

ARQUIVO 2

Avaliação de Algoritmos Adaptativos e de Primeira Ordem Aplicáveis à Solução de Equações Diferenciais Ordinárias Rígidas

Gisele Tessari Santos¹; Mauri Fortes²; Rafael Pinheiro Amantea³.

Resumo

Este artigo apresenta uma análise do desempenho de métodos numéricos de passo e ponto únicos e de três métodos adaptativos linearizados de segunda-ordem, usados para resolver equações diferenciais ordinárias. Três problemas padrões (benchmark) foram usados para mostrar as eficiências relativas dos métodos propostos e existentes. O primeiro problema padrão relaciona-se à lei de Newton de resfriamento; o segundo a um problema de radiação e o terceiro a uma equação diferencial ordinária altamente rígida, proposta por GEAR (1971). Os esquemas adaptativos propostos originaram-se do método adaptativo de BIXLER (1989). Mostra-se que os métodos trapezoidal e gêmeos de uma perna só (one-leg twins) são equivalentes e muito mais precisos que os métodos explícitos e implícitos de Euler. Porém, devido à sua estabilidade incondicional, o método implícito de Euler pode ser usado em condições em que a eficiência computacional não estiver em jogo e se permitam passos de tempo muito refinados. As formas linearizadas dos esquemas trapezoidal e gêmeos de uma perna só apresentaram excelente desempenho, comparável com o esquema adaptativo proposto originalmente por Bixler, que é completamente implícito; porém, eles são mais eficientes uma vez que eles são explícitos, e não requerem aplicações iterativas do algoritmo de Newton.

Palavras-chave. Métodos numéricos, métodos adaptativos, equações diferenciais ordinárias

¹ Bolsista de IC-CNPq, Gestão de Hotelaria, Turismo e Lazer, Centro Universitário UNA, Rua José Cláudio Resende, 80, Bairro Buritit, CEP 30455-590 Belo Horizonte - MG, giselettessari@terra.com.br

² Professor Titular, Pesquisador I-A, CNPq, Centro Universitário UNA, Rua José Cláudio Resende, 80, Bairro Buritit, CEP 30455-590 Belo Horizonte - MG, mauri.fortes@terra.com.br

³ Bolsista IC-CNPq, Sistemas de Informação, Centro Universitário UNA Rua José Cláudio Resende, 80, Bairro Buritit, CEP 30455-590 Belo Horizonte - MG, amantea@terra.com.br

Abstract

This paper presents an analysis of the performance of one-step one-point and three linearized second-order adaptive numerical methods used to solve ordinary differential equations. Three benchmark problems were analyzed to show the relative efficiencies of the proposed and existing methods. The first benchmark problem relates to Newton's law of cooling, the second to a radiation problem and the third to a highly stiff ordinary differential equation, proposed by GEAR (1971). The proposed adaptive schemes are originated from BIXLER's (1989) adaptive method. It is shown that the trapezoidal and one-leg twins algorithms are equivalent and much more accurate than Euler's explicit and implicit methods. However, due to its full stability, Euler's implicit method can be used under conditions when computational efficiency is not at stake and very refined time steps are allowed. The linearized forms of the trapezoidal and one-leg twins performed excellently well and in a comparable way to the fully implicit adaptive Bixler scheme; however, they are more efficient because, since they are explicit, they do not require iterative applications of Newton's equation solver algorithm.

Keywords: Numerical methods, adaptive methods, ordinary differential equations

Introdução

Este trabalho relaciona-se a problemas de valor inicial, ou seja, problemas que envolvem equações diferenciais de primeira ordem, geralmente não lineares, com condições iniciais, da forma:

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0 \quad (1)$$

Em que t é a variável independente (muitas vezes, t refere-se ao tempo) e y é a variável dependente; o subscrito 0 refere-se a valores iniciais.

As equações diferenciais permitem a solução de inúmeros problemas reais em áreas tão distintas tais como a análise financeira, ciências gerenciais, poluição ambiental, engenharia, física e química, crescimento populacional, modelos logísticos, dentre outras. Existe um grande número de soluções analíticas para equações diferenciais. Entretanto, a maior parte dos problemas práticos envolve problemas não lineares complexos, para os quais não há soluções analíticas. Neste caso, opta-se pela solução numérica, por meio de diferenças finitas ou por elementos finitos, que, em muitos casos, se escora em soluções analíticas padrões (benchmark) ou análise teórica de erros associados. Este trabalho se prende a soluções por diferenças finitas.

Uma equação de diferenças finitas (EDF) usada para aproximar numericamente a solução analítica de equações diferenciais ordinárias (EDO) deve considerar principalmente as propriedades de (HOFFMAN, 1992):

- Consistência, ou seja, que a diferença entre a EDF e a EDO (isto é, o erro de truncamento) reduz-se à medida que o tamanho do espaçamento de grade Δt diminui;

- Ordem da aproximação de diferenças finitas de uma EDO, que é a taxa na qual o erro global aproxima-se de zero quando $\Delta t \rightarrow 0$;

- Estabilidade, ou seja, que a EDF produza uma solução de valor limitado ou finito, quando a solução exata é finita;
- Convergência, ou seja, que a solução da EDF aproxime-se da solução exata da EDO quando $\Delta t \rightarrow 0$.

