

VIII ERMAC-R3

5º Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional

20 a 22-Novembro-2008

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - Natal/RN

Método adaptativo no passo de tempo para o Método dos Elementos Finitos

Tatiane Reis do Amaral João Francisco A. Vitor, José Leôncio F. Souza

Mestrado em Modelagem Matemática e Computacional, CEFET-MG,

30510-000, Belo Horizonte, MG

E-mail: tatiane@dppg.cefetmg.br, joaofrancisco@dppg.cefetmg.br, jleonciofs@gmail.com

Resumo

O método dos Elementos Finitos, quando aplicado a problemas de valor inicial, governados por uma ou mais equações diferenciais parciais parabólicas, gera um sistema de EDO's. Integradores corretor/preditor no tempo vêm sendo propostos, especialmente no contexto da análise dos elementos finitos, em que técnicas implícitas com controle adaptativo do passo de tempo vêm se mostrando muito eficientes. Tais procedimentos, além de serem econômicos quanto à área de memória, tempo e esforço computacional necessários, são facilmente acoplados a algoritmos já implementados. O controle do tamanho de passo temporal é determinado segundo a tolerância pré-estabelecida e o erro de truncamento, calculado a cada iteração. Neste trabalho é apresentada uma revisão de tais técnicas; aplicações dessa proposta na resolução de problemas de valor inicial modelados por EDPs e resolvidos pela técnica dos elementos finitos. Bixler (1989) propôs o emprego da norma RMS (root mean square norm) com a qual cada uma das diferenças entre os valores corrigidos e preditos é normalizada pela máximo valor absoluto da variável dependente, no tempo $n+1$. É também apresentado o modelo diferencial de um processo de secagem, proposto por Souza (1996). Como objetivo final desse trabalho será implementado um integrador, com controle adaptativo do tamanho de passo, empregando a técnica dos elementos finitos, para a resolução desse modelo de secagem.

Palavras-chave

Métodos Numéricos, Equações Diferenciais, Passo de Tempo adaptativo, Método dos Elementos Finitos.

Introdução

A maioria dos métodos numéricos responsáveis pela resolução aproximada de uma equação diferencial parcial (EDP) ou de um sistema de EDPs baseiam-se em uma mesma idéia, transformá-las em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs).

Estes sistemas de EDOs são, a seguir, resolvidos, gerando um conjunto de soluções aproximadas para o problema modelado inicialmente pelas EDPs.

Nesse sentido, dentre os diversos métodos numéricos capazes de aproximar a solução de EDPs, podem ser citados o Método Variacional (MV), o Método dos Elementos Finitos (MEF), o Método dos Volumens Finitos (MVF), o Método das Diferenças Finitas (MDF) e outros.

O MEF é o resultado do esforço conjunto da engenharia, com seus elementos estruturais contínuos e da matemática. A partir dos métodos variacionais e dos resíduos ponderados são escolhidas funções candidatas, que são tratadas neste trabalho por funções de forma. Além disso as funções de ponderação são também substituídas pelas funções de forma. A função solução é substituída na ED por uma função aproximadora, desenvolvida a partir das funções de forma, gerando assim um resíduo ponderado, o qual deve tender a zero no domínio de integração [1].

Obtido o sistema de EDOs, deve ser escolhido um método numérico capaz de resolvê-lo. Cada um dos métodos apresenta características e aplicações próprias, podendo ser classificados inicialmente de acordo com o número de passos - métodos a um passo e métodos multi-passo.

Os métodos a um passo são definidos como aqueles onde conhecida a solução em um passo, é possível obter a solução no passo imediatamente à frente. Como exemplo de técnicas numéricas um passo podem ser citados os métodos de Euler, Range-Kutta, Taylor de ordem superior. Os métodos multi-passo são métodos nos quais é necessário o conhecimento da solução em mais de um passo anterior para se poder determinar a solução do passo imediatamente a seguir. Exemplos de métodos multipasso são os métodos de Adams-Brashforth, Adams-Moulton, Ponto Médio.

Os métodos numéricos podem também ser classificados como método de passo constante e método de passo variável. A esses últimos, pertencem os métodos com controle adaptativo do passo de tempo. Existem também métodos que trabalham com malha adaptativa no domínio geométrico, conhecidos como r-adaptativos, h-adaptativos, dentre outros [9].

