XXI ENMC
ENCONTRO NACIONAL DE MODELAGEM COMPUTACIONAL
IX ECTM
ENCONTRO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

MÉTODO ADAPTATIVO DE BIXLER: MODIFICAÇÃO NA LINEARIZAÇÃO DO CORRETOR E APLICAÇÃO NUM PROBLEMA DE REATOR PFR

Vitor Soares[1] – vitorsoaresengqui@gmail.com
Pedro Henrique Fonseca Andrade[2] – pedrohfa2008@hotmail.com
Tatiane Reis do Amaral [3] – tatiane.reis@ifnmg.edu.br
[1, 2 e 3] Instituto Federal do Norte de Minas Gerais – *campus* Montes Claros – Montes Claros, MG, Brasil

Resumo. *Obter soluções de equações diferenciais ordinárias é um grande desafio, pois muitas delas não possuem solução analítica. Daí a importância das simulações computacionais nesta área. Alguns métodos de solução de equações diferenciais possuem um controle intrínseco do tamanho do passo de tempo, chamados Métodos Adaptativos. Tais procedimentos, além de serem econômicos quanto à área de memória, tempo e esforço computacional, também são facilmente acoplados a algoritmos já implementados. O controle do tamanho de passo temporal é determinado segundo uma tolerância pré-estabelecida e o erro de truncamento local, calculado a cada iteração. Neste trabalho é apresentada uma revisão de tais técnicas e aplicações dessas propostas na resolução de um problema de valor inicial de um reator tubular de escoamento contínuo (PFR). Ademais, é apresentada uma comparação do Método Adaptativo proposto por Bixler (1989), com o Método de Bixler Modificado com a Secante, de forma que o método modificado é mais simples e apresenta resultados satisfatórios.*

Palavras-chave: *Simulação computacional, Equações diferenciais ordinárias, Passo de tempo adaptativo, Reator PFR.*

1. INTRODUÇÃO

A modelagem computacional é uma ferramenta que tem por finalidade otimizar a maneira com que os homens lidam com problemas, sejam eles matemáticos, físicos, químicos ou das engenharias. A priori, as simulações eram quase que exclusivamente feitas para pesquisa, nas quais eram necessários computadores muito caros; porém, avanços na informática permitiram que o processo de criar e analisar modelos simulacionais ficassem menos trabalhosos, reduzindo tempo e, consequentemente, custos. Por isso, a modelagem computacional é uma alternativa precisa e economicamente viável ao modelo experimental (Passos, 2015).

Nesse trabalho, as simulações foram realizadas com o objetivo de trazer uma solução aproximada para uma equação diferencial rígida de um problema de reator tubular de escoamento contínuo (PFR). Uma equação diferencial rígida é, segundo Iserles, uma equação diferencial ordinária (EDO) na qual, na solução numérica, é necessário diminuir significativamente o passo de tempo, em pelo menos um intervalo, para evitar instabilidade. Outra definição é que uma EDO rígida tem a propriedade de sua solução decair rapidamente para zero (Lesinhovski, 2014).

Para a equação tratada neste trabalho, foi utilizado um método adaptativo (MA), que tem por característica um controle intrínseco do tamanho do passo de tempo, determinando o tamanho de acordo com a magnitude do erro local de truncamento, de forma que o avanço é automaticamente controlado de modo a satisfazer a precisão previamente estabelecida.

Para a verificação da aplicabilidade dos MA, foi feita uma comparação entre o Método de Bixler e o Método de Bixler Modificado com a linearização realizada a partir do Método da Secante, visto que no método original a linearização é feita com o Método de Newton. Esses métodos utilizam um sistema preditor-corretor, em que o preditor calcula a solução numérica de um novo valor para variável dependente e, em seguida, ocorre a correção do valor predito. Por meio do erro local de truncamento, esse sistema controla o crescimento do passo (Coelho, 2011).