A análise destas propriedades é, por vezes, muito complexa, principalmente no caso de EDOs não-lineares. Por este motivo, utilizam-se soluções benchmark.

Existem inúmeras técnicas numéricas para a solução de equações diferenciais ordinárias (EDO). Os métodos mais comumente citados em texto sobre análise numérica são (HOFFMAN, 1992; CONTE, 1977; CHAPRA e CANALE, 1990; SCHEID, 1991):

- Os métodos de Euler, explícito e implícito, de passo único e ponto único, com erros local e global da ordem de Δt^2 ($O(\Delta t^2)$) e Δt ($O(\Delta t)$), respectivamente;
- O método de Euler modificado, de único ponto e dois passos, um preditor e um corretor, que usa a regra do trapézio, que requer avaliação de duas funções derivadas ($f(t, y)$ na Equação(1)), com erros local e global $O(\Delta t^3)$ e $O(\Delta t^2)$, respectivamente;
- O método de Runge-Kutta, principalmente a variante de quatro passos e ponto único, explícita, que requer avaliação de quatro funções derivadas, com erros local e global $O(\Delta t^4)$ e $O(\Delta t^3)$, respectivamente.
- Os métodos de Adams-Bashforth, principalmente a variante de quatro pontos e passo único, explícita, que requer uma única avaliação da função derivada, com erros local e global $O(\Delta t^4)$ e $O(\Delta t^3)$, respectivamente.
- Métodos semelhantes aos de predição-correção de Adams-Bashforth-Moulton, de quatro pontos e dois passos, explícito, que usa o método de Adams-Bashforth como preditor e o de Adams-Moulton, como corretor, e requer avaliação de duas funções derivadas por passo, com erros local e global $O(\Delta t^4)$ e $O(\Delta t^3)$, respectivamente.

Uma técnica de solução de EDOs é dita adaptativa quando, por meio de um controle interno do erro numérico, o seu avanço no tempo pode ser automaticamente aumentado, de modo a satisfazer a acurácia (exatidão), previamente definida pelo usuário. Existem algoritmos sofisticados, principalmente comerciais, que utilizam técnicas adaptativas para solução de problemas não-lineares de valor inicial, tais como os disponíveis em pacotes como o Matlab, Mathcad e Mathematica.

As EDOs são ditas rígidas (stiff) se o passo (Δt) requerido para estabilidade é muito menor que o requerido para exatidão. GEAR (1971) analisou e propôs uma técnica de solução para problemas rígidos, que tem o seu nome e um pacote de programas gratuitos em Fortran; seu método é citado em praticamente todos os textos que lidam com técnicas numéricas (HOFFMAN, 1992).

De particular importância para este trabalho, diversos métodos numéricos transformam equações diferenciais parciais (EDP) em um conjunto de equações diferenciais

ordinárias (EDO) que devem ser resolvidas de modo eficiente (FORTES e FERREIRA, 1999). Embora várias técnicas estejam disponíveis para a solução das EDOs, elas são normalmente complexas de manusear e de difícil implementação para a solução das EDPs. Este trabalho se preocupa com a apresentação de solucionadores simples, efetivos e acurados de EDOs.

GRESHO et al. (1980) propuseram um integrador adaptativo implícito no tempo fundamentado no preditor de Adams-Bashforth (ABP), de segunda ordem, e na regra do trapézio como corretor. O ABP necessita da avaliação de taxas de variação, obtidas através das sucessivas aplicações da regra do trapézio. O corretor utilizado é a regra do trapézio, que não é dissipativa, é incondicionalmente estável e possui uma acurácia de segunda ordem. BIXLER (1989) alterou o integrador de GRESHO et al. (1980) incorporando três modificações: 1. a forma dos gêmeos de uma perna só (one-leg twins) da regra do trapézio substituiu a regra do trapézio como corretor, levando, assim, a uma maior acurácia na estimativa do erro de truncamento temporal local; 2. para maior estabilidade do preditor mudaram-se as expressões usadas na avaliação das taxas de variação; e 3. a fórmula utilizada para prever o avanço no tempo foi revista para se ajustar ao novo corretor. FORTES e FERREIRA (1999) apresentaram uma modificação do método de GRESHO et al. (1980) e BIXLER (1989), em que se utiliza a técnica do preditor de Adams-Bashforth associada a um método de Euler explícito, e a aplicaram, com sucesso, na solução de problemas de convecção-difusão por elementos finitos. Não se encontram outros estudos sobre o desenvolvimento de métodos simples e eficazes para a solução adaptativa de EDOs.