Nesse trabalho serão destacados os métodos numéricos com controle adaptativo do passo de tempo, aqui denominados Métodos Adaptativos (MA). Esta técnica busca determinar o tamanho do passo de tempo, de acordo com a magnitude do erro local de truncamento. Uma técnica numérica para resolução de EDOs é dita adaptativa se, por meio de

VIII ERMAC-R3

5º Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional

20 a 22-Novembro-2008

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - Natal/RN

um controle interno do erro numérico, o seu avanço no tempo pode ser automaticamente controlado, de modo a satisfazer a acurácia (exatidão) previamente definida. Tais (MA) são bastante eficientes quando empregados em problemas cujas taxas de variação da função solução apresentem valores elevados em determinados períodos e pequenos em outros.

Em problemas convectivos-difusivos, onde geralmente as soluções apresentam oscilações residuais, o emprego dos (MA) para controle do passo de tempo têm mostrado grande eficiência [2]. Sua implementação tem acarretado economia de tempo e esforço computacional, tornando muito mais eficientes a implementação do MEF [5] e [8].

A proposta contida neste trabalho irá apontar em duas direções. Na primeira será apresentada uma revisão bibliográfica e teórica dos métodos de passo adaptativo para a resolução de problemas de valor inicial. Na segunda parte iremos propor o emprego tais técnicas na resolução do problema de secagem de grãos em um secador assimétrico, problema originalmente proposto por [10].

Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

Existem inúmeros problemas modelados por EDOs, para os quais não são conhecidas resoluções analíticas. Nestes casos, a maior parte tem sido aproximada com o emprego de técnicas numéricas. Nesta seção iremos definir o PVI e alguns elementos teóricos necessários no desenvolvimento das técnicas de resolução numérica.

Definição 1 (Problema de Valor Inicial)

Uma equação ou sistema de equações diferenciais, sujeito a condições iniciais previamente conhecidas constitui um problema de valor inicial (PVI), ou seja,

$$\begin{cases} y' = f(t, y), & a \leq t \leq b \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad (1)$$

onde $y(t)$ é a variável dependente ou um vetor formado pelas variáveis dependentes, y' , suas derivadas primeiras, e y_0 , o VI ou um vetor composto pelos VIs do problema. Neste capítulo será considerado unicamente o problema formado por uma única EDO, de forma a simplificar o tratamento. E além disso, que o PVI (1) possua solução $y(t)$ e que esta seja única e continuamente diferenciável em seu domínio. A discretização do domínio de validade irá gerar o conjunto de pontos

$$t_i = a + i\Delta t, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

$$\Delta t = \frac{b - a}{n}$$

onde n o número de passo do intervalo $[a, b]$ e Δt , o tamanho do passo de tempo. Denotaremos por y_n a aproximação da solução exata em t_n , ou seja, $y_n \simeq y(t_n)$, e por $f_n = f(t_n, y_n)$.

Definição 2 (Erro de Truncamento Local)

Supondo que o valor calculado por um método de k -passos seja exato, isto é, $y_{i+j} = y(t_{i+j})$ para $j = 0, 1, 2, \dots, k - 1$, então o erro local em t_{i+k} é definido por

$$e_{i+k} = y(t_{i+k}) - y_{i+k} \quad (2)$$

Supondo que $y(t)$ possua derivadas contínuas de ordem suficientemente elevadas, então o método explícito e implícito, podem ser deduzidos de (3):

$$y(t_{i+k}) - y_{i+k} = C_{q+1} \Delta t_n^{q+1} y(t_n)^{(q+1)} + O(h^{q+2}) \quad (3)$$

As técnicas preditor-corretor sempre geram duas aproximações em cada passo. Essas aproximações podem ser relacionadas e comparadas com a tolerância do erro local predefinida. Assim, tais aproximações são empregadas na adaptação do controle do erro.

A estabilidade das soluções aproximadas resultantes de métodos numéricos a um ou mais passos estão diretamente ligadas à dimensão do passo de tempo, que deve ser determinado a cada novo PVI analisado. O custo computacional é função desse passo de tempo apropriado Δt . Dessa forma, a escolha de Δt , considerada a ordem de acurácia previamente determinada, passa a representar um papel importante na eficiência dos métodos de resolução de PVI.

Uma potencial limitação das técnicas clássicas de tamanho de passo variável, reside em que eles encorajam o uso de um tamanho de passo constante para períodos de tempo significativamente grandes e por outro lado, restringe o tamanho de passo dentro de limites pré-estabelecidos, como exemplo, pode-se citar o método Range-Kutta-Fehlberg, no qual é efetuado um controle do erro, de tal forma que os valores do passo não ultrapassem um certo valor máximo especificado.