Por fim, é resolvido um problema de reator tubular de escoamento contínuo (PFR), de forma a comparar as soluções do Método de Bixler com o Metódo de Bixler Modificado com Secante.

Os métodos numéricos utilizados para a resolução de EDOs podem ser classificados em duas categorias: método a um passo ou multi-passo. Nos métodos de passo único, é conhecida a solução em cada iteração, e a partir desse valor pode-se obter a solução do passo imediatamente à frente; exemplos são os métodos de Euler e Taylor de ordem superior. Já nos métodos de passo múltiplo, é necessário o conhecimento da solução em mais de um passo anterior para se poder determinar a solução do passo imediatamente a seguir; os Adams-Brashforth, Adams-Moulton e Ponto Médio exemplificam os métodos multi-passo (CHAPRA, 2011). No método de Bixler seu preditor o passo múltiplo e, além disso, é um método de passo variável, em que o tamanho do passo varia de acordo com uma tolerância pré-estabelecida.

O trabalho em questão visa uma comparação entre os Métodos de Bixler e o Método de Bixler Modificado com a linearização realizada a partir do Método da Secante. Esses métodos utilizam um preditor-corretor, em que o método preditor calcula a solução numérica de um novo valor para variável dependente e, em seguida, ocorre a correção do valor predito. Este esquema adaptativo controla o crescimento do passo de tempo, por meio do erro local de truncamento e da tolerância pré-estabelecida (COELHO, 2011). Antes de utilizar os métodos propriamente ditos, realizar-se-á uma revisão das equações utilizadas.

2. MÉTODO DE BIXLER

O método de inicialização para o método adaptativo utilizado neste trabalho foi o Euler Implícito, em que o valor da função no tempo t atual depende do valor da função no tempo anterior. A equação para tal método é:

$$y_{n+1} = y_n + f(y_{n+1}, t_{n+1}) \qquad (1)$$

Um novo valor de y é previsto usando a inclinação (igual à primeira derivada) no valor original de t para extrapolar linearmente sobre um tamanho de passo h. O Euler Implicito é utilizado para o calculo dos primeiros valores da solução pois o Adams necessita de quatro passos anteriores para resolver o problema.

Como corretor Bixler (1989) propõe como preditor o Método de Adams-Brashforth,

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

O p se refere ao valor predito e as derivadas no plano temporal n-1 e n, yn-1 e yn são aproximandas por

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

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

O método de Adams, sendo o preditor, dá os valores da função para que estes, posteriormente, sejam corrigidos.

Como corretor o é utilizado o método chamado em tradução livre de Gêmeos de uma perna só, onde uma média dos valores de y e t são levados na equação diferencial dada.

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

Na equação acima está a fórmula do Gêmeos de uma perna só. Mas para utilizá-lo, ele foi linearizado de acordo com Santos, G.T. (2004), e sua forma linearizada está abaixo na Eq. (6).

$$y_{n+1} = y_{n+1}^{p} - \frac{y_{n+1}^{p} - y_n - \Delta t . f\left(\frac{y_{n+1}^{p} + y_n}{2}, \frac{t_{n+1} + t_n}{2}\right)}{1 - \Delta\frac{t}{2}f\left(\frac{y_{n+1}^{p} + y_n}{2}, \frac{t_{n+1} + t_n}{2}\right)} \qquad (6)$$

Esse método, sendo o corretor, utiliza os valores preditos pelo Adams para fazer a aproximação.

O método de Newton foi utilizado para fazer as linearizações do Método de Bixler que utiliza o método dos Gêmeos de uma perna só como corretor.

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(y_n, t_n)}{f'(y_n, t_n)} \qquad (7)$$

Neste trabalho efetou-se uma modificação na linerização proposta por Bixler (1989): o corretor proposto por ele, Gêmeos de uma perna só, foi linearizado utilizando o método da secante, que se baseia na formula

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(y_n, t_n)}{\frac{\Delta y}{\Delta x}} \qquad (8)$$

O objetivo em se utilizar o método da secante é porque esta faz uma aproximação, sem necessariamente, derivar a função. Isso é bastante útil quando se trata de funções cujas derivadas são inconvenientes de serem calculadas.