Este trabalho tem por objetivos apresentar:

1. uma análise comparativa de diferentes métodos de passo único e adaptativos; e
2. Uma técnica adaptativa tendo por base a linearização dos preditores trapezoidal e gêmeos de uma perna só.

Metodologia

Métodos de passo e ponto únicos

Apresentam-se, na Tabela 1, os diferentes métodos de passo único usados neste trabalho.

Método	Algoritmo	Ordem do erro de truncamento global
Euler explícito	$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(y_n, t_n)$	$O(\Delta t)$
Euler implícito	$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(y_{n+1}, t_{n+1})$	$O(\Delta t)$
Trapezoidal	$y_{n+1} = y_n + \Delta t \left(\frac{f(y_{n+1}, t_{n+1}) + f(y_n, t_n)}{2} \right)$	$O(\Delta t^2)$
Gêmeos de uma perna só	$y_{n+1} = y_n + \Delta t f \left(\frac{y_{n+1} + y_n}{2}, \frac{t_{n+1} + t_n}{2} \right)$	$O(\Delta t^2)$

A variante da regra do trapézio, conhecida como gêmeos de uma perna só (One-Leg Twins), foi proposta por BIXLER (1989). Deve-se mencionar que o método de Euler explícito é condicionalmente estável e o implícito é incondicionalmente estável; os critérios podem ser encontrados em textos clássicos (CONTE, 1977, SCHEID, 1991). Critérios de estabilidade para outros métodos são complexos de serem obtidos.

Esquema de integração temporal adaptativo implícito de Bixler

O Esquema de Bixler consiste basicamente em (BIXLER, 1989):

1. Utilizar o preditor de Adams-Bashforth, de acurácia de segunda ordem:

$$y_{n+1}^p = y_n + \frac{\Delta t_n}{2} \left[\left(2 + \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \right) \dot{y}_n - \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \dot{y}_{n-1} \right] \quad (2)$$

Em que o sobrescrito p refere-se ao valor predito e as derivadas (taxas de variação) no plano temporal n-1 e n, e, são aproximadas respectivamente por:

$$\dot{y}_{n-1} = \frac{\Delta t_{n-2}}{\Delta t_{n-1} + \Delta t_{n-2}} \left(\frac{y_n - y_{n-1}}{\Delta t_{n-1}} \right) + \frac{\Delta t_{n-1}}{\Delta t_{n-1} + \Delta t_{n-2}} \left(\frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{\Delta t_{n-2}} \right) \quad (3)$$

e a regra do trapézio:

$$\dot{y}_n = \frac{2}{\Delta t_{n-1}} (y_n - y_{n-1}) - \dot{y}_{n-1} \quad (4)$$

2. Utilizar, como corretor, a regra dos gêmeos de uma só perna:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t_n} = f \left(\frac{y_{n+1} + y_n}{2}, \frac{t_{n+1} + t_n}{2} \right) \quad (5)$$

3. Prever o tamanho do avanço no tempo por meio da expressão:

$$\Delta t_{n+1} = \Delta t_n \left(\frac{\varepsilon}{d_{n+1}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (6)$$

em que ε é o erro de truncamento temporal local e d_{n+1} é proporcional à diferença entre a solução correta e a exata e é definida por

$$d_{n+1} = \frac{0.25}{2.25 + 3\Delta t_{n-1} / \Delta t_n} (y_{n+1} - y_{n+1}^p) \quad (7)$$

4. Fazendo o sobrescrito E se referir à solução exata, o erro de truncamento temporal local relativo à equação (2) pode ser obtido através da expansão das séries de Taylor, pela expressão (GRESHO et al., 1980)

$$y_{n+1} - y_{n+1}^E = \frac{1}{12} \Delta t_n^3 \ddot{f}(y, t) + O(\Delta t^4) \quad (8)$$

Similarmente, o erro de truncamento local para a equação (5) é dado por (BIXLER, 1989):

$$y_{n+1} - y_{n+1}^E = \frac{0.25}{12} \Delta t_n^3 \ddot{f}(y, t) + O(\Delta t^4) \quad (9)$$

A combinação das duas equações acima (8-9) permite obter o tamanho do avanço no tempo pela equação (6). Deve-se notar que o Esquema de Bixler requer três soluções precedentes. Avançar no tempo adaptativamente ocorre no quarto avanço. Neste trabalho, utiliza-se o método de Euler explícito para obter estas soluções iniciais.

Esquemas adaptativos linearizados propostos, obtidos por meio do algoritmo de Newton

Neste trabalho propõe-se utilizar, como preditor, o esquema de Adams-Bashforth, como proposto por Bixler, e, como corretores, as formas linearizadas dos esquemas de Euler implícito, trapezoidal e gêmeos de uma perna só (GUPS).

