i = 2,\ 3,\ 4,
\end{aligned}
\tag{2.2}
$$

unde a_i, c_i, b_{ij} sint constante reale ce urmează a fi determinate astfel ca ordinul de exactitate a metodei să fie $m + 6$. Pentru y_1 și $y(x_1)$ se pot deduce, (vezi [1]) următoarele desvoltări în serie Taylor după puterile lui h

$$
\begin{aligned}
y_1 = y_0 &+ \sum_{i=m+1}^{m+3} \frac{h^{i+1}}{i!} A_i \left(\sum_{j=1}^{4} c_j a_j^i\right) + h^{m+5} \left[\frac{1}{(m+4)!} A_{m+4} \sum_{i=1}^{4} c_i a_i^{m+4} + \right. \\
&\left. + \frac{1}{2 \cdot (m+1)!} A_{m+1} B \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^2 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} a_j^{m+1}\right] + h^{m+6} \left[\frac{1}{(m+5)!} A_{m+5} \sum_{i=1}^{4} c_i a_i^{m+5} + \right. \\
&+ \frac{1}{2 \cdot (m+2)!} A_{m+2} B \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^2 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} a_j^{m+2} + \\
&\left. + \frac{1}{6 \cdot (m+1)!} A_{m+1} C \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^3 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} a_j^{m+1}\right] + h^{m+7} \left[\frac{1}{(m+6)!} A_{m+6} \sum_{i=1}^{4} c_i a_i^{m+6} + \right.
\end{aligned}
$$

$$+ \frac{1}{2 \cdot (m+3)!} A_{m+3} B \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^2 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} a_j^{m+3} +$$

$$+ \frac{1}{6 \cdot (m+2)!} \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^3 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} a_j^{m+2} A_{m+2} \cdot C + \tag{2.3}$$

$$+ \frac{1}{24 \cdot (m+1)!} A_{m+1} D \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^4 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} a_j^{m+1} \Big] + O(h^{m+8}),$$

$$y(x_1) = y_0 + \sum_{i=m+1}^{m+3} \frac{A_i h^{i+1}}{(i+1)!} + \frac{h^{m+4}}{(m+5)!}\Big[A_{m+4} + \frac{1}{2}(m+3)(m+4)A_{m+1}B\Big] +$$

$$+ \frac{h^{m+6}}{(m+6)!}\Big[A_{m+5} + \frac{1}{2}(m+4)(m+5)A_{m+2}B + \frac{1}{6}(m+3)(m+4)(m+5)\cdot$$

$$A_{m+1}C\Big] + \frac{h^{m+7}}{(m+7)!}\Big[A_{m+6} + \frac{1}{2}(m+5)(m+6)A_{m+3}B +$$

$$+ \frac{1}{6}(m+4)(m+5)(m+6)A_{m+2}C + \frac{1}{24}(m+3)(m+4)(m+5)(m+6)\cdot$$

$$A_{m+1} D\Big] + O(h^{m+8}). \tag{2.4}$$

În desvoltările (2.3) şi (2.4) am folosit pentru derivatele parţiale ale lui f în punctul (x_0, y_0), notaţiile

$$A_i = \frac{\partial^i f}{\partial x^i}, \ i = 1, 2, \ldots, m+6; \ B = \frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y},$$

$$C = \frac{\partial^4 f}{\partial x^3 \partial y}, \ D = \frac{\partial^5 f}{\partial x^4 \partial y}.$$

Dacă se impune condiţia ca desvoltările (2.3) şi (2.4) să coincidă pînă la termenii în h^{m+6} inclusiv, se obţine pentru parametri a_i, c_i, b_{ij} următorul sistem neliniar de ecuaţii

$$\sum_{i=1}^{4} c_i a_i^{m+p} = \frac{1}{m+p+1}, \ p = 1, 2, 3, 4, 5,$$

$$\sum_{i=2}^{4} c_i a_i^2 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} a_j^{m+p} = \frac{1}{(m+p+1)(m+p+4)}; \ p = 1, 2, \tag{2.6}$$

$$\sum_{i=2}^{4} c_i a_i^3 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} a_j^{m+1} = \frac{1}{(m+2)(m+6)},$$