Para o avanço no tempo o método de Bixler propõe equações que regem o avanço no passo de tempo. Esse avanço é controlado pela seguinte expressão

$$\Delta t_{n+1} = \Delta t_n \left(\frac{\varepsilon}{|d_{n+1}|}\right)^{\frac{1}{3}} \qquad (9)$$

Em que ε é o erro de truncamento temporal local e d_{n+1} é a diferença entre as soluções corretas e exatas, e é definida por

$$d_{n+1} = \frac{0{,}25}{2{,}25 + 3\,\Delta t_{n+1}/\Delta t_n}\left(y_{n+1} - y_{n+1}^{p}\right) \qquad (10)$$

A equação utilizada para comparação foi

$$\frac{dy}{dx} = \frac{A}{F}\left(-K_1 y^2 - K_2 y^3\right) \qquad (11)$$

Esta se refere a um reator PFR isotérmico e isovolumétrico, regime transiente, desconsiderando o efeito de difusão. Para o caso tratado, há duas reações paralelas:

$$2A \rightarrow B \qquad (1)$$

$$3A \rightarrow C \qquad (2)$$

Considerou-se ambas as reações elementares e as constantes cinéticas, respectivamente, 0,6 $Lmol^{-1}s^{-1}$ e 1 $Lmol^{-1}s^{-1}$. Para um problema no qual a concentração de A na entrada é 3 $molL^{-1}$, a vazão é $3Ls^{-1}$, o volume do reator é 1L e área de seção transversal do reator de $1dm^2$, determinou-se o perfil de concentração ao longo do compimento do reator no estado estacionário. A equação passa a ser

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{3}\left(-0{,}6y^2 - y^3\right) \qquad (12)$$

Ou

$$\frac{dy}{dx} = -0{,}2y^2 - \frac{1}{3}y^3 \qquad (13)$$

3. RESULTADOS

Para a aplicação do MA foi necessário escolher uma EDO a ser resolvida. Esta, arbitrariamente foi

$$\frac{dy}{dx} = -0{,}2y^2 - \frac{1}{3}y^3 \qquad (13)$$

pois é a equação do problema no reator PFR.

Para efeito de comparação e verificação da aplicabilidade da modificação realizada no método de Bixler, a Eq. (13) foi resolvida tanto pelo algoritmo original de Bixler, assim como pelo Bixler Modificado. A modificação diz respeito ao fato de que a linearização do Gêmeos de uma perna só foi feita a partir do Método da Secante. O objetivo maior dessa substituição pela secante gira em torno do fato da derivada ser aproximada por uma diferença regressiva, o que facilita os cálculos de funções cujas derivadas são inconvenientes de serem calculadas. Para verificar a eficácia do Método Modificado, calculou-se a solução deste, assim como o Método de Bixler Original.

Ademais, a evolução do tamanho do passo com o número de iterações foi comparada entre esses dois algoritmos. Os programas foram implementados em Scilab (software gratuito). A Figura 1 mostra simultaneamente a linha de tendência do Bixler Original e do Bixler Modificado com a Secante. Por ela é possível constatar que o Método Modificado converge para a solução do Método de Bixler Original, mostrando, dessa forma, que a modificação foi capaz de resolver o problema. Além disso, também é mostrada a linha de tendência da solução da equação (13) pelo Método de Euler e pelo Método de Runge-Kutta. E sendo os Métodos de Bixler e Bixler Modificado, ambos MA, estes resolvem o problema com menos iterações.

Para o Método de Bixler e Bixler Modificado o passo inicial de tempo foi de 0,01, já no Euler e o Runge-Kutta o passo é 0,1. Para todos os métodos, a tolerância foi de 0,001, e tendo valor inicial de concentração igual a 3.