O algoritmo de Newton é um algoritmo iterativo eficiente, de convergência quadrática ou de segunda ordem, usado para obter as raízes de funções não lineares da forma $f(x)$, e escreve-se (CONTE, 1977; CHAPRA e CANALE, 1992):

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (10)$$

em que i refere-se à i -ésima iteração.

Propõe-se, aqui, usar o método de Newton, uma única vez, para efeito de linearização, nos métodos implícitos de Euler, trapezoidal e gêmeos de uma perna só, tomando como valor inicial o valor predito. Os resultados são expressões explícitas, linearizadas, para o termo de correção:

$$\text{Corretor modificado de Euler: } y_{n+1} = y_{n+1}^p - \frac{y_{n+1}^p - y_n - \Delta t \cdot f(y_{n+1}^p, t_{n+1})}{1 - \frac{\Delta t}{2} f'(y_{n+1}^p, t_{n+1})} \quad (11)$$

$$\text{Corretor modificado Trapezoidal: } y_{n+1} = y_{n+1}^p - \frac{y_{n+1}^p - y_n - \frac{\Delta t}{2} [f(y_{n+1}^p, t_{n+1}) + f(y_n, t_n)]}{1 - \frac{\Delta t}{4} [f'(y_{n+1}^p, t_{n+1}) + f'(y_n, t_n)]} \quad (12)$$

$$\text{Corretor modificado GUPS: } y_{n+1} = y_{n+1}^p - \frac{y_{n+1}^p - y_n - \Delta t \cdot f\left(\frac{y_{n+1}^p + y_n}{2}, \frac{t_{n+1} + t_n}{2}\right)}{1 - \frac{\Delta t}{2} f'\left(\frac{y_{n+1}^p + y_n}{2}, \frac{t_{n+1} + t_n}{2}\right)} \quad (13)$$

Aplicações benchmark

A fim de se avaliarem os diferentes métodos disponíveis e propostos, utilizaram-se três problemas benchmark, com respectivas soluções analíticas

Problema rígido: a Lei de Resfriamento de Newton

A taxa de transferência de calor/energia por convecção que ocorre na direção perpendicular à uma interface fluido-sólido, Q , é dada pela relação conhecida como Lei de Resfriamento de Newton:

$$Q = hA(T_s - T) \quad (14)$$

em que h é o coeficiente convectivo, A é a área superficial do corpo que está em contato

com o fluido, T é a temperatura da superfície e T_s é a temperatura do fluido.

Se Biot $= \frac{hL}{k} < 0,1$ (em que k = condutividade térmica do sólido), então um sólido de massa m e calor específico c_p , em processo de resfriamento, sofrerá uma variação de entalpia, H , dada por (KREITH, 1977):

$$\frac{dH}{dt} = mc_p \frac{dT}{dt} = -hA(T - T_a) \quad (15)$$

$$\text{Fazendo: } y = \frac{T - T_a}{T_0 - T_a} \quad \text{e } \tau = \frac{hA}{mc_p} t \quad (16)$$

$$\text{tem-se: } \frac{dy}{d\tau} = -y \quad \text{com } y(0) = 1 \quad (17)$$

$$\text{cuja solução analítica é: } y = e^{-\tau} \quad (18)$$

Problema não-rígido: Lei da Radiação Térmica

A taxa total de radiação Q , emitida por um corpo real à temperatura T para um meio à temperatura T_a , é dada pela expressão modificada da lei de Stefan-Boltzman, ou seja (KREITH, 1977):

$$Q = \epsilon A \sigma (T^4 - T_a^4) \quad (19)$$

em que T é a temperatura absoluta, ϵ é a constante de Stefan-Boltzman, A é a área da superfície e σ é a sua emissividade.

Utilizando a lei de conservação de energia, pode-se dizer que a variação de energia interna do corpo é igual à taxa de radiação emitida através de sua superfície para o meio envolvente. Supondo não haver resistência interna ao fluxo de calor por condução e considerando as definições anteriores de m e c_p , então:

$$\frac{dH}{dt} = mc_p \frac{dT}{dt} = -\epsilon A \sigma (T^4 - T_a^4) \quad (20)$$

$$\frac{dT}{dt} = T' = -\alpha (T^4 - T_a^4) \quad (21)$$

em que, agora, $\alpha = \frac{\epsilon A \sigma}{mc_p}$. Não existe uma solução analítica fechada para este problema.

A solução pode ser obtida pelo método de Newton (ou outra técnica numérica), calculando-se os zeros da função (HOFFMAN, 1992), a cada tempo de simulação:

$$tg^{-1}\left(\frac{T}{T_0}\right) - tg^{-1}\left(\frac{T_0}{T_a}\right) + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{(T_0 - T_a)(T + T_a)}{(T - T_a)(T_0 + T_a)}\right) = 2\alpha T_a^3 t \quad (22)$$

Neste trabalho, assume-se que a temperatura inicial do corpo é $T_0 = 2500$, e que $T_a = 250$ e $\alpha = 2,010^{12}$.

