

# Solução de sistemas de equações algébrico-diferenciais ordinárias de índice superior

*Márcia Lourenço<sup>1</sup>*  
*Argimiro Resende Secchi<sup>2</sup>*

## Resumo

Neste trabalho são discutidas três técnicas para a inicialização consistente e integração numérica de sistemas de equações algébrico-diferenciais de índice superior. A primeira técnica trabalha exclusivamente com o sistema reduzido de índice um ou zero, as outras duas incorporam, no sistema reduzido, restrições que surgem após a redução do índice pela introdução de variáveis de restrição e integrais de variáveis de restrição, respectivamente. O processo de redução de índice é realizado de forma estrutural, fundamentado na teoria de grafos, e a integração numérica é realizada pelo método de predição-correção usando fórmulas de retro-diferenciação. A comparação entre as técnicas é realizada com base em resultados experimentais, mostrando a superioridade da técnica das integrais das variáveis de restrição.

**Palavras-chave:** EADs, redução de índice.

## Abstract

In this work, three techniques for consistent initialization and numeric integration of high-index differential-algebraic equation systems are discussed. The first technique works only with the reduced system of index one or zero. The others incorporate, in the reduced system, restrictions that appear after the index reduction through the introduction of new error monitoring variables. The index reduction process is accomplished in a structural form based on the graph theory, and the numerical integration is carried out by the prediction-correction method using back-differentiation formulas. The comparison among the techniques is based on experimental results, showing the advantages of the technique that uses the new error monitoring variables in the integral form.

**Keywords:** DAEs, index reduction.

## 1 Introdução

Problemas descritos por equações algébricas e equações diferenciais, EADs, despertam interesse devido a sua importância em processos dinâmicos e às dificuldades numéricas geradas nos códigos computacionais disponíveis.

Os códigos computacionais utilizados e explorados para a resolução das EDOs podem ser utilizados somente para uma subclasse de EADs, as EADs lineares de índice qualquer e as EADs de índice inferior ( $\leq 1$ ). Devido a

<sup>1</sup> Mestre em Matemática Aplicada – UFRGS, RS. Professora do Instituto de Ciências Exatas e Tecnológicas (ICET) – FEEVALE, RS. E-mail: marcialourenco@feevale.br

<sup>2</sup> Doutor em Engenharia Química – UFRJ. Professor da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Química. E-mail: arge@enq.ufrgs.br

essas restrições é necessário caracterizar o conjunto de equações em estudo. Os métodos de caracterização estão relacionados à estrutura, à resolubilidade, à inicialização e ao índice diferencial das EADs.

Dentre os elementos citados, o principal parâmetro de caracterização de EADs é o índice diferencial, que corresponde ao número mínimo de vezes que o sistema de EADs (ou um subconjunto deste) precisa ser diferenciado, em relação à variável independente, até ser transformado em um sistema de EDOs, cujo índice diferencial é zero.

Os sistemas que apresentam índice diferencial  $\leq 1$  comportam-se de maneira semelhante a sistemas de EDOs e podem ser integrados diretamente. Caso o sistema apresente índice superior, maior que 1, é recomendada a redução do seu índice diferencial para que este possa ser introduzido a um código de integração.

A redução do índice diferencial se faz através da diferenciação de algumas de suas equações antes da integração do sistema. Entretanto, este processo pode ocasionar o surgimento de novas variáveis ou a perda de restrições existentes no sistema original e, caso este processo seja manual, torna-se trabalhoso, em especial para sistemas de ordem elevada.

Diante destes problemas, o presente trabalho apresenta técnicas de inicialização consistentes e integração numérica de sistemas de EADs de índice superior através de um código numérico: DASSLC (SECCHI, 1992). Durante o processo de redução de índice de EADs, surgem dois diferentes tipos de sistemas: o sistema reduzido e o sistema estendido.

O sistema reduzido é constituído pelas equações necessárias para transformar o sistema de EADs de índice superior em EADs de índice  $\leq 1$ , e o sistema estendido é constituído pela união do sistema original com o sistema reduzido e as demais equações intermediárias geradas no processo de redução de índice. O sistema estendido aumenta o número de equações resultantes em relação ao sistema original, determinando o grau de liberdade do sistema original, ou seja, o número de variáveis que podem ser escolhidas arbitrariamente na inicialização.

Diante das dificuldades citadas, optou-se por utilizar o código computacional DAGRAFO, (COSTA Jr. *et al.*, 2000; COSTA Jr., 2001), para realizar a redução do sistema original, baseado no algoritmo proposto por Pantelides (1988). O código utiliza a teoria grafos para detectar o conjunto de equações que deve ser diferenciado para gerar o sistema reduzido.

