METODE DE INTEGRARE NUMERICĂ A ECUAŢIILOR DIFERENŢIALE FĂRĂ DERIVATE PARŢIALE

Aceste metode au drept scop **determinarea graficului funcţiei** pentru care se cunoaşte **expresia derivatei**:

$$y' = f(x, y)$$

precum şi **valoarea funcţiei într-un punct**:

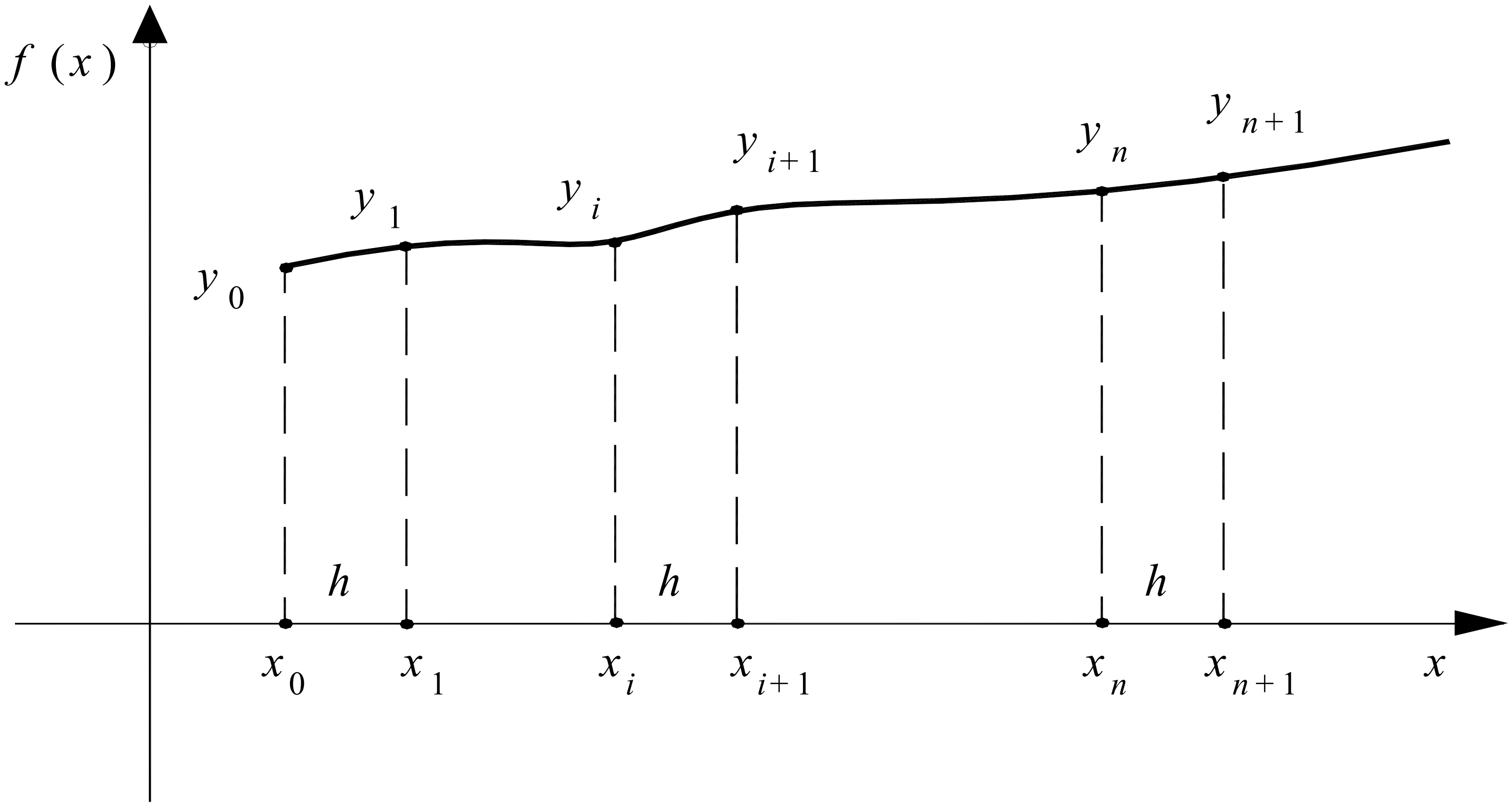
$$y(x_0) = y_0$$

această valoare purtând numele de ***valoare iniţială***.

Metodele utilizează formula de dezvoltare în serie Taylor, relaţie care permite **determinarea valorii funcţiei într-un punct, dacă se cunoaşte valoarea funcţiei într-un punct alăturat**. Pentru o funcţie de o singură variabilă, formula lui Taylor este:

$$\boxed{y(x + \Delta x) = y(x) + \Delta x \cdot y' + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \cdot y'' + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \cdot y''' + \cdots}$$

Deoarece formula de dezvoltare în serie Taylor are o infinitate de termeni, se poate obţine o **relaţie de recurenţă** prin păstrarea unui număr finit de termeni şi alegerea unui pas de integrare ***h***.



Explicativă la integrarea numerică utilizând formula lui Taylor.