Problema rígido: GEAR (1971)

Para analisar a efetividade de métodos numéricos para resolver problemas rígidos, GEAR (1971) propôs a seguinte ODE:

$$y' = f(t, y) = -\alpha(y - f(t)) + F(t), \quad y(t_0) = y_0 \quad (23)$$

cuja solução analítica é:

$$y(t) = (y_0 - F(0))e^{-\alpha t} + F(t) \quad (24)$$

Quando α é um número inteiro muito grande, $F(t)$ é uma curva suave, com duas escalas de tempo diferentes: um termo que varia rapidamente com o tempo, associado a $e^{-\alpha t}$ e um com lenta variação com o tempo, associado a $F(t)$. Neste trabalho e tendo, agora, por referência HOFFMAN(1992), assume-se que $\alpha = 1000$, $F(t) = t + 2$ e $y(0) = 1$, de modo que:

$$y' = f(t, y) = -\alpha(y - (t + 2)) + 1, \quad y(0) = 1 \quad (25)$$

cuja solução analítica é dada por:

$$y(t) = -e^{-1000t} + t + 2 \quad (26)$$

Resultados e Discussão

Desempenho dos Métodos de passo e ponto únicos na solução do problema de Gear

As Figuras 1 e 2 mostram os gráficos da solução analítica da equação diferencial de GEAR(1971) para pequenos e grandes tempos.

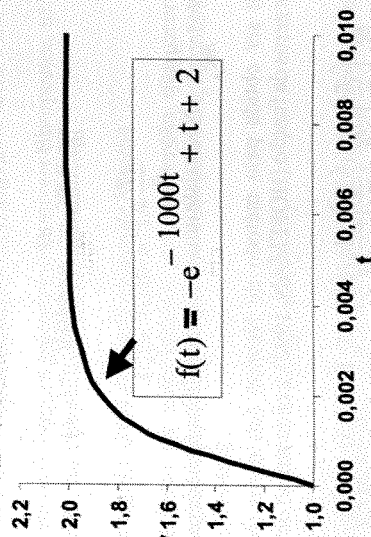


Figura 1. Solução exata da equação de Gear, para pequenos valores do tempo

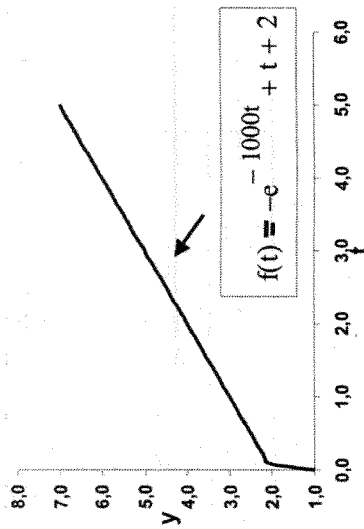


Figura 2. Solução exata da equação de Gear, para grandes valores do tempo

O comportamento do método de Euler explícito pode ser visto na Figura 3, para simulações com diferentes intervalos de tempo. O método de Euler é instável para intervalos de tempo superiores a 0,002.

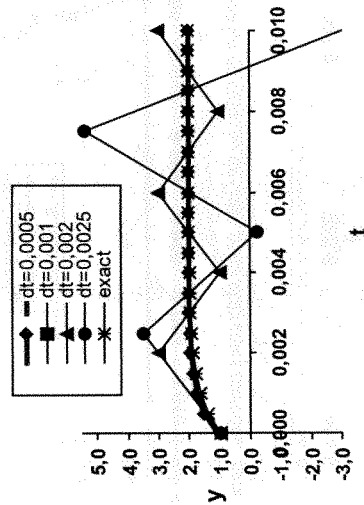


Figura 3. Solução numérica da equação de Gear, pelo método de Euler explícito

A Tabela 2 mostra o desempenho dos diversos métodos para $dt = 0,0005$ (ou $\Delta y = 0,0005$). Deve-se observar que o método de Euler, em ambas as versões implícita e explícita fornecem resultados com erros apreciáveis (fato não evidente na Figura 2). Os métodos trapezoidal e GUPS levam a resultados idênticos.

As Figuras 4 a 6 mostram os gráficos do comportamento das soluções numéricas obtidas pela aplicação dos diferentes métodos. A Figura 4, como já esperado da Tabela 2, mostra o excelente desempenho dos métodos trapezoidal e GUPS (One-leg twins) comparados com os métodos de Euler. Os métodos trapezoidal e GUPS apresentaram idênticos resultados para todos os intervalos de tempo, somente o método trapezoidal será citado a partir deste ponto. A partir do intervalo de tempo 0,002, o método de Euler explícito começou a divergir (Figura 5); o método trapezoidal começou a perder exatidão, fato manifestado para intervalos de tempo superiores (Figuras 6 e 7). O método de Euler implícito manteve sua estabilidade, conforme esperado.