O presente trabalho apresenta três técnicas para inicialização consistente e integração de sistemas de EADs de índice superior. A primeira técnica trabalha, exclusivamente, com o sistema reduzido; a segunda, com o sistema estendido e com variáveis de restrição; a terceira trabalha com o sistema estendido e com as integrais das variáveis de restrição.

## 2 Redução de índice

Na determinação do conjunto mínimo de equações a ser diferenciado em um dado sistema de EADs para formar o sistema reduzido, utilizou-se o código numérico DAGRAFO (COSTA Jr. *et al.*, 2000; COSTA Jr., 2001). Para a execução deste código, o usuário deve fornecer a matriz de dependência do sistema original. Essa matriz indica quais variáveis e suas derivadas aparecem em cada equação. Para um sistema de equações na forma da equação (2) o elemento  $(i, j)$  da matriz de dependência é dado por:

- 0 se a  $i$ -ésima equação não envolve  $z_i$  e  $\dot{z}_i$ ,
- 1 se a  $i$ -ésima equação envolve  $z_i$ , mas não  $\dot{z}_i$ ,
- 2 se a  $i$ -ésima equação envolve  $\dot{z}_i$ , mas não  $z_i$ ,
- 3 se a  $i$ -ésima equação envolve  $z_i$  e  $\dot{z}_i$ , (1)

Para descrever o procedimento, utilizando a teoria de grafos, será usado o código que informará qual (quais) equação(ões) deve(m) ser diferenciada(s) para obter o sistema reduzido.

$$F(z, \dot{z}, t) = F(x, \dot{x}, y, t) = 0 \quad (2)$$

onde  $x, \dot{x} \in \mathfrak{R}^{nd}$  são as variáveis diferenciais e suas derivadas e  $y \in \mathfrak{R}^{na}$  são as variáveis algébricas com  $N = nd + na$  e  $z = \{x, y\}$ .

Na busca das equações do sistema (2) a serem diferenciadas, só devem ser consideradas as derivadas das variáveis diferenciais e as

variáveis algébricas,  $\dot{x}$  e  $y$ , respectivamente. Para o algoritmo em estudo, as equações  $\{F\}$  e as variáveis  $\{\dot{x}, y\}$  formam os dois conjuntos distintos de vértices de um grafo bipartido, denominados, respectivamente,  $E$  e  $V$ . A presença de uma variável  $V_i$  em uma equação  $E_j$  é representada no grafo pela aresta  $(i,j)$ .

Exemplo 1:

Considere o sistema de EADs,

$$f_1 = \dot{x}_1 - y_1 - 1 = 0 \quad (3)$$

$$f_2 = \dot{x} + x_1 = 0 \quad (4)$$

$$f_3 = x_2 + \frac{x_1^2}{2} = 0 \quad (5)$$

O sistema apresenta  $N = nd + na = 3$ , sendo  $nd = 2$  equações diferenciais e  $na = 1$  equação algébrica e  $M = 2nd + na = 5$  variáveis. A figura 1 apresenta o grafo bipartido inicial.

O vetor  $X$  que contém todas as variáveis desconhecidas  $X = (x_1, x_2, \dot{x}_1, \dot{x}_2, y)$

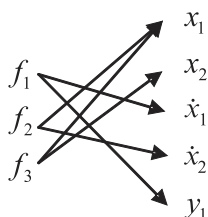


Figura 1 – Grafo bipartido  $\{f\}$ -- $\{X\}$  do exemplo 1

Neste momento, o código DAGRAFO, inicializado com o vetor  $A$ , representa a relação entre as variáveis e suas derivadas em relação ao tempo, definido como:

$$A(j) = \begin{cases} k & \text{se } x_k = \frac{dx_j}{dt}, 1 \leq j, k \leq 2nd + na \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (6)$$

Para o exemplo em questão tem-se:  $A = (3,4,0,0,0)$ .

Todos os  $V$  – nós com  $A(\cdot) \neq 0$  são retirados do grafo, conforme a figura 2:

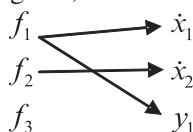


Figura 2 – Grafo bipartido intermediário

A partir desta etapa, o código realiza procedimentos de associação variável-equação (PANTELIDES, 1988) para ver se há necessidade de novas diferenciações. Como no exemplo da figura 2, não há nenhuma variável associada à equação  $f_3$ , torna-se necessário diferenciá-la, assim encontra-se o grafo bipartido da solução final:

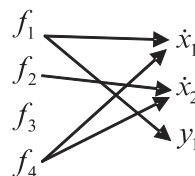


Figura 3 – Grafo bipartido final

Neste momento, não há necessidade de outra diferenciação, finalizando o algoritmo com os seguintes vetores:

$$A = (3,4,0,0,0)$$

$$B = (0,0,4,0)$$

$$ASSIGN = (0,0,4,2,1)$$

O vetor  $B$  é