Ca urmare calculul valorilor funcţiei în puncte succesive se poate face utilizând o **relaţie de recurenţă** derivată din formula de dezvoltare în serie Taylor, astfel:

$$\boxed{y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m^{'} + \frac{h^2}{2!} \cdot y_m^{''} + \frac{h^3}{3!} \cdot y_m^{'''}}$$

O astfel de relaţie nu poate fi utilizată practic deoarece expresia conţine derivatele de ordin superior ale funcţiei, care sunt **necunoscute**. Ca urmare metodele de integrare numerică stabilesc formule de recurenţă care nu conţin derivatele funcţiei fiind totodată echivalente formulei de dezvoltare în serie Taylor.

Metodele de integrare pot fi de două categorii, în funcţie de cantitatea de informaţie utilizată la deducerea valorii funcţiei într-un punct, precum şi de modul de efectuare al calculelor:

- ***Metode directe*** sau metode de tip **Runge-Kutta**, acest tip de metode utilizează numai informaţiile obţinute la punctul precedent iar calculul se efectuează prin aplicarea relaţiei de recurenţă.
- ***Metode indirecte*** sau de tip **predictor-corector**, acest tip de metode utilizează informaţiile obţinute la două puncte determinate anterior iar calculul se efectuează printr-un proces iterativ în care relaţia de recurenţă este aplicată până la obţinerea valorii funcţiei cu o precizie impusă iniţial.

METODE DIRECTE
SAU METODE DE TIP RUNGE-KUTTA

Acest tip de metode utilizează o formulă de recurenţă care simulează relaţia de dezvoltare în serie Taylor până la termenul care conţine factorul h^p

valoarea lui ***p*** reprezentând ***ordinul*** metodei.

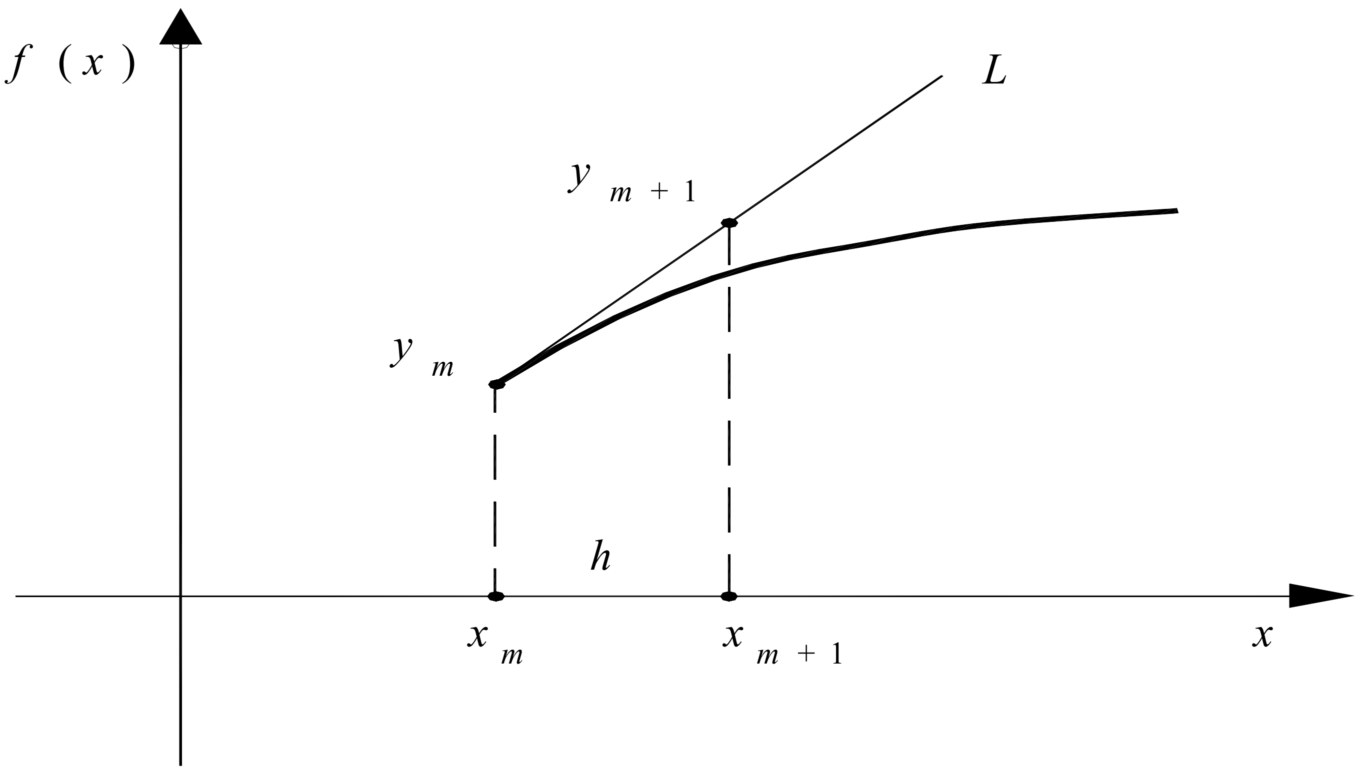
Exemplu: o metodă care utilizează o formulă de recurenţă care simulează

relaţia de dezvoltare în serie Taylor până la termenul care conţine factorul h^4

va fi o metodă Runge-Kutta de **ordinul 4**.