Tabela 2. Erros percentuais dos diversos métodos de ponto e passo únicos, para $\Delta t = 0,0005$

tempo	Euler explícito	Euler implícito	Trapezoidal	GUPS
0,0000	0,0%	0,0%	0,00%	0,00%
0,0005	7,7%	-4,3%	0,48%	0,48%
0,0010	7,2%	-4,7%	0,50%	0,50%
0,0015	5,5%	-4,1%	0,42%	0,42%
0,0020	3,9%	-3,3%	0,33%	0,33%
0,0100	0,0%	0,0%	0,03%	0,03%

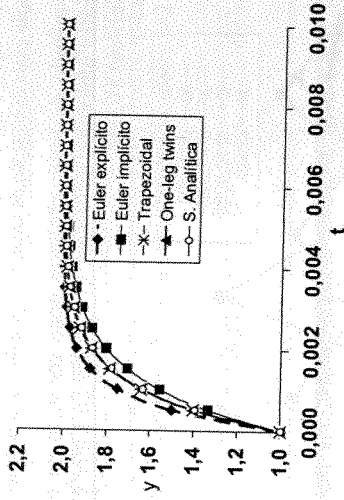


Figura 4. Solução numérica da equação de Gear, pelos diferentes métodos, para $\Delta t = 0,0005$

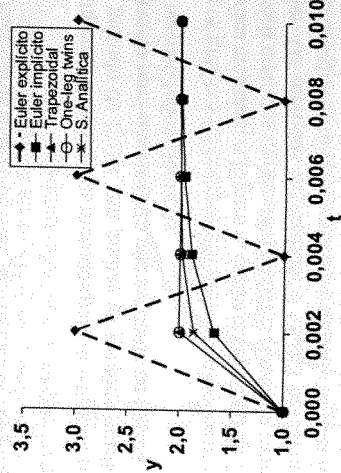


Figura 5. Solução numérica da equação de Gear, pelos diferentes métodos, para $\Delta t = 0,002$

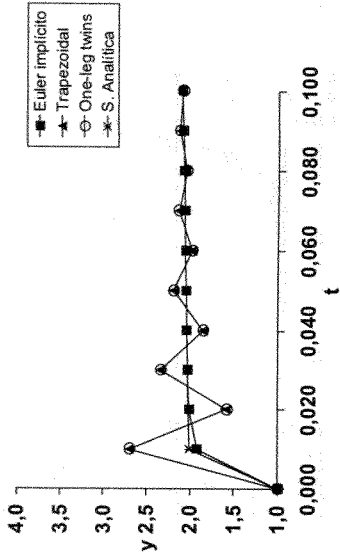


Figura 6. Solução numérica da equação de Gear, pelos diferentes métodos, para $\Delta t = 0,01$

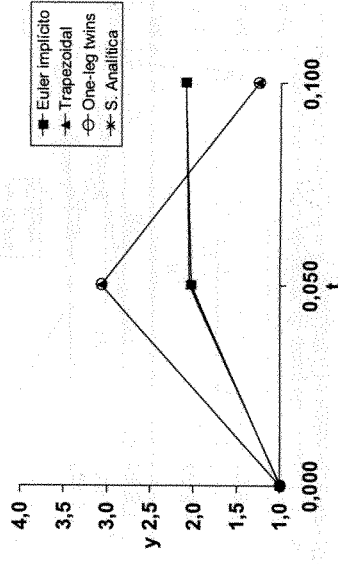


Figura 7. Solução numérica da Equação de Gear, pelos diferentes métodos, para $\Delta t = 0,05$

Desempenho dos diferentes esquemas adaptativos linearizados propostos

O desempenho dos diferentes métodos, quando da solução do problema de resfriamento de Newton, é mostrado nas Figuras 8, 9 e 10. Os dados foram simulados para se obterem erros absolutos da ordem de $\epsilon = 10^{-5}$; o tempo final de simulação foi estabelecido como sendo próximo de 10 e $\Delta t(\text{inicial}) = 10^{-5}$.

A Figura 8 mostra que os três métodos comportam-se semelhantemente, fornecendo resultados visualmente aceitáveis. Porém, as Figuras 9 e 10 mostram a eficiência muito maior do método de GUPS, cujo erro associado é cerca de 20 vezes menor que o obtido ao se usar o método implícito de Euler. De novo, os métodos trapezoidal e GUPS fornecem os mesmos resultados, possivelmente devido à linearização proposta. Deve-se notar, na Figura 10, que n refere-se ao plano temporal, ou seja, ao número de iterações temporais simuladas.