Avaliando estas características, o ideal seria que o tamanho do passo de tempo assumisse valores pequenos nos períodos em que a solução varie lentamente. E que, automaticamente, aumentasse o passo nos períodos em que a solução apresentasse grande variação [4].

Algoritmos que automaticamente ajustam o tamanho do passo, de forma a adaptarem a trajetória da solução, são conhecidos por apresentarem controle adaptativo de tamanho do passo [3]. A implementação de tal aproximação requer a estimativa do erro local de truncamento (ETL) determinado a cada passo. A dimensão do tamanho de passo será determinada a cada iteração, baseada no ELT. Seu valor é calculado de forma a manter o erro dentro de uma dada tolerância, de forma a assegurar uma precisão específica, sem que o mesmo seja limitado valor

VIII ERMAC-R3

5º Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional

20 a 22-Novembro-2008

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - Natal/RN

máximo fixo. Consequentemente, o algoritmo deve monitorar o erro local e , por ajustes no tamanho do passo, tentar manter sua magnitude num nível específico [7].

Estabelecida uma tolerância desejada ϵ pode-se "adaptar" o tamanho do passo. Em geral, a estratégia é aumentar o tamanho do passo se o erro é muito pequeno e diminuir se o erro é muito grande [3]. Um algoritmo padrão para o controle do passo de tempo é encontrado em Gear (1971):

$$\Delta t_{n+1} = \left(\frac{\epsilon}{|d_{n+1}|} \right)^{\frac{1}{k}} \cdot \Delta t_n \quad (4)$$

onde Δt_{n+1} e Δt_n são os tamanhos de passos no tempo t_n e t_{n+1} , ϵ é a precisão desejada, $|d_{n+1}|$ é a distância entre a solução predita e a solução "correta" [2], relacionada ao erro local de truncamento do método numérico, e $k = 1 + q$ para o caso erro local por passo (EPS), sendo q a ordem de erro do método.

Utilizando essas considerações [2] propõe um integrador no tempo melhorado. Este será denominado de Método de Bixler. Gresho et al. (1980) propõe um integrador implícito no tempo fundamentado no preditor de Adams-Bashforth, e na regra do trapézio como corretor. Bixler alterou este integrador incorporando como corretor a equação conhecida como "one-leg twin" da regra do trapézio [6]. Esta equação é também conhecida como "Implicit Mid-point rule" ou regra do Ponto Médio Implícito. Esse método será discutido na próxima seção.

Método de Bixler

Este capítulo descreve um método para resolução de PVI's com controle adaptativo do passo de tempo. Gresho et al. (1980), ao propor a estratégia GLS de controle adaptativo do passo de tempo, recomendou o emprego de um preditor Adams-Bashforth com acurácia de segunda ordem. E o emprego da regra do trapézio como corretor.

Bixler (1989) propõe três alterações no integrador preditor/corretor proposto por Gresho. Primeiramente, sugere a substituição do corretor desenvolvido segundo a lei do trapézio pelo corretor 'one leg twins' (gêmeos de um única perna). Em segundo lugar, as expressões para estimativa das taxas de variação da solução são substituídas, de forma a melhorar a performance do preditor. Por fim, a expressão responsável pelo cálculo da dimensão do passo de tempo a cada iteração é modificada.

O desenvolvimento do método de Bixler consiste nas equações das três etapas a seguir:

1- O preditor de Adams-Bashforth com acurácia

de segunda ordem:

$$y_{n+1}^p = y_n + \frac{\Delta t_n}{2} \left[\left(2 + \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \right) \dot{y}_n - \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \dot{y}_{n-1} \right] \quad (5)$$

onde y_{n+1}^p se refere ao y predito no plano temporal $n+1$ e \dot{y}_n e \dot{y}_{n-1} as derivadas no plano temporal n e $n-1$.