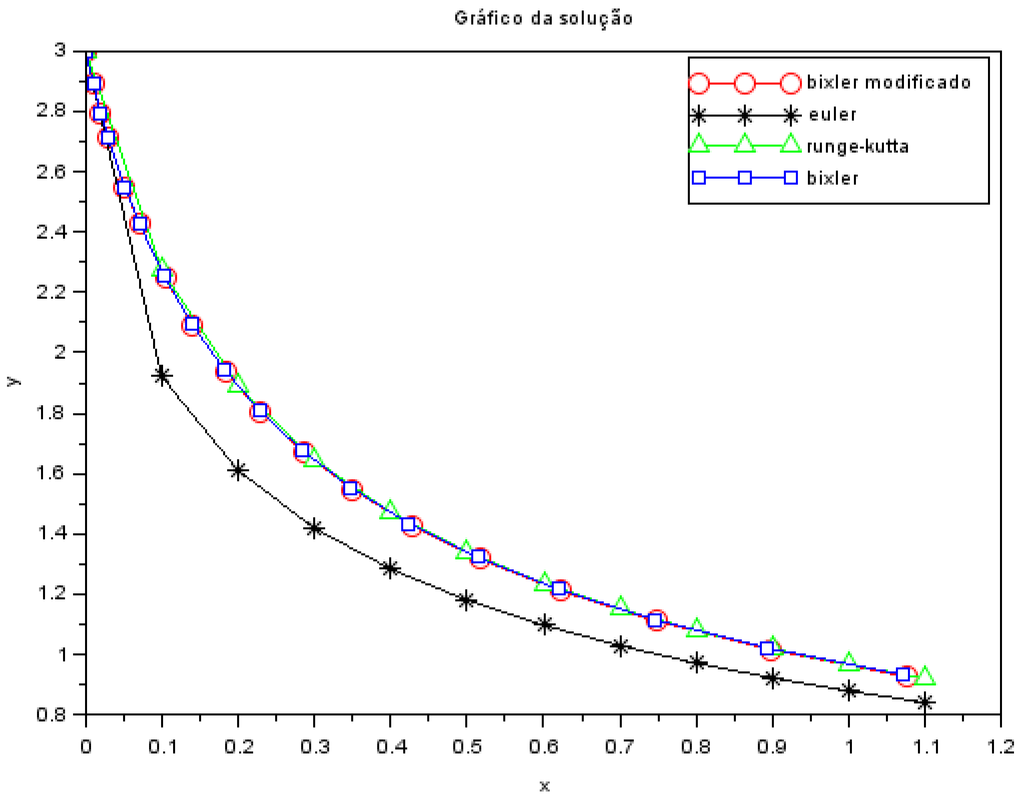

Figura 1 – Soluções do Método de Bixler, Bixler Modificado, Runge-Kutta e Euler

Ademais, para a análise da relação da evolução do tamanho do passo de tempo com o número de iterações, foi plotada a Figura 2 para o método de Bixler Original e o Bixler Adaptado com Secante.