Avaliação de Algoritmos Adaptativos e de Primeira Ordem Aplicáveis à Solução de Equações Diferenciais Ordinárias Rígidas

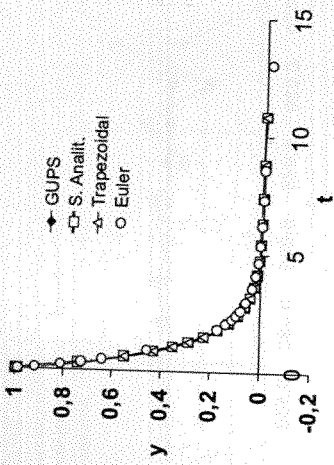


Figura 8. Solução numérica da equação, pelos diferentes métodos, para $\epsilon = 10^{-3}$, tempo final de simulação = 10, Δt (inicial) = 10^{-3}

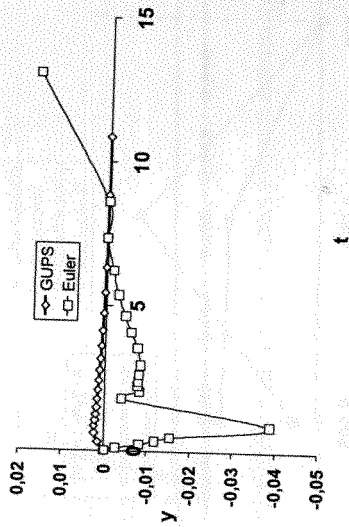


Figura 9. Erros da solução numérica da equação, pelos diferentes métodos, para $\epsilon = 10^{-3}$, tempo final de simulação = 10, Δt (inicial) = 10^{-3}

A Figura 11 mostra como o passo de tempo aumenta exponencialmente quando se usa o método adaptativo proposto. Os dados desta figura coincidem com os de BIXLER (1989) demonstrando que a linearização é eficiente.

As Figuras 12 e 13 referem-se aos resultados de simulação visando resolver o problema de Gear. De novo, nota-se que a linearização proposta manteve a solução com erro máximo da ordem de 10^{-3} , como tinha sido requerido. Não se apresentam as curvas de valores simulados e exatos, pois elas coincidem (ver Figuras 1 e 2). O tempo máximo de simulação foi de 10.

Finalmente, a Figura 14 mostra a variação do passo de tempo quando da solução do problema de radiação. Como se pode notar, a fim de manter o erro em $\epsilon = 10^{-3}$, o passo de tempo não subiu de forma tão apreciável quanto no caso dos problemas rígidos. De novo, o método de Euler implícito não forneceu resultados competitivos com o GUPS e o trapezoidal, que continuaram a fornecer resultados idênticos.

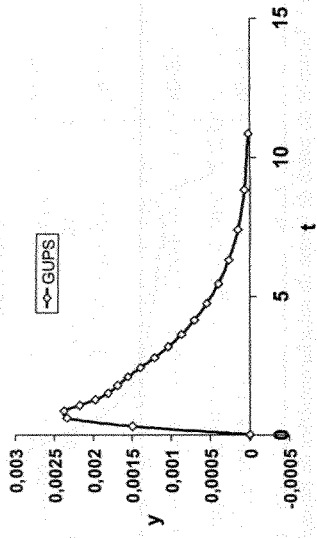


Figura 10. Erros da solução numérica da equação, pelos métodos trapezoidal e GUPS, para $\epsilon = 10^{-3}$, tempo final de simulação = 10, Δt (inicial) = 10^{-3}

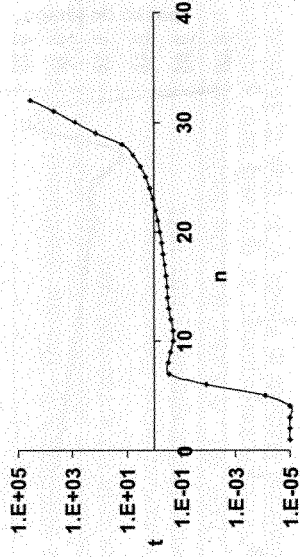


Figura 11. Tamanho do passo de tempo da solução numérica da equação, pelos métodos trapezoidal e GUPS, para $\epsilon = 10^{-3}$, tempo final de simulação = 10

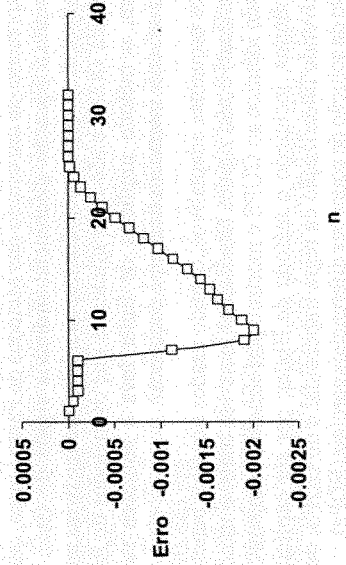


Figura 12. Erros da solução numérica da Equação de Gear pelos métodos trapezoidal e GUPS, para $\epsilon = 10^{-3}$, tempo final de simulação = 10, Δt (inicial) = 10^{-3}

