CONȚINUTUL CURSULUI #13:

X.3. Metoda Taylor de ordinul p

Considerăm în continuare problema Cauchy asociată ecuației diferențiale de ordinul întâi:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = f(t,x) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases} \tag{1}$$

unde $f(\cdot,\cdot) : D \subseteq \mathbb{R}\times\mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
Presupunem că soluția problemei (1) este de clasă $C^{p+1}([t_0, t_f])$. Atunci, conform teoremei Taylor avem

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + x'(t_i)h + x''(t_i)\frac{h^2}{2} + ... + x^{(p)}(t_i)\frac{h^p}{p!} + x^{(p+1)}(\xi_i)\frac{h^{p+1}}{(p+1)!} \\ &= x(t_i) + hf(t_i, x(t_i)) + \frac{h^2}{2}\frac{df}{dt}(t_i, x(t_i)) + ... + \frac{h^p}{p!}\frac{d^{(p-1)}f}{(dt)^{p-1}}(t_i, x(t_i)) \\ &+ \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\frac{d^{(p)}f}{(dt)^p}(\xi_i, x(\xi_i)), \quad \xi_i \in (t_i, t_{i+1}) \end{aligned} \tag{2}$$

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + h\sum_{k=1}^{p}\frac{h^{k-1}}{k!}\frac{d^{(k-1)}f}{(dt)^{k-1}}(t_i, x(t_i)) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\frac{d^{(p)}f}{(dt)^p}(\xi_i, x(\xi_i))$$

Neglijând restul aproximării în formula de mai sus și ținând cont de condiția inițială se obține următoarea schemă numerică:

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + h\displaystyle\sum_{k=1}^{p}\frac{h^{k-1}}{k!}\frac{d^{(k-1)}f}{(dt)^{k-1}}(t_i, x_i), \quad i = \overline{1,N} \\ x_1 = x_0 \end{cases} \tag{3}$$

Fie eroarea de trunchiere $\tau_{i+1}(h)$ definită astfel:

$$\tau_{i+1}(h) = \frac{x(t_{i+1}) - x(t_i)}{h} - \sum_{k=1}^{p}\frac{h^{k-1}}{k!}\frac{d^{(k-1)}f}{(dt)^{k-1}}(t_i, x(t_i))$$

$$\tau_{i+1}(h) = \frac{h^p}{(p+1)!}x^{(p+1)}(\xi_i) \tag{4}$$

Fie m astfel încât $\max\limits_{\zeta\in[t_0,t_f]} |x^{(p+1)}(\zeta)| \le m$, atunci avem estimarea locală a erorii:

$$|\tau_{i+1}(h)| = \frac{h^p}{(p+1)!}|x^{(p+1)}(\xi_i)| \le \frac{h^p}{(p+1)!}m = O(h^p)$$

Remarcăm că meodele de tip Taylor sunt precise dar necesită precalcularea derivatelor totale în raport cu t.
Exemplu: Fiind dată funcția $f(\cdot,\cdot) : D \subseteq \mathbb{R}\times\mathbb{R} \to \mathbb{R}, f(t,x) = t^2 + x^2$, ce definește ecuația diferențială (1), să se calculeze $\dfrac{df}{dt}(t,x), \dfrac{d^{(2)}f}{dt^2}(t,x)$
Rezolvare: Se va folosi formula derivatei totale:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt}(t,x) &= \frac{\partial f}{\partial t}(t,x) + \frac{\partial f}{\partial x}(t,x)\dot{x}(t) \\ &= \frac{\partial f}{\partial t}(t,x) + \frac{\partial f}{\partial x}(t,x)f(t,x) \end{aligned} \tag{5}$$

$$\frac{df}{dt}(t,x) = 2t + 2x(t^2 + x^2),$$

$$\frac{d^{(2)}f}{dt^2}(t,x) = \frac{d}{dt}\left(\frac{df}{dt}(t,x)\right) = 2 + 4xt + (6x^2 + 2t^2)(t^2 + x^2).$$

ALGORITM (**Metoda Taylor de ordinul** p)

Date de intrare: $f, t_0, t_f, x_0, N, p, \dfrac{df}{dt}, ..., \dfrac{d^{(p-1)}f}{(dt)^{p-1}}$;
Date de ieșire: $(t_i)_{i=\overline{1,N+1}}, (x_i)_{i=\overline{1,N+1}}$.

STEP 1: $t_1 = t_0; h = \dfrac{t_f - t_0}{N}$;

```
for i = 2 : N + 1 do
    t_i = t_{i-1} + h;
endfor
x_1 = x_0;
```

STEP 2:

```
for i = 1 : N do
```

$$x_{i+1} = x_i + h\sum_{k=1}^{p}\frac{h^{k-1}}{k!}\frac{d^{(k-1)}f}{(dt)^{k-1}}(t_i, x_i);$$

```
endfor
```


X.4. Metode de tip Runge-Kutta.

X.4.1. Metoda punctului central.