2- Como corretor foi empregado a expressão "one-leg twin", Eq. (7), em substituição do antigo corretor do método GLS Eq. (6):

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t_n \frac{f(y_{n+1}, t_{n+1}) + f(y_n, t_n)}{2} \quad (6)$$

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t_n f \left(\frac{y_{n+1} + y_n}{2}, \frac{t_{n+1} + t_n}{2} \right) \quad (7)$$

3- Para controle do passo de tempo é sugerida a expressão

$$\Delta t_{n+1} = \Delta t_n \left(\frac{\epsilon}{|d_{n+1}|} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (8)$$

onde ϵ é a estimativa para o erro local e d_{n+1} uma expressão relacionada à diferença entre a solução corrigida e a exata:

$$d_{n+1} = \frac{\alpha}{2 + \alpha + 3 \cdot \frac{\Delta t_{n-1}}{\Delta t_n}} (y_{n+1} - y_{n+1}^p) \quad (9)$$

As Eqs (6) e (7) responsáveis pela correção do método GLS e do método de Bixler, respectivamente, são resolvidas com o emprego do método de Newton. A Eq. (9) é desenvolvida através do emprego do dispositivo de Milne (Iserles, 1996). O valor de α , sugerido por Bixler (1989), pode ser escolhido na faixa $0,25 < \alpha < 1$, muito embora, para equações diferenciais não lineares, sugere-se que tal coeficiente deva ser mantido igual a 0,25. Neste trabalho irá ser investigada a relação entre o coeficiente α e a qualidade das soluções aproximadas, na resolução de um sistema de equações diferenciais parciais com a análise de elementos finitos.

O erro de truncamento local para a Eq. (7) é dado por:

$$y_{n+1} - y_{n+1}^E = \frac{\alpha}{12} \Delta t_n^3 \ddot{f}(y, t) + O(\Delta t^4) \quad (10)$$

onde o E indica a solução exata. Com o objetivo de verificar e comparar os resultados e o tamanho dos passos produzidos pelos métodos GLS e Bixler, será apresentado a seguir um exemplo.

Considere o problema de valor inicial

$$\dot{y} = -y^2 \quad (11)$$

cujas solução analítica seja igual a

$$y = \frac{1}{1+t} \quad (12)$$

VIII ERMAC-R3

5º Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional

20 a 22-Novembro-2008

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - Natal/RN

a qual encontra-se representada pela Fig. 1 como se pode verificar, nos primeiros segundos a função apresenta alta taxa de variação com o tempo, tendendo para zero nos segundos finais. Este tipo de comportamento é explorado pelos métodos de passo de tempo adaptativo. Os períodos em que a taxa de variação da função em relação ao tempo são elevadas, os passos de tempo tendem a valores pequenos em que seu comprimento, crescendo a medida que as taxas diminuem.

Foram avaliados os seguintes critérios como condição inicial: ϵ (tolerância) foi da ordem de 10^{-3} , 10^{-5} e 10^{-7} , o tempo final de simulação foi de 10 segundos e o passo de tempo inicial igual a 1×10^{-5} , com o número total de iterações n iguais a 300.

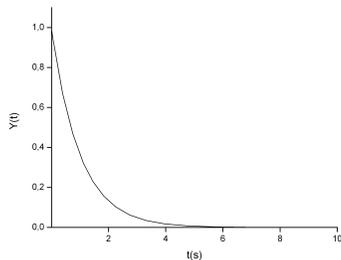


Figura 1: Solução da equação 11.

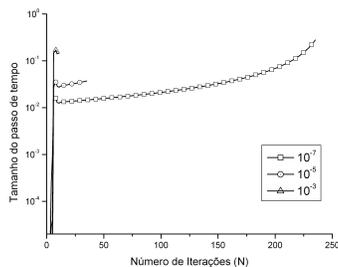


Figura 2: Número de iterações necessárias para atingir o tempo final com as tolerâncias especificadas.

Na Fig.2 encontram-se apresentadas o número de iterações necessárias em três resoluções do PVI (Eq.11), relativas às tolerâncias do erro local 10^{-3} , 10^{-5} e 10^{-7} , respectivamente. Verificou-se existir uma relação entre esse número de iterações e a tolerância imposta. Quanto menor a tolerância, um maior número de passos são necessários para a resolução total do problema, como obviamente poderia ser esperado. Na resolução com tolerância igual a 10^{-3} , foram necessárias 21 iterações até a resolução total. Para a resolução com tolerância igual a 10^{-5}

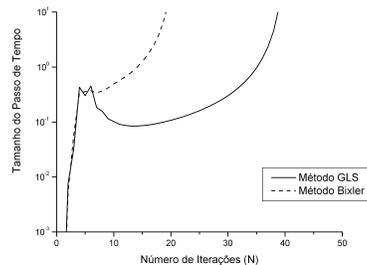


Figura 3: Tamanho do passo de tempo a cada iteração para o número total de iterações $N=50$.

e 10^{-7} foram empregadas 35 e 217 iterações, respectivamente.