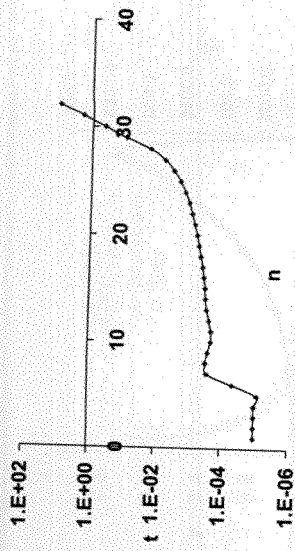


Figura 13. Tamanho do passo de tempo da solução numérica da Equação de Gear pelos métodos trapezoidal e GUPS, para $\epsilon = 10^{-3}$, tempo final de simulação = 10,

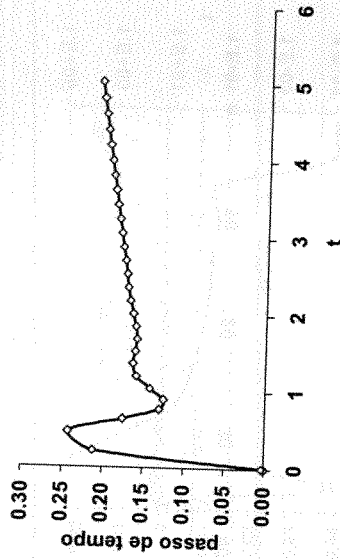


Figura 14. Tamanho do passo de tempo da solução numérica da Equação de radiação pelos métodos trapezoidal e GUPS, para $\epsilon = 10^{-3}$, tempo final de simulação = 5, Δt (inicial) = 10^{-5}

Conclusões

Neste trabalho apresenta-se um estudo dos Métodos de Passo Único, quando usados na solução da complexa equação diferencial ordinária rígida de Gear. Os resultados numéricos permitem dizer que os métodos trapezoidal e one-leg twins apresentam erros absolutos globais da $O(\Delta t^2)$ e são mais eficientes que os métodos de Euler explícito e implícito. Porém, o método implícito de Euler leva a soluções sempre estáveis, permitindo o seu uso com intervalos de tempo pequenos.

No que tange aos esquemas adaptativos, quando usados nos dois benchmarks, rígidos (Resfriamento e Gear) e não rígidos (Radiação), uma vez mais, o método trapezoidal forneceu resultado idêntico ao GUPS e mostrou performance comparável aos métodos adaptativos implícitos, incluindo o método de Bixler; por ser explícito, os métodos propostos, envolvendo linearização da regra trapezoidal e do GUPS, deverão ser mais eficientes quando da solução de equações diferenciais parciais (EDPs).

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e ao Centro Universitário UNA pelo suporte financeiro.

Referências

- BENVENISTE, L.M., & SCHEINKMAN, J. On the differentiability of the value function in dynamic models of economics. *Econometrica*, v. 47, p. 727-732, 1979.
- BIXLER, N. An improved time integrator for finite element analysis. *Comm. Appl. Numer. Methods*, v.5, p. 69-78, 1989.
- BURMEISTER, L. *Convective Heat Transfer*, 2ª ed., New York: John Wiley & Sons; 1993. 790 pp.
- CHAPRA, S. C. & CANALE, R. P. *Numerical Methods for Engineers*, 2ª ed., New York: McGraw-Hill, 1990. 814 pp.
- CONTE, S. D. *Elementos de Análise Numérica*, 3ª ed., Rio de Janeiro: Editora Globo, 1977. 327 pp.
- FORTES, M. & FERREIRA W. The one dimensional transient diffusional method: finite element solutions to convection-diffusion problems. *International Journal of Thermal Sciences*, v. 38, n.3, p. 780-796, 1999.
- GEAR, C. W. *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*, New Jersey: Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971.
- GRESHO, P.M., LEE, R.L. & SANI, R.L. On the time dependent solution of the incompressible Navier-Stokes equation in two and three dimensions. In: *Recent Advances in Numerical Methods in Fluids*, v. 1, Cap. 2, Swansea: Pineridge Press, 1980. pp. 27-79.
- HINDMARSH, A. C. & ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers, " in *Scientific Computing*, R. S. Stepleman et al. (eds.), North-Holland, Amsterdam, (Vol. 1 of IMACS Transactions on Scientific Computation), pp. 55-64, 1983.
- HOFFMAN, D. *Numerical Methods for Engineers and Scientists*, New York: McGraw-Hill, 1992. 827 pp.
- HOLMAN, J.P. *Transferência de Calor*, São Paulo: McGraw-Hill, 1983. 642 pp.
- KREITH, F. *Princípios de Transmissão de Calor*, São Paulo: Editora Edgar Blücher Ltda, 1977. 550 pp.
- ÖZTÜRK, M.N. *Transferência de Calor: Um Texto Básico*, Rio de Janeiro: Editora Guanabara, 1990. 661 pp.
- PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*; New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. 197 pp.
- SCHEID F. *Análise Numérica*, 2ª ed., São Paulo: McGraw-Hill, 1991. 617 pp.