Modalitatea de deducere a formulelor de recurenţă este prezentată în continuare:

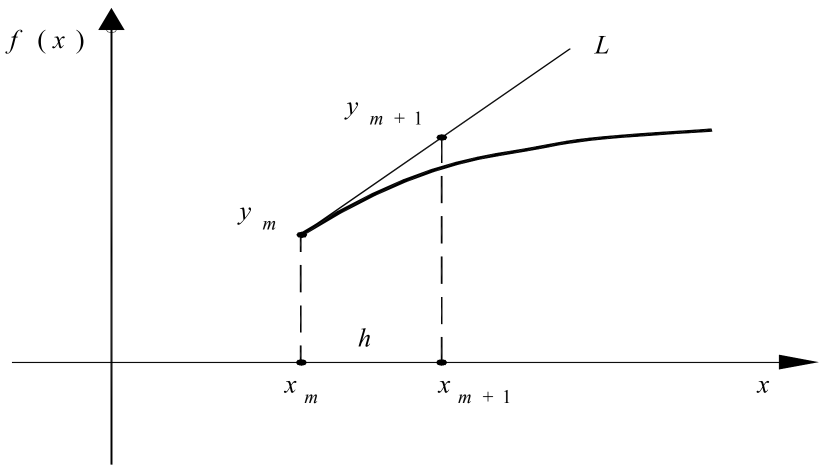
a) Metoda Runge-Kutta de **ordinul 1** – metoda lui Euler



Metoda constă în aproximarea graficului funcţiei într-un punct prin tangenta la grafic dusă în acel punct.

Presupunem cunoscute coordonatele (x_m, y_m)

ale unui punct aparţinând graficului funcţiei.



Calculând valoarea derivatei funcţiei în acel punct, se obţine valoarea

$$y_m' = f(x_m, y_m)$$

care reprezintă panta tangentei la grafic în acel punct şi a cărei ecuaţie este:

$$y - y_m = y_m' \cdot (x - x_m)$$

Dacă aproximăm graficul funcţiei cu tangenta la grafic rezultă că obţinem următorul punct al graficului intersectând tangenta cu verticala dusă în dreptul abscisei $x_{m+1} = x_m + h$ ordonata acestui punct va fi:

$$\boxed{y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m'}$$

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m' + \frac{h^2}{2!} \cdot y_m'' + \frac{h^3}{3!} \cdot y_m'''$$

Relaţia reprezintă formula de recurenţă în metoda Euler.

Relaţia reproduce primii doi termeni ai dezvoltării în serie Taylor, deci este echivalentă acesteia până la termenul care conţine factorul h. Ca urmare, metoda Euler este o metodă de tip **Runge-Kutta de ordinul 1**.

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m^{'} \qquad\qquad y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m^{'} + \frac{h^2}{2!} \cdot y_m^{''} + \frac{h^3}{3!} \cdot y_m^{'''}$$

Deoarece orice relaţie de recurenţă are un număr finit de termeni rezultă că va determina o eroare de trunchiere, notată cu e_T

Valoarea acesteia poate fi apreciată în funcţie de pasul de integrare *h*.

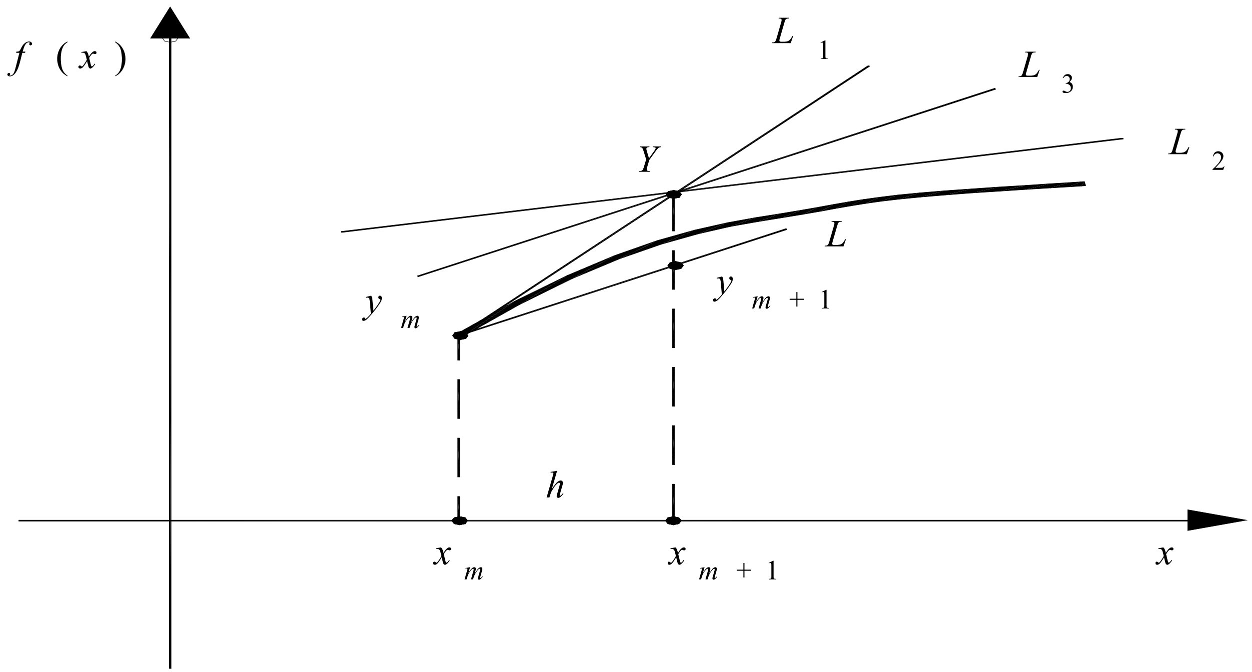
Deoarece valoarea pasului de integrare este subunitară rezultă că dintre toţi termenii neglijaţi, din formula de dezvoltare în serie Taylor, cea mai mare valoare o va avea cel care conţine pe *h* la puterea cea mai mică adică **primul termen neglijat**. Ca urmare la <u>metoda Euler eroarea de trunchiere poate fi apreciată ca fiind</u> $e_T = k \cdot h^2$

