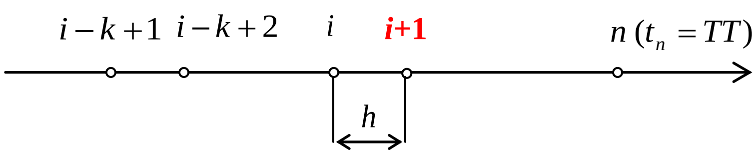
4.1.1 Metode bazate pe derivare numerică (BDF)

Considerăm din nou, problema cu valori iniţiale

$$x' = f(t,x); \qquad x(t_0) = x^{(0)} \tag{41}$$

În metodele anterioare s-a integrat ecuaţia (41) şi s-a utilizat polinomul de interpolare pentru funcţia $f(t, x(t))$. Considerăm acum ecuaţia (41), şi polinomul de interpolare pentru funcţia $x(t)$, pe nodurile $t_{i+1}, t_i, \ldots, t_{i-k+1}$ şi valorile $x_{i+1}, \ldots, x_{i-k+1}$ (polinom de grad k):



$$q_k(t) = q_k(t_i + sh) = \sum_{j=0}^{k} (-1)^j \binom{-s+1}{j} \nabla^j x_{i+1},$$

unde $t = t_i + sh$, $s = (t - t_i)/h$.

[Reamintim că:

Diferența regresivă a funcției f pe punctul x, cu pasul h, este

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$$

și că:

$$\nabla f(x) = \Delta f(x-h);$$

$\nabla^r f(x) = \Delta^r f(x - rh)$, sau $\nabla^r f_j = \Delta^r f_{j-r}$.]

Cerem ca polinomul $q_k(t)$ să satisfacă ecuaţia diferenţială pe punctul t_{i+1}:

$$q_k'(t_{i+1}) = f(t_{i+1}, x_{i+1}) \tag{52}$$

Ecuaţia (52) este ecuaţia implicită din care se determină necunoscuta x_{i+1}. Avem:

$$q_k'(t) = \frac{dq_k(s)}{ds} \cdot \frac{1}{h}, \qquad \frac{dq_k(s)}{ds} = \sum_{j=0}^{k+1} (-1)^j \frac{d}{ds}\binom{-s+1}{j} \nabla^j x_{i+1},$$

de unde, ţinând cont de $t = t_{i+1} \Leftrightarrow s = 1$, rezultă

$$q_k'(t_{i+1}) = \frac{1}{h}\sum_{j=0}^{k} (-1)^j \frac{d}{ds}\binom{-s+1}{j}\bigg|_{s=1} \nabla^j x_{i+1}$$

Cu aceasta, ecuaţia (52) devine formula implicită

$$\sum_{j=0}^{k} \delta_j \nabla^j x_{i+1} = hf_{i+1}, \tag{53}$$

unde s-a pus

$$\delta_j = (-1)^j \frac{d}{ds}\binom{-s+1}{j}\bigg|_{s=1}$$

Cu definiţia coeficientului binomial avem

$$\binom{-s+1}{j} = (-1)^j \frac{(s-1)s(s+1)\ldots(s+j-2)}{j!},$$

cu care se obţine

$$\delta_j = \frac{1}{j!}\prod_{l=-1}^{j-2} \frac{(s-1)s(s+1)\ldots(s+j-2)}{s+l}\bigg|_{s=1},$$

sau:

$$\delta_0 = 0; \qquad \delta_j = \frac{1}{j}, \quad j \geq 1$$

Formula (53) devine:

$$\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j} \nabla^j x_{i+1} = hf_{i+1} \tag{54}$$

Formulele (54) se numesc "formule de derivare înapoi" (*Backward Differentiation Formulae*) şi metodele bazate pe aceste formule se zic *metode BDF*. Ele se utilizează în integrarea numerică a ecuaţiilor diferenţiale rigide – v. 5.

Utilizăm expresia diferențelor înapoi ale funcției f pe t_i:

$$\nabla^j f_i = \sum_{l=0}^{j} (-1)^l \binom{j}{l} f_{i-l} ,$$

pe care o scriem sub forma

$$\nabla^j f_i = \sum_{l=0}^{k} (-1)^l c_l^j f_{i-l}$$

unde definim

$$c_l^j = \begin{cases} \binom{j}{l} & l \le j \\ 0 & l > j \end{cases}$$

Luăm acum, $f_i = x_{i+1}$.