Termenul principal al erorii de trunchiere, adică termenul în h^{m+7} al desvoltării lui $y_1 - y(x_1)$ în serie Taylor, va fi

$$T = h^{m+7}\left[\frac{1}{(m+6)!}A_{m+6}N_1 + \frac{1}{2\cdot(m+3)!}A_{m+3}BN_2 + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{6\cdot(m+2)!}A_{m+2}CN_3 + \frac{1}{24\cdot(m+1)!}A_{m+1}DN_4\right], \tag{2.7}$$

unde

$$N_1 = \sum_{i=1}^{4} a_i^{m+6}c_i - \frac{1}{(m+7)}, \quad N_2 = \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^2 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}a_j^{m+3} - \frac{1}{(m+4)(m+7)},$$

$$N_3 = \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^3 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}a_j^{m+2} - \frac{1}{(m+3)(m+7)},$$

$$N_4 = \sum_{i=2}^{4} c_i a_i^4 \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}a_j^{m+1} - \frac{1}{(m+2)(m+7)}.$$

PROPOZIȚIA 2.1. O soluție a sistemului de ecuații (2.6), adică o formulă $R-K-F_{m+6,4}$ de tipul (2.2) este dată de următoarele valori numerice

$$\begin{aligned}
&a_1 = \frac{m+2}{m+5}, \quad a_2 = \frac{m+3}{m+5}, \quad a_3 = \frac{m+3}{m+6}, \quad a_4 = 1,\\
&c_1 = \frac{2(m+5)}{9(m+4)}\left(\frac{m+5}{m+2}\right)^{m+2}, \quad c_2 = \frac{3}{2}\,\frac{1}{m+4}\left(\frac{m+5}{m+3}\right)^{m+2},\\
&c_3 = -\frac{2}{9}\left(\frac{m+6}{m+4}\right)\left(\frac{m+6}{m+3}\right)^{m+3} \quad c_4 = \frac{7}{18(m+4)},\\
&b_{21} = b_{31} = b_{43} = 0, \quad b_{32} = -\frac{3}{2}\,\frac{m+4}{(m+2)(m+6)^2}\left(\frac{m+5}{m+6}\right)^{m},
\end{aligned} \tag{2.8}$$

$$b_{41} = \frac{72}{7}\,\frac{m+4}{(m+2)^2(m+3)(m+6)}\left(\frac{m+5}{m+2}\right)^{m}, \quad b_{42} = \frac{12(m+4)(m^2+9m+12)}{7(m+2)(m+3)^2(m+6)}\left(\frac{m+5}{m+3}\right)^{m}.$$

Afirmația se deduce prin verificare directă. De fapt se poate deduce o familie de soluții ale sistemului (2.6) însă pentru cele ce urmează ne interesează doar soluția (2.8).

3. *O formulă de cuadratură cu gradul de exactitate $m+5$, $m \in N$, $m > 1$.* Se știe că orice formulă de integrare numerică de tip Runge-Kutta ne conduce, în cazul $\frac{\partial f}{\partial y} \equiv 0$, adică în cazul că f nu depinde de y, la o anumită formulă de cuadratură.

TEOREMA 3.1. Dacă funcția $f:[a, b] \to \mathbb{R}$ este continuă și admite derivate continue în $[a, b]$ până la ordinul $m+6$ inclusiv, $m \in N$, $m > 1$ și dacă satisface în punctul $x_0 \in (a, b)$ condițiile

$$f(x_0) = f'(x_0) = f''(x_0) = \ldots = f^{(m)}(x_0) = 0, \tag{3.1}$$

atunci petru $h > 0$ așa ca $x_0 + h \in [a, b]$ are loc formula de cuadratură cu 4 noduri și gradul de exactitate $m + 5$

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx = h\left[\frac{2}{9}\frac{m+5}{m+4}\left(\frac{m+5}{m+2}\right)^{m+2} f\left(x_0 + \frac{m+2}{m+5}h\right) + \right. \tag{3.2}$$

$$+ \frac{3}{2(m+4)}\left(\frac{m+5}{m+3}\right)^{m+3} f\left(x_0 + \frac{m+3}{m+5}h\right) - \frac{2}{9}\frac{m+6}{m+4}\left(\frac{m+6}{m+3}\right)^{m+3} \cdot$$

$$\left. f\left(x_0 + \frac{m+3}{m+6}h\right) + \frac{7}{18(m+4)} f(x_0 + h)\right] + R[f],$$

restul $R[f]$ avînd expresia

$$R[f] = \frac{h^{m+7}}{(m+7)!}\frac{6(3m+17)}{(m+4)(m+5)^2(m+6)} f^{(m+6)}(\xi), \tag{3.3}$$

unde $\xi \in (a, b)$.