Așa cum am văzut în cazul metodelor de tip Taylor este nevoie să se calculeze în prealabil derivatele totale în raport cu t. Metodele de tip Runge-Kutta evită calculul derivatelor totale, iar în schemele numerice intervin doar valorile funcției f.
Pentru aproximarea de ordinul $O(h^2)$ (i.e. $p = 2$) conform relației (2) va rezulta:

$$\begin{cases} x(t_{i+1}) = x(t_i) \quad +h\left(f(t_i, x(t_i)) + \dfrac{h}{2}\dfrac{df}{dt}(t_i, x(t_i)) + O(h^2)\right) \\ x(t_1) = x_0 \end{cases} \tag{6}$$

Înlocuind expresia derivatei totale în (6) și neglijând restul obținem:

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + h\left[f(t_i, x_i) + \dfrac{h}{2}\dfrac{\partial f}{\partial t}(t_i, x_i) + \dfrac{h}{2}\dfrac{\partial f}{\partial x}(t_i, x_i))f(t_i, x_i)\right] \\ x_1 = x_0 \end{cases} \tag{7}$$

Pentru evaluarea parantezei drepte din (7) vom apela la formula dezvoltării în serie Taylor pentru o funcție reală cu două variabile,

$$f(t_i + \Delta t, x_i + \Delta x) = f(t_i, x_i) + \Delta t\frac{\partial f}{\partial t}(t_i, x_i) + \Delta x\frac{\partial f}{\partial x}(t_i, x_i)$$
$$+ \frac{1}{2}\left(\Delta t^2\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}(\tau_i, \xi_i) + 2\Delta t\Delta x\frac{\partial^2 f}{\partial t\partial x}(\tau_i, \xi_i) + \Delta x^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\tau_i, \xi_i)\right)$$
$$(\tau_i, \xi_i) \in (t_i, t_i + \Delta h) \times (x_i, x_i + \Delta x)$$

Dacă alegem $\Delta t = \dfrac{h}{2}$ și $\Delta x = \dfrac{h}{2}f(t_i, x_i)$ obținem

$$f(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2}f(t_i, x_i))$$
$$= f(t_i, x_i) + \frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial t}(t_i, x_i) + \frac{h}{2}f(t_i, x_i)\frac{\partial f}{\partial x}(t_i, x_i) + O(h^2) \tag{8}$$

Neglijând termenul $O(h^2)$ în relația (8) obținem conform (7) următoarea schemă numerică:

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + hf(t_i + \dfrac{h}{2}, x_i + \dfrac{h}{2}f(t_i, x_i)) \\ x_1 = x_0 \end{cases} \tag{9}$$

ALGORITM (**Metoda punctului central**)

Date de intrare: f, t_0, t_f, x_0, N;
Date de ieșire: $(t_i)_{i=\overline{1,N+1}}, (x_i)_{i=\overline{1,N+1}}$.

STEP 1: $t_1 = t_0; h = \dfrac{t_f - t_0}{N}$;

```
for i = 2 : N + 1 do
    t_i = t_{i-1} + h;
endfor
x_1 = x_0;
```

STEP 2:

```
for i = 1 : N do
    K_1 = hf(t_i, x_i);
    K_2 = hf(t_i + h/2, x_i + K_1/2);
    x_{i+1} = x_i + K_2;
endfor
```

X.4.2. Metoda Euler modificată

Soluția problemei Cauchy scrisă sub forma integrală este:

$$x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} f(\tau, x(\tau))d\tau \tag{10}$$

Pentru evaluarea integralei vom folosi formula de cuadratură a trapezului, i.e.

$$\int_t^{t+h} f(\tau, x(\tau))d\tau \approx \frac{h}{2}(f(t, x(t)) + f(t+h, x(t+h))) \tag{11}$$

unde $x(t+h)$ îl vom aproxima conform formulei lui Euler, i.e. $x(t+h) \approx x(t) + hf(t, x(t))$. Astfel, se obține formula lui Euler modificată:

$$x(t+h) \approx x(t) + \frac{h}{2}(f(t, x(t)) + f(t+h, x(t) + hf(t, x(t)))) \tag{12}$$

În baza relației (12) se obține următoarea schemă numerică:

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + \dfrac{h}{2}(f(t_i, x_i) + f(t_i + h, x_i + hf(t_i, x_i))), i = \overline{1, N} \\ x_1 = \alpha \end{cases} \tag{13}$$

sau echivalent

$$\begin{cases} K_1 = hf(t_i, x_i) \\ K_2 = hf(t_i + h, x_i + K_1) \\ x_{i+1} = x_i + \dfrac{1}{2}(K_1 + K_2), i = \overline{1, N} \\ x_1 = x_0 \end{cases} \tag{14}$$

Este evident că această metodă va avea o aproximare îmbunătățită față de metoda Euler, datorită aproximării integralei cu formula de cuadratură a trapezului, în timp ce metoda Euler folosește, am putea spune, formula de cuadratură a dreptunghiului. Schema numerică poate fi extinsă și în cazul ecuțiilor diferențiale pe $\mathbb{R}^n$.