Aceasta determină o valoare semnificativă a erorii de trunchiere şi ca urmare gradul de precizie al metodei Euler este redus.

Metode Runge-Kutta de ordinul 2

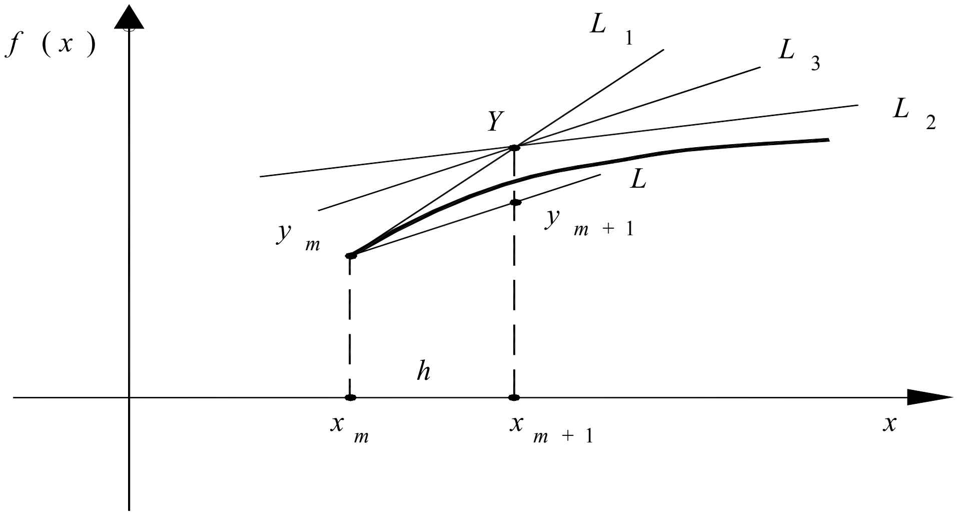
Aceste metode stabilesc formule de recurenţă care simulează formule de dezvoltare în serie Taylor până la termenul care conţine factorul h^2 ca urmare eroarea de trunchiere produsă va fi apreciată ca fiind $e_T = k \cdot h^3$, deci metodele sunt mai precise decât cele de ordinul 1. După cum se va arăta în continuare, se pot determina o infinitate de formule de recurenţă de tipul menţionat. Se vor prezenta două dintre ele precum şi o generalizare.

Metoda lui Euler îmbunătăţită



Presupunem cunoscute coordonatele

$$\left(x_m, y_m\right)$$



Valoarea derivatei funcţiei în acel punct:

$$y_m^{'} = f\left(x_m, y_m\right)$$

care reprezintă panta tangentei la grafic în acel punct, dreapta $\boldsymbol{L_1}$

a cărei ecuaţie este: $y - y_m = y_m^{'} \cdot \left(x - x_m\right)$

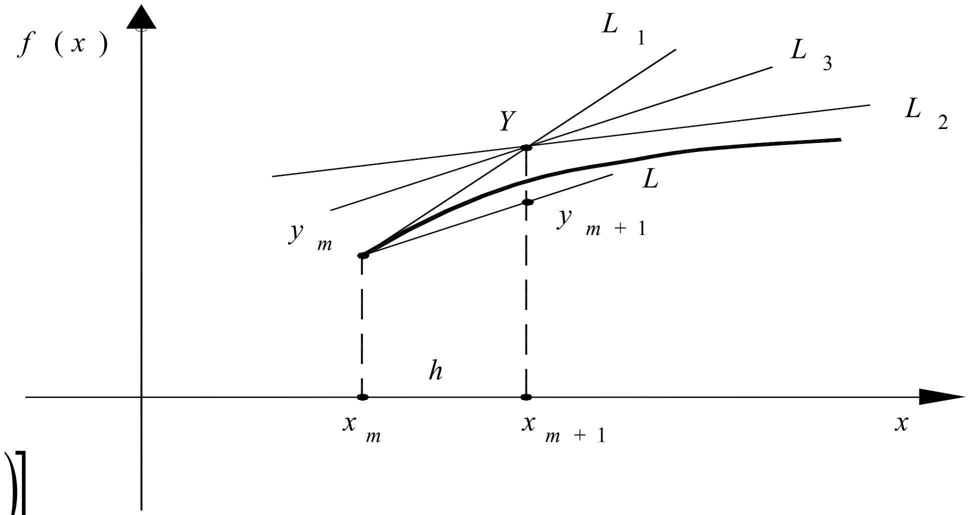
Intersecţia acesteia cu verticala dusă în dreptul abscisei $x_{m+1} = x_m + h$