Para a tolerância de 10^{-5} , conforme a Fig. 4, utilizou-se o método de passo variável, o Método Preditor-Corretor de Adams. Verificou-se que o número de iterações necessárias para atingir o tempo final de 10 segundos foi superior a 100 iterações. Para a mesma tolerância utilizando o Método de Bixler foram necessárias 35 iterações.

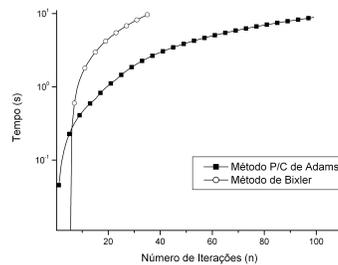


Figura 4: Número de Iterações necessárias para atingir o tempo final, com tolerância de 10^{-5} .

Observamos na Fig. 3 que o tamanho do passo de tempo cresce exponencialmente conforme o comportamento da solução fica mais estável, comparando com a Fig. 1. O tamanho do passo cresce mais rapidamente quando resolvido pelo Método de Bixler. Comparando com o Método GLS a melhora é significativa.

A significativa economia computacional verificada no resultados acima aponta fortemente as vantagens do método de Bixler. Encorajados com estes resultados nos propomos a aplicá-lo em um problema de secagem, onde claramente temos que determinadas propriedades tendem ao estado conservativo [10].

VIII ERMAC-R3

5º Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional

20 a 22-Novembro-2008

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - Natal/RN

Simulação de secagem de grãos em um secador axissimétrico

Souza (1996) apresentou um modelo para simulação da secagem de grãos em um secador axissimétrico. A solução das equações diferenciais, que serão estudadas neste trabalho, foi efetuada com o emprego do Método dos Elementos Finitos.

Os resultados apresentados por Souza (1996) foram comparados em seu trabalho com dados experimentais e com resultados numéricos da literatura. Para o secador axissimétrico simulou-se a mesma geometria de um secador real utilizado na EMBRAPA e os resultados obtidos foram comparados com dados reais coletados na Empresa.

A resolução deste modelo foi efetuado para um determinado tamanho de passo constante com o emprego do MEF. Em nosso trabalho propomos utilizar métodos adaptativos para o controle do tamanho do passo de tempo. Inicialmente iremos implantar o método de Bixler.

Propostas

Alterações no integrador serão realizadas para resolução de sistemas de equações diferenciais. Na Eq. (8) o valor absoluto de d_{n+1} onde apresenta a diferença entre a solução predita e a correta utilizaremos uma norma adequada, do tipo RMS (ou raiz quadradas médias). Esta norma é apresentada por Gresho et al. (1980). A adequação desta norma as equações de Souza (1996) será realizada durante nosso trabalho.

Estas adequações e o tratamento do ferramental matemático necessário juntamente com a implementação das equações, fazem parte dos objetivos deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- [1] ASSAN, A. E. *Método dos Elementos Finitos - Primeiros Passos*. Ed. Unicamp, São Paulo, 1999.
- [2] BIXLER, N. E. An improved time integrator for finite element analysis. *Communications in Applied Numerical Methods* 5 (1989), 69–79.
- [3] CHAPRA, S. C., AND CANALE, R. P. *Numerical Methods for Engineers*, 2 ed. ed. McGRaW-Hill Book Company, New York, 1988.
- [4] COLLINS, G. W. *Fundamental numerical methods and data analysis*, 2003.
- [5] FENG, Y., AND PERIÉ, D. A time-adaptive space-time finite element method for incompressible lagrangian flows with free surfaces: computational issues. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190 (2000), 499–518.

- [6] HAIRER, E., AND WANNER, G. *Solving Ordinary Differential Equations II - Stiff and Differential-Algebraic Problems*, 2nd revised ed. ed. Springer, Berlin, 1993.
- [7] JOHNSTON, R. L. *Numerical Methods - A software approach*. John Wiley & Sons, Toronto, 1982.
- [8] KAVETSKI, D., BINNING, P., AND SLOAN, S. Adaptive time stepping and error control in a mass conservative numerical solution of the mixed form of richards equation. *Advances in Water Resources* 24 (2001), 595–605.
- [9] SÖDERLIND, G. Automatic control and adaptive time-stepping. *Numerical Algorithms* 31 (2002), 281–310.
- [10] SOUZA, J. L. F. Simulação de secador cilíndrico de grãos com fluxos radial e axial de ar. Master's thesis, UFMG, Belo Horizonte, 1996.