Aula 6 - EDO-PVI

Ardson dos S. Vianna Jr.

Departamento de Engenharia Química - USP

15 de fevereiro de 2021

Introdução

As equações diferenciais ordinárias com problema de valor inicial (EDO-PVI) podem ser representadas por:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \qquad em \quad x = 0 \quad y = y_0 \tag{1}$$

Gênese - etapas

Os métodos BDF - *Backward Differentiation Formula* - são métodos de passos múltiplos também, mas são gerados a partir de pontos conhecidos anteriores (x_i, u_i) e não de suas derivadas u'_i. O processo para gerar as fórmulas é composto por três etapas:

i. NBF para os pontos u_{i-k}
ii. derivar a interpolação
iii. associar com a EDO

Gênese - interpolação

A interpolação representa um conjunto de dados $(x_0, u_0);\ (x_1, u_1);\ (x_2, u_2); \ldots (x_n, u_n)$ exatamente.

A forma de Newton adiantada (NFF - *Newton forward formula*) tem como base as diferenças adiantadas, $\Delta f = f_{i+1} - f_i$. Uma forma de construir esse polinômio é partir de uma equação geral:

$$p(x) = a_0 \ + \ a_1 \ (x - x_0) \ + \ a_2(x - x_0)(x - x_1) + \ a_3(x - x_0)(x - x_1)(\\ \ldots + \ a_n(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})$$

Gênese - interpolação

sendo que são conhecidos os n pontos $(x_0, y_0);\ (x_1, u_1);\ (x_2, u_2); \ldots, (x_{n-1}, y_{n-1})$. Portanto, em $x = x_0 \rightarrow\ y = y_0$. No polinômio:

$$p(x_0) = a_0\ +\ a_1\ (x_0 - x_0)\ +\ a_2(x - x_0)(x - x_1) + \\ \ldots +\ a_n(x_0 - x_0)(x_0 - x_1)\ldots(x_0 - x_{n-1}) = y_0$$

Método BDF, gênese

Logo $a_0 = y_0$. Rearranjando o polinômio original:

$$\frac{p(x) - y_0}{(x - x_0)} = a_1 + a_2(x - x_1) + a_3(x - x_1)(x - x_2) + \ldots$$
$$+ a_n(x - x_1) \ldots (x - x_{n-1})$$

Ao fazer $x = x_1$, vem $p(x_1) = y_1$ e:

$$\frac{y_1 - y_0}{(x_1 - x_0)} = a_1 + 0$$

Esta é a própria definição do operador diferença dividida Δ, ou seja, $\Delta_i = \dfrac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$. Este raciocínio pode ser repetido diversas vezes:

$$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i}$$

Gênese - fórmulas diferença

$$f[x_0, x_1, x_2 \ldots x_n] = \frac{f[x_1, x_2 \ldots x_n] - f[x_0, x_1, x_2 \ldots x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

A fórmula final do polinômio interpolador de Newton fica:

$$p_n(x) = f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, x_1, x_2 \ldots x_k]\,(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{k-1}) \quad (2)$$

A vantagem do polinômio interpolador de Newton é que ao acrescentar um ponto qualquer à interpolação (x_i, y_i) só é acrescentado um termo.

Gênese - interpolação de Newton

mudança de direção gera o NBF - *Newton Backward Formula* - a fórmula regressiva com diferenças atrasadas:

$$p_n(x) = f[x_n] \; + \; f[x_n, x_{n-1}](x - x_n) + \; f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}](x - x_n)$$
$$(x - x_{n-1}) \; + \ldots + f[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_0](x - x_n)(x - x_{n-1}) \ldots (x - x_0)$$

Vamos usar a fórmula truncada no terceiro termo começando do ponto n+1 para uma fórmula implícita:

$$p_{n+1}(x) = f[x_{n+1}] + f[x_{n+1}, x_n](x - x_{n+1}) + \; f[x_{n+1}, x_n, x_{n-1}](x - x_{n+1})($$

Gênese - derivando

Agora derivamos esta fórmula com relação a x:

$$p'_{n+1}(x) = \frac{d}{dx} f[x_{n+1}] \; + \; f[x_{n+1}, x_n] \frac{d}{dx}(x - x_{n+1})$$
$$+ \; f[x_{n+1}, x_n, x_{n-1}] \frac{d}{dx}(x - x_{n+1})(x - x_n)$$

$$p'_{n+1}(x) = 0 \; + \; f[x_{n+1}, x_n] \; + \; f[x_{n+1}, x_n, x_{n-1}] \; [2x - (x_{n+1} + x_n)]$$

Inserindo as fórmulas diferença:

$$p'_{n+1}(x) = \frac{u_{n+1} - u_n}{x_{n+1} - x_n} + \frac{f[x_n, x_{n-1}] - f[x_{n+1}, x_n]}{x_{n-1} - x_{n+1}} \; [2x - (x_{n+1} + x_n)]$$

Gênese - derivando

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \qquad\qquad em \quad x = 0 \quad y = y_0$$

Façamos $x = x_{n+1}$

$$p'_{n+1}(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, u_{n+1})$$

$$f(x_{n+1}, u_{n+1}) = \frac{u_{n+1} - u_n}{-h} + \frac{2u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{2h^2}[2x_n - (x_{n+1} + x_n)]$$

Rearranjando vem a fórmula final:

$$u_{n+1} = \frac{1}{3}[\ 2hf_{n+1} + 4u_n - u_{n-1}] \qquad (3)$$

Esta é a fórmula BDF de ordem dois.

Método BDF - fórmula geral

$$u_{i+1} = \{\sum_{j=0}^{p} \alpha_j u_{i-j}\} \;+\; \beta f(x_{i+1}, u_{i+1})$$

p	β	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4
1	1	1				
2	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{-1}{3}$			
3	$\frac{6}{11}$	$\frac{18}{11}$	$\frac{-9}{11}$	$\frac{2}{11}$		
4	$\frac{12}{25}$	$\frac{48}{25}$	$\frac{-36}{25}$	$\frac{16}{25}$	$\frac{-3}{25}$	
5	$\frac{60}{137}$	$\frac{300}{137}$	$\frac{-300}{137}$	$\frac{200}{137}$	$\frac{-75}{137}$	$\frac{-12}{137}$

Conclusões

i. Interpolação de Newton
ii. derivar polinômio interpolador
iii. uma ordem a menos
iv. Tempo de máquina

Bibliografia

- A.S. Vianna Jr., *Equações Diferenciais*, Blucher, 2021.
- M.E. Davis, *Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers*, John Wiley & Sons, 1984.
- R.G. Rice, D.D. Do, *Applied Mathematics and modeling for Chemical Engineers*, 2nd edition, Wiley-AIChE,2012.