determină valoarea: $Y = y_m + h \cdot y_m^{'}$

Pentru punctul de coordonate $\left[x_{m+1}, Y\right]$ se recalculează derivata funcţiei

obţinându-se: $f\left(x_m + h, y_m + h \cdot y_m^{'}\right)$ care reprezintă panta dreptei $\boldsymbol{L_2}$

Se determină panta dreptei ***L*** $_3$ ca medie aritmetică a pantelor dreptelor ***L*** $_1$ şi ***L*** $_2$:



$$\Psi = \frac{1}{2} \cdot \left[f\left(x_m, y_m\right) + f\left(x_m + h, y_m + h \cdot y_m^{'}\right) \right]$$

Dreapta ***L*** de pantă Ψ si care trece prin punctul de coordonate **(x_m, y_m)** are ecuatia:

$$y - y_m = \Psi \cdot \left(x - x_m\right)$$

Obţinem următorul punct al graficului intersectând dreapta *L* cu verticala dusă în dreptul abscisei x_{m+1} ,ordonata acestui punct va fi:

$$\boxed{y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2} \cdot \left[f\left(x_m, y_m\right) + f\left(x_m + h, y_m + h \cdot y_m^{'}\right) \right]}$$

relaţie care reprezintă **formula de recurenţă pentru metoda Euler îmbunătăţită**.

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2} \cdot \left[f(x_m, y_m) + f\left(x_m + h, y_m + h \cdot y_m^{'}\right)\right] \qquad y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m^{'} + \frac{h^2}{2!} \cdot y_m^{''} + \frac{h^3}{3!} \cdot y_m^{'''}$$

Pentru a demonstra că relaţia rececurenţă este echivalentă dezvoltării Taylor până la termenul care conţine $\boldsymbol{h^2}$ se va proceda după cum urmează. Se utilizează formula de dezvoltare în serie Taylor pentru o funcţie de două variabile:

$$f(x + \Delta x, y + \Delta y) = f(x, y) + \Delta x \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + \Delta y \cdot \frac{\partial f}{\partial y} + \cdots$$

cu ajutorul căreia se poate scrie:

$$f\left(x_m + h, y_m + h \cdot y_m^{'}\right) = f(x_m, y_m) + h \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + h \cdot y_m^{'} \cdot \frac{\partial f}{\partial y}$$

se mai notează: $\quad y_m^{'} = f(x_m, y_m)$

După înlocuiri şi reducerea termenilor asemenea, se obţine:

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m^{'} + \frac{h^2}{2} \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial x} + y_m^{'} \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \right)$$

$$y'' = \frac{\partial f}{\partial x} + y' \cdot \frac{\partial f}{\partial y}$$

ca urmare relaţia

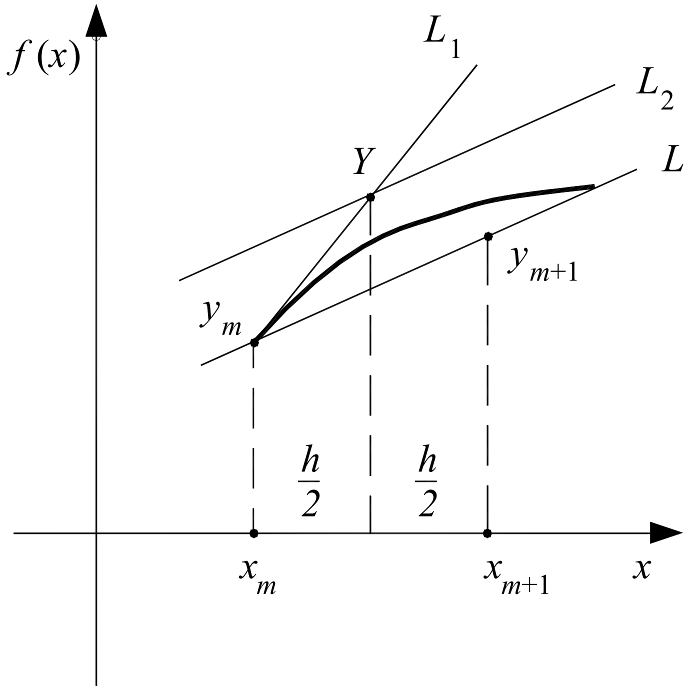
$$y_{m+1} = y_m + h \cdot y'_m + \frac{h^2}{2} \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial x} + y'_m \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \right)$$

devine:

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot y'_m + \frac{h^2}{2} \cdot y''_m$$

adică este echivalentă relaţiei de dezvoltare Taylor până la termenul care conţine factorul $\boldsymbol{h^2}$ prin urmare metoda Euler îmbunătăţită este o metodă Runge-Kutta de ordinul 2.

Metoda lui Euler modificată



Presupunem cunoscute coordonatele (x_m, y_m)

ale unui punct aparţinând graficului funcţiei.

Calculând valoarea derivatei funcţiei în acel punct, se obţine valoarea:

$$y_m^{'} = f(x_m, y_m)$$

care reprezintă panta tangentei la grafic în acel punct, dreapta $\boldsymbol{L_1}$, şi a cărei ecuaţie este:

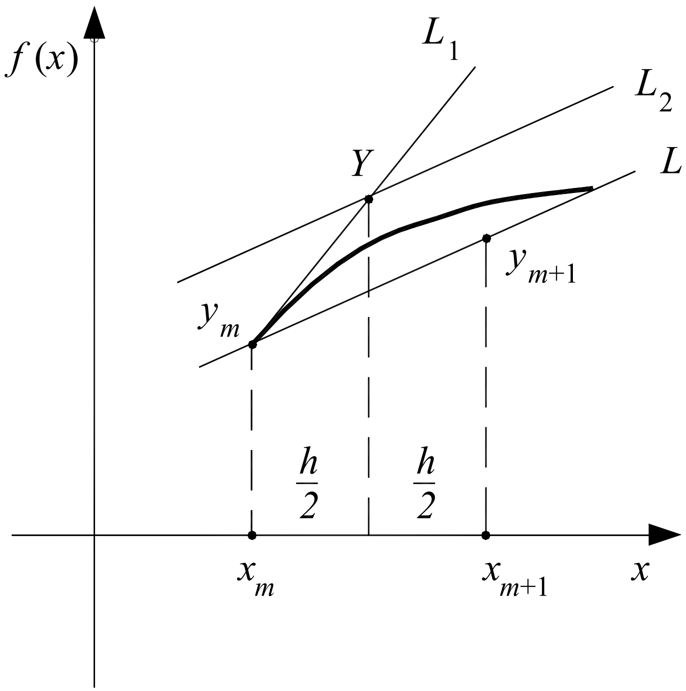
$$y - y_m = y_m^{'} \cdot (x - x_m)$$

Intersecţia acesteia cu verticala dusă în dreptul abscisei $x_m + \frac{h}{2}$ determină valoarea:

$$Y = y_m + \frac{h}{2} \cdot y_m^{'}$$

Pentru punctul de coordonate

$$\left[x_m + \frac{h}{2}, Y\right]$$



se recalculează valoarea derivatei funcţiei cu relaţia

$$y' = f(x, y)$$

obţinându-se valoarea:

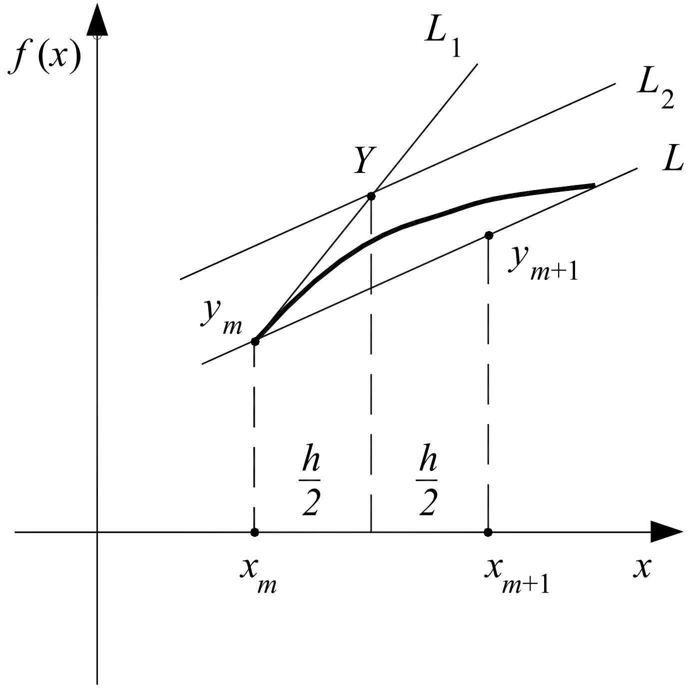
$f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h}{2} \cdot y_m'\right)$ care reprezintă panta dreptei $\boldsymbol{L_2}$

Dreapta $\boldsymbol{L}$ paralelă cu $\boldsymbol{L_2}$ şi care trece prin punctul de coordonate (x_m, y_m)

va avea ecuaţia:

$$y - y_m = f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h}{2} \cdot y_m'\right) \cdot (x - x_m)$$

$$y - y_m = f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h}{2} \cdot y_m^{'}\right) \cdot \left(x - x_m\right)$$



Obţinem următorul punct al graficului intersectând dreapta L cu verticala dusă în dreptul

abscisei $x_{m+1} = x_m + h$

ordonata acestui punct va fi:

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h}{2} \cdot y_m^{'}\right)$$

relaţie care reprezintă **formula de recurenţă pentru metoda Euler modificată**.

Într-un mod similar celui utilizat la metoda Euler îmbunătăţită se poate arăta că şi formula de recurenţă dedusă este echivalentă dezvoltării Taylor până la termenul care conţine factorul reprezintă o metodă Runge-Kutta de ordinul 2.

Generalizare

După cum se poate constata din relaţiile anterioare pentru determinarea relaţiilor de recurenţă pentru metodele Runge-Kutta de ordinul 2, este utilizată o dreaptă de pantă Ψ care trece prin punctul de coordonate $\left(x_m, y_m\right)$

$$y - y_m = \Psi \cdot \left(x - x_m\right)$$

Vom determina panta acestei drepte astfel încât utilizarea ei să conducă la o formulă de recurenţă valabilă pentru o metodă Runge-Kutta de ordinul 2. În acest scop vom exprima panta $\boldsymbol{\Psi}$ prin expresia:

$$\Psi = a_1 \cdot f\left(x_m, y_m\right) + a_2 \cdot f\left(x_m + b_1 \cdot h, y_m + b_2 \cdot h \cdot y_m'\right)$$

în care au fost introduşi coeficienţii reali $a_1,\ a_2,\ b_1,\ b_2$

a căror valori urmează a fi determinate

$$y - y_m = \Psi \cdot (x - x_m) \qquad \Psi = a_1 \cdot f(x_m, y_m) + a_2 \cdot f(x_m + b_1 \cdot h, y_m + b_2 \cdot h \cdot y_m^{'})$$

Pentru valorile:

$a_1 = \frac{1}{2},\ a_2 = \frac{1}{2},\ b_1 = 1,\ b_2 = 1$ se obţine relaţia de recurenţă:

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2} \cdot \left[f(x_m, y_m) + f(x_m + h, y_m + h \cdot y_m^{'}) \right]$$

Pentru valorile:

$a_1 = 0,\ a_2 = 1,\ b_1 = \frac{1}{2},\ b_2 = \frac{1}{2}$ se obţine relaţia de recurenţă:

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h}{2} \cdot y_m^{'} \right)$$

$$y - y_m = \Psi \cdot (x - x_m) \qquad \Psi = a_1 \cdot f(x_m, y_m) + a_2 \cdot f\left(x_m + b_1 \cdot h, y_m + b_2 \cdot h \cdot y_m'\right)$$

Determinarea valorilor posibile ale coeficienţilor reali $a_1,\ a_2,\ b_1,\ b_2$

se va efectua punând condiţia ca relaţiile:

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot \Psi$$

şi să fie echivalente.

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m' + \frac{h^2}{2!} \cdot y_m''$$

Utilizând formula de dezvoltare în serie Taylor pentru o funcţie de două variabile, se poate exprima:

$$f\left(x_m + b_1 \cdot h, y_m + b_2 \cdot h \cdot y_m'\right) = f(x_m, y_m) + b_1 \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + b_2 \cdot y_m' \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial y}$$

$$y - y_m = \Psi \cdot (x - x_m) \qquad \Psi = a_1 \cdot f(x_m, y_m) + a_2 \cdot f\left(x_m + b_1 \cdot h, y_m + b_2 \cdot h \cdot y'_m\right)$$

$$f\left(x_m + b_1 \cdot h, y_m + b_2 \cdot h \cdot y'_m\right) = f(x_m, y_m) + b_1 \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + b_2 \cdot y'_m \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial y}$$

După înlocuire şi reducerea termenilor asemenea se obţine:

$$\Psi = (a_1 + a_2) \cdot f(x_m, y_m) + a_2 \cdot b_1 \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + a_2 \cdot b_2 \cdot y'_m \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial y}$$

sau:

$$\Psi = (a_1 + a_2) \cdot y'_m + a_2 \cdot b_1 \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + a_2 \cdot b_2 \cdot y'_m \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial y}$$

şi ca urmare:

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot \left[(a_1 + a_2) \cdot y'_m + a_2 \cdot b_1 \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + a_2 \cdot b_2 \cdot y'_m \cdot h \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \right]$$

sau

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot (a_1 + a_2) \cdot y'_m + h^2 \cdot \left(a_2 \cdot b_1 \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + a_2 \cdot b_2 \cdot y'_m \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \right)$$

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot y_m' + \frac{h^2}{2!} \cdot y_m''$$

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot (a_1 + a_2) \cdot y_m' + h^2 \cdot \left(a_2 \cdot b_1 \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + a_2 \cdot b_2 \cdot y_m' \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \right)$$

Condiţiile de echivalenţă vor fi:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 & = & 1 \\ a_2 \cdot b_1 & = & \frac{1}{2} \\ a_2 \cdot b_2 & = & \frac{1}{2} \end{cases}$$

Rezultă prin urmare un sistem de 3 ecuaţii cu 4 necunoscute, sistem compatibil nedeterminat.

$$\begin{cases} a_1 + a_2 & = & 1 \\ a_2 \cdot b_1 & = & \frac{1}{2} \\ a_2 \cdot b_2 & = & \frac{1}{2} \end{cases}$$

Se alege una dintre necunoscute ca variabilă şi se obţine:

$$\begin{cases} a_1 & = & 1-\lambda \\ a_2 & = & \lambda \\ b_1 & = & \dfrac{1}{2\cdot\lambda} \\ b_2 & = & \dfrac{1}{2\cdot\lambda} \end{cases} \qquad \lambda \in R - \{0\}$$

Pentru $\lambda = \frac{1}{2}$ se obţine relaţia de recurenţă

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2} \cdot \left[f(x_m, y_m) + f(x_m + h, y_m + h \cdot y_m') \right]$$

$\lambda = 1$ se obţine relaţia de recurenţă

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h}{2} \cdot y_m' \right)$$

În mod analog se pot determina metode Runge-Kutta de ordinul 3 şi 4.

Cea mai utilizată metodă este metoda Runge-Kutta de ordinul 4 care este definită prin următoarea relaţie de recurenţă:

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{6} \cdot \left(k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4\right)$$

unde

$$k_1 = f\left(x_m, y_m\right)$$

$$k_2 = f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h \cdot k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h \cdot k_2}{2}\right)$$

$$k_4 = f\left(x_m + h, y_m + h \cdot k_3\right)$$

Eroarea de trunchiere în acest caz este $e_T \approx K \cdot h^5$

Fie Y_m valoarea reală a soluţiei în punctul $x = x_0 + m \cdot h$, ca urmare:

$$Y_m = y_m^{(h)} + K \cdot h^5$$

unde indicele superior (h) indică faptul că $\dot{y}_m$ a fost calculat pentru dimensiunea h a intervalulu

Recalculăm soluţia pentru o dimensiune de $\dfrac{h}{2}$, astfel încât

$$Y_m = y_m^{\left(\frac{h}{2}\right)} + K \cdot \left(\frac{h}{2}\right)^5$$

Scăzând relaţiile obţinem:

$$y_m^{(h)} - y_m^{\left(\frac{h}{2}\right)} = -\frac{31}{32} \cdot K \cdot h^5$$

iar eroarea de trunchiere este

$$e_T \approx K \cdot h^5 = \frac{32}{31} \cdot \left(y_m^{\left(\frac{h}{2}\right)} - y_m^{(h)} \right)$$

Caz particular: $f(x,y) = F(x)$

În situaţia în care funcţia de integrat depinde numai de x

$$y' = F(x)$$

şi ca urmare

$$\int_{x_0}^{x} F(x) \cdot \mathrm{d}x = y(x) - y(x_0) = y(x) - y_0$$

În continuare vom utiliza mărimea: $p = \dfrac{h}{2}$ precum şi următoarele notaţii:

$$F_{2m} = F(x_0 + m \cdot h) = F(x_0 + 2m \cdot p)$$

$$Y_{2m} = y(x_0 + m \cdot h) = y(x_0 + 2m \cdot p)$$

Utilizând aceste notaţii obţinem:

$$k_1 = f(x_m, y_m) \qquad\qquad k_1 = f(x_m) = F_{2m}$$

$$k_2 = f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h \cdot k_1}{2}\right) \qquad\qquad k_2 = f\left(x_m + \frac{h}{2}\right) = F_{2m+1}$$

$$k_3 = f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h \cdot k_2}{2}\right) \qquad\qquad k_3 = f\left(x_m + \frac{h}{2}\right) = F_{2m+1}$$

$$k_4 = f(x_m + h, y_m + h \cdot k_3) \qquad\qquad k_4 = f(x_m + h) = F_{2m+2}$$

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{6} \cdot (k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4)$$

şi ca urmare relaţia de recurenţă devine:

$$Y_{2m+2} - Y_{2m} = \frac{p}{3} \cdot (F_{2m} + 4 \cdot F_{2m+1} + F_{2m+2})$$

$$Y_{2m+2} - Y_{2m} = \frac{p}{3} \cdot \left(F_{2m} + 4 \cdot F_{2m+1} + F_{2m+2}\right) \qquad \int_{x_0}^{x} F(x) \cdot \mathrm{d}x = y(x) - y(x_0) = y(x) - y_0$$

pentru $m = 0, 1, 2, \ldots, n - 1$ obţinem:

$$Y_2 - Y_0 = \frac{p}{3} \cdot \left(F_0 + 4 \cdot F_1 + F_2\right)$$

$$Y_4 - Y_2 = \frac{p}{3} \cdot \left(F_2 + 4 \cdot F_3 + F_4\right)$$

$$Y_6 - Y_4 = \frac{p}{3} \cdot \left(F_4 + 4 \cdot F_5 + F_6\right)$$

……………………….

$$Y_{2n} - Y_{2n-2} = \frac{p}{3} \cdot \left(F_{2n-2} + 4 \cdot F_{2n-1} + F_{2n}\right)$$

Adunând aceste ecuaţii, obţinem

$$Y_{2n} - Y_0 = \frac{p}{3} \cdot \left(F_0 + 4 \cdot F_1 + 2 \cdot F_2 + 4 \cdot F_3 + 2 \cdot F_4 + \cdots + 2 \cdot F_{2n-2} + 4 \cdot F_{2n-1} + F_{2n}\right)$$

Relaţia obţinută reprezintă formula lui Simpson. Ca urmare, **metoda Runge-Kutta de ordinul 4 o generalizare a metodei Simpson pentru funcţii de mai multe variabile**. Din acest motiv este numită şi metoda Runge-Kutta-Simpson.