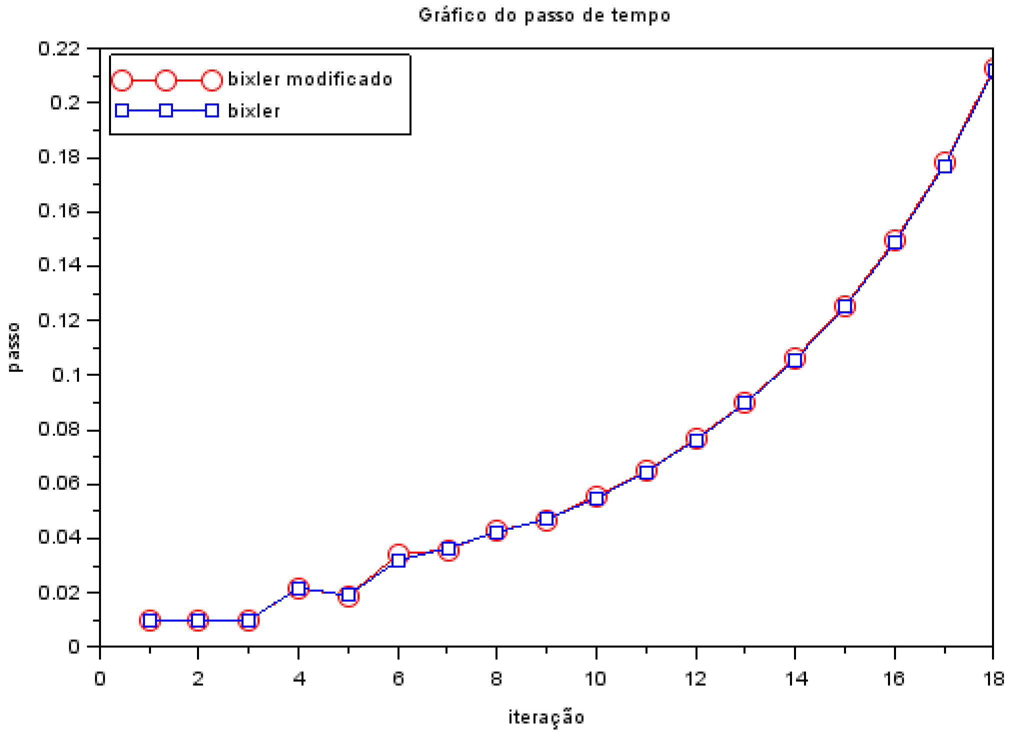

Figura 2 – Evolução do tamanho do passo com o número de iterações

A curva em vermelho é do Bixler Modificado, já a curva em azul é do Bixler Original. Como se pôde observar, o Método Modificado conseguiu acompanhar o crescimento do passo do Método Original, garantindo assim, que o novo método não só resolve o problema, mas resolve de forma eficaz.

Na figura 3, em que se comparou a diferença entre o Método de Bixler e Bixler Original em cada iteração, verificou-se que o erro entre eles é muito baixo, sendo que no intervalo analisado o maior valor de erro não ultrapassou 0,16%. Isso é mais um fato que comprova o ajuste do Bixler Modificado ao Bixler Original.