ALGORITM (**Metoda Euler modificată**)

Date de intrare: f, t_0, t_f, x_0, N;
Date de ieșire: $(t_i)_{i=\overline{1,N+1}}, (x_i)_{i=\overline{1,N+1}}$.

STEP 1: $t_1 = t_0; h = \dfrac{t_f - t_0}{N}$;

```
for i = 2 : N + 1 do
    t_i = t_{i-1} + h;
endfor
x_1 = t_0;
```

STEP 2:

```
for i = 1 : N do
    K_1 = hf(t_i, x_i);
    K_2 = hf(t_i + h, x_i + K_1);
    x_{i+1} = x_i + 1/2 (K_1 + K_2);
endfor
```


X.4.3. Schema generală a metodei de tip Runge-Kutta de ordinul 2. Metoda Heun

Schema generală a metodei Runge - Kutta de ordinul 2 are următoarea formă:

$$\begin{cases} K_1 = hf(t_i, x(t_i)) \\ K_2 = hf(t_i + \beta h, x(t_i) + \delta K_1) \\ x(t_{i+1}) = x(t_i) + a_1 K_1 + a_2 K_2 + O(h^3) \end{cases} \tag{15}$$

Conform teoremei Taylor rezultă:

$$\begin{aligned} K_2 &= hf(t_i + \beta h, x(t_i) + \delta K_1) = hf(t_i, x(t_i)) \\ &+ \left(h^2 \beta \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, x(t_i)) + h\delta K_1 \frac{\partial f}{\partial x}(t_i, x(t_i)) \right) + O(h^3) \\ &= hf(t_i, x(t_i)) + h^2 \left(\beta \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, x(t_i)) + \delta f(t_i, x(t_i)) \frac{\partial f}{\partial x}(t_i, x(t_i) \right) \\ &+ O(h^3) \end{aligned}$$

Înlocuind expresiile pentru K_1 și K_2 în relația $(15)_3$ rezultă:

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + h(a_1 + a_2) f(t_i, x(t_i)) + a_2 h^2 \left(\beta \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, x(t_i)) + \delta f(t_i, x(t_i)) \frac{\partial f}{\partial x}(t_i, x(t_i)) \right) + O(h^3)$$

Pe de altă parte, conform (6), avem

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + h \left[f(t_i, x(t_i)) + \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, x(t_i)) + \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial x}(t_i, x(t_i)) f(t_i, x(t_i)) \right] + O(h^3)$$

Identificând termenii din ultimele două relații, se obține un sistem de 3 ecuații și 4 necunoscute, având o infinitate de soluții,

$$\begin{cases} a_1 + a_2 = 1 \\ a_2 \beta = \frac{1}{2} \\ a_2 \delta = \frac{1}{2} \end{cases} \tag{16}$$

Se observă că dacă $a_1 = \frac{1}{2}$, atunci $a_2 = \frac{1}{2}, \beta = \delta = 1$ și se obține shema numerică pentru Euler modificată. Dacă $a_1 = 0$, atunci $a_2 = 1, \beta = \delta = \frac{1}{2}$ și se obține schema numerică pentru metoda punctului central. Metoda Heun presupune alegerea constantei $a_1 = \frac{1}{4}$. Rezultă $a_2 = \frac{3}{4}, \beta = \delta = \frac{2}{3}$.

ALGORITM (Metoda Heun)

Date de intrare: f, t_0, t_f, x_0, N;
Date de ieșire: $(t_i)_{i=\overline{1,N+1}}, (x_i)_{i=\overline{1,N+1}}$.

STEP 1: $t_1 = t_0; h = \frac{t_f - t_0}{N}$;
`for` $i = 2 : N+1$ `do`
$t_i = t_{i-1} + h$;
`endfor`
$x_1 = x_0$;

STEP 2: `for` $i = 1 : N$ `do`
$K_1 = hf(t_i, x_i)$;
$K_2 = hf(t_i + \frac{2}{3}h, x_i + \frac{2}{3}K_1)$;
$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{4}(K_1 + 3K_2)$;
`endfor`

X.4.4. Metoda Runge-Kutta de ordinul 4

ALGORITM (Metoda Runge-Kutta de ordinul 4)

Date de intrare: f, t_0, t_f, x_0, N; **Date de ieșire:** $(t_i)_{i=\overline{1,N+1}}, (x_i)_{i=\overline{1,N+1}}$.

STEP 1: $t_1 = t_0; h = \frac{t_f - t_0}{N}$;
`for` $i = 2 : N+1$ `do`
$t_i = t_{i-1} + h$;
`endfor`
$x_1 = x_0$;

STEP 2: `for` $i = 1 : N$ `do`
$K_1 = hf(t_i, x_i)$;
$K_2 = hf(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{K_1}{2})$;
$K_3 = hf(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{K_2}{2})$;
$K_4 = hf(t_i + h, x_i + K_3)$;
$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$;
`endfor`