Demonstrație. Dacă se consideră formula de integrare (2.2) cu coeficienții (2.8), în cazul în care avem $\frac{\partial f}{\partial y} = 0$, se obține chiar formula de cuadratură (3.2). Expresia restului, avînd în vedere continuitatea derivatelor pînă la ordinul $m + 6$, se deduce din expresia (2.7) a termenului principal al erorii, deoarece dacă $\frac{\partial f}{\partial y} = 0$, găsim că

$$B = C = D = 0,$$

iar

$$N_1 = -\frac{1}{m+3}a_1a_2a_3a_4 + \frac{1}{m+4}\sum_{i,j,k} a_ia_ja_k - \frac{1}{m+5}\sum_{i,j} a_ia_j +$$

$$+ \frac{1}{m+6}\sum_{i=1}^{4} a_i - \frac{1}{m+7}, \tag{3.4}$$

expresie în care a_i sînt dați de (2.8).

OBSERVAȚIA 3.1. Dacă dorim să calculăm valoarea aproximativă $\bar{I}$ a integralei

$$\int_{x_0}^{x_0+h} \bar{f}(x)dx,$$

unde $\bar{f}(x)$ nu satisface condițiile (3.1), atunci avînd în vedere transformarea (1.2) și noua ecuație diferențială (1.3), vom construi funcția $f: [a, b] \to \mathbf{R}$ astfel

$$f(x) = \bar{f}(x) - \sum_{i=0}^{m} \frac{(x - x_0)^i}{i!}\bar{f}^{(i)}(x_0), \tag{3.6}$$

care evident satisface condițiile (3.1). Dacă I este valoarea aproximativă a integralei

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx,$$

calculată cu formula (3.2) atunci din (3.6) prin integrare se obține valoarea aproximativă $\bar{I}$ a integralei (3.5)

$$\bar{I} = I + \sum_{i=0}^{m} \frac{h}{(i+1)!} \bar{f}^{(i)}(x_0). \tag{3.7}$$

BIBLIOGRAFIE

1. COROIAN, I.: *„Contribuții la integrarea numerică a ecuațiilor diferențiale cu ajutorul metodelor de tip Runge-Kutta"*, Teză de doctorat, Univ. Babeș-Bolyai Cluj-Napoca (1979).
2. COTIU, A.: *„Asupra unor extinderi ale unei transformări a lui Fehlberg"*, Bul. Șt. Inst. Politehnic Cluj, 4, 45–54 (1961).
3. COTIU, A.: *„Metodă de tip Runge-Kutta de ordinul n + 4, n > 2 pentru integrarea numerică a ecuațiilor diferențiale de ordinul întîi pe 3 noduri"*, Bul. Șt. Inst. Politehnic Cluj, 5, 39–49 (1962).
4. FEHLBERG, E.: *"Eine Methode zur Fehlerverkleinerung beim Runge-Kutta Verfahren"*, Z A M M, 38, 421–426 (1958).
5. FEHLBERG, E.: *"Neue genauere Runge-Kutta Formeln für Differentialgleichungen n-ter Ordnung"*, Z A M M, 40, 449–455 (1960).

REZUMAT

Pentru problema (1.1) se construiește o metodă de integrare numerică de tip Runge-Kutta-Fehlberg cu ordinul de exactitate $m + 6$, $m \in N$, $m > 1$, necesitînd 4 evaluări ale funcției f, metodă de forma (2.2) și avînd coeficienții (2.8). Plecînd de la această metodă de integrare numerică se deduce formula de cuadratură (3.2) cu gradul de exactitate $m + 5$ și restul avînd expresia (3.3).

A HIGH ORDER NUMERICAL INTEGRATION METHOD AND A CORRESPONDENT CUADRATURE FORMULA

(Abstract)

An integration formula of Runge-Kutta-Fehlberg type for problem (1.1) is derived, which has the order of accuracy $m + 6$, $m > 1$ and requires four evaluations of f. The method is given by (2.2) coefficients (2.8). From this integration formula is obtained the cudrature formula (3.2) — (3.3).