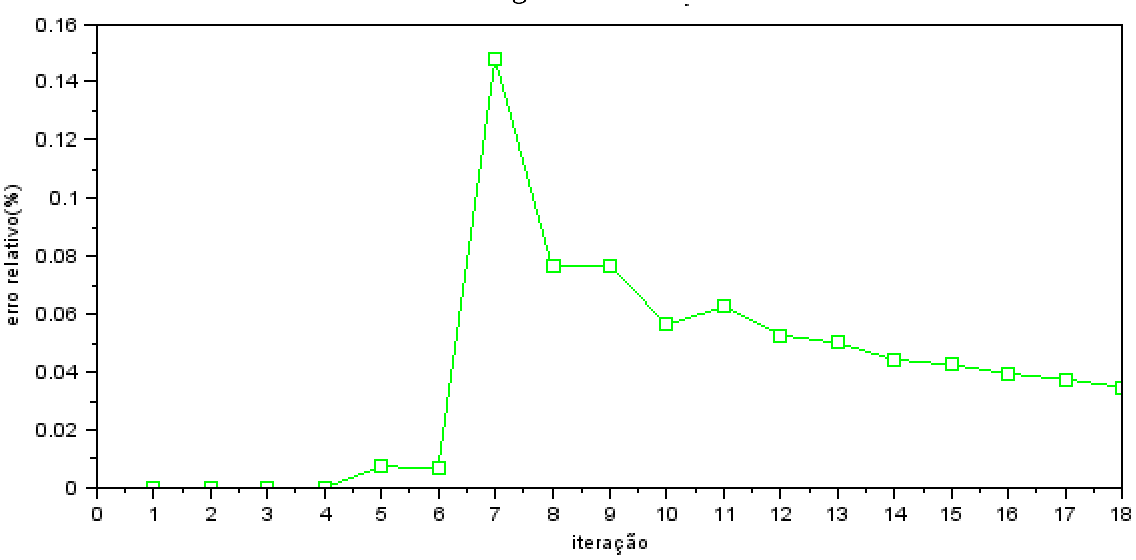

Figura 3: Erro relativo entre o Método de Bixler e o Bixler Modificado

Os resultados anteriormente citados validam a teoria da aplicabilidade e eficiência dos MA. No caso em questão, em que a função analisada foi uma EDO rígida, a variação é grande no início, entretanto, com avançar no domínio do tempo, a curva tende a se estabilizar, logo, intervalos de tempos maiores podem ser aplicados sem perda de acurácia da solução.

4. CONCLUSÃO

Com base nos resultados obtidos, pôde-se concluir que os métodos adaptativos são uma boa alternativa quando se deseja trabalhar com equações diferenciais rígidas, pois, pelo fato da variação da função diminuir com o decorrer do tempo, o tamanho do passo pode aumentar sem perda de precisão.

Ademais, com a modificação no método adaptativo de Bixler, com a linearização do Gêmeos de uma perna só pelo Método da Secante, testou-se uma EDO rígida. Comparou-se o Método de Bixler com o Método de Bixler Modificado, mostrando que ambos convergiram para o mesmo valor, com uma diferença entre os resultados a cada iteração bem pequena. Ademais, o crescimento do tamanho do passo dos dois métodos foram semelhantes, garantindo a eficácia do Método de Bixler Modificado.

Além disso, o fato do Método da Secante não necessitar do cálculo da derivada da função amplia a utilização desse método, afinal, ele pode ser utilizado para resolver problemas cujas derivadas sejam inconvenietes de serem calculadas.

5. AGRADECIMENTO

Ao Instituto Federal do Norte de Minas Gerais – *campus* Montes Claros.

6. REFERÊNCIAS

Bixler, N. E. “An improved time integrator for finite element analysis”. Comunications in Applied Numerical Methods,v. 5, 69-79, 1989.

Chapra, S. C.; Canale, R. P. “Métodos numéricos para engenharia”. 7. ed. Porto Alegre: AMGH, 2016.

Coelho, E. “Análise de Problemas Transientes Empregando Técnica de Passo de Tempo Adaptativo”. Centro de EducaçãoTecnológica de Minas Gerais. Belo Horizonte, 2011.

Iserles, A. “A first course in the numerical analysis of differential equations”. Cambridge university press, 2.ed. 2009.

Lesinhovski, W. C. ;Nós, R. L.. “Solução Numérica de Equações Diferenciais Rígidas”. In: CMAC Sul - Congresso de Matemática Aplicada e Computacional, v. 2, 2014.

Passos, M. “Simulação Numérica do Escoamento em Canais Utilizando o Método das Características e Fluidodinâmica Computacional”. Universidade Tecnológica Federal do Paraná Curso de Engenharia Civil, 2015.

BIXLER ADAPTIVE METHOD: MODIFICATION IN THE LINEARIZATION OF THE BROKER AND APPLICATION IN A REACTOR PROBLEM PFR

Abstract. *To obtain solutions of ordinary differential equations is a great challenge, since many of them have no analytical solution. Hence the importance of computational simulations in this area. Some methods of solving differential equations have an intrinsic control of the time step size, called Adaptive Methods. These procedures, besides being economical in terms* *of memory area, time and computational effort, are also easily coupled with algorithms already implemented. The time step size control is determined according to a pre-established tolerance and the local truncation error, calculated at each iteration. This paper presents a review of such techniques and applications of these proposals in solving an initial value problem of a tubular continuous flow reactor (PFR). In addition, a comparison of the Adaptive Method proposed by Bixler (1989) with the Modified Bixler Method with the Secant is presented, so that the modified method is simpler and presents satisfactory results.*

Keywords: *Computational simulation, Ordinary differential equations, Adaptive time step, PFR reactor.*