Rezultă

$$\nabla^j x_{i+1} = \sum_{l=0}^{k} (-1)^l c_l^j x_{i+1-l}$$

(54) devine:

$$\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j} \sum_{l=0}^{k} (-1)^l c_l^j x_{i+1-l} = hf_{i+1}$$

Intervertind ordinea de sumare, rezultă:

$$\sum_{l=0}^{k} (-1)^l \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j} c_l^j x_{i+1-l} = hf_{i+1}$$

În fine, cu:

$$c_l = (-1)^l \sum_{j=l}^{k} \frac{1}{j} c_l^j \text{ pentru } l \ge 1, \text{ şi } c_0 = \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j}. \tag{55}$$

Formulele (54) explicitate în termenii x_{i+1-l} sunt:

$$\sum_{l=0}^{k} c_l x_{i+1-l} = hf_{i+1} \tag{56}$$

Pentru $k = \overline{1,6}$, coeficienţii c_l sunt daţi mai jos. Pentru k > 6, metodele BDF sunt instabile (Hairer et al. (1987)).

Coeficienţii c_l pentru metodele BDF – ecuaţia (54a)

k	x_{i+1}	x_i	x_{i-1}	x_{i-2}	x_{i-3}	x_{i-4}	x_{i-5}
1	1	-1					
2	3/2	-2	1/2				
3	11/6	-3	3/2	-1/3			
4	25/12	-4	3	-4/3	1/4		
5	137/60	-5	5	-10/3	5/4	-1/5	
6	147/60	-6	15/2	-20/3	15/4	-6/5	1/6

Ordin

Din deducerea formulelor BDF rezultă că acestea sunt exacte pentru cazul în care soluţia este un polinom de grad k (x şi q_k coincid). Cu un raţionament analog cu cel din 4.3.2, rezultă că metodele BDF au ordinul $p = k$.

Implementare – Valori de start

Să considerăm, spre exemplu, formula de ordinul 4 (k = 4):

$$c_{40}x_{i+1} + c_{41}x_i + c_{42}x_{i-1} + c_{43}x_{i-2} + c_{44}x_{i-3} = hf_{i+1}$$

Coeficienții sunt notați acum c_{kl} pentru a evidenția și ordinul k al metodei.

Pentru k = 4, coeficienții sunt: 25/12 -4 3 -4/3 1/4

Concret:

$$\frac{25}{12}x_{i+1} - 4x_i + 3x_{i-1} - \frac{4}{3}x_{i-2} + \frac{1}{4}x_{i-3} = hf_{i+1}$$

În primul moment, $i = 0$, formula este

$$\frac{25}{12}x_1 - 4x_0 + 3x_{-1} - \frac{4}{3}x_{-2} + \frac{1}{4}x_{-3} = hf_1$$

x_0 este dat (condiția inițială), dar valorile de start x_{-1}, x_{-2}, x_{-3} trebuie produse de altă metodă. Concret, se utilizează metoda Runge-Kutta, sau metodele BDF de ordin mai mic.

Cu BDF de ordine 1...3, avem:

$$c_{10}x_{i+1} + c_{11}x_i = hf_{i+1}$$

$$c_{20}x_{i+1} + c_{21}x_i + c_{22}x_{i-1} = hf_{i+1}$$

$$c_{30}x_{i+1} + c_{31}x_i + c_{32}x_{i-1} + c_{33}x_{i-2} = hf_{i+1}$$

Se scriu acestea pentru $i = -1$:

$$c_{10}x_0 + c_{11}x_{-1} = hf_0 \qquad \Rightarrow x_{-1} = (hf_0 - c_{10}x_0)/c_{11}$$

$$c_{20}x_0 + c_{21}x_{-1} + c_{22}x_{-2} = hf_0 \qquad \Rightarrow x_{-2} = (hf_0 - c_{20}x_0 - c_{21}x_{-1})/c_{22}$$

$$c_{30}x_0 + c_{31}x_{-1} + c_{32}x_{-2} + c_{33}x_{-3} = hf_0 \qquad \Rightarrow x_{-3} = (hf_0 - c_{30}x_0 - c_{31}x_{-1} - c_{32}x_{-2})/c_{33}$$

Coeficienții pentru k = 1; 2; 3; sunt (tabelul de mai sus):

1	-1		
3/2	-2	1/2	
11/6	-3	3/2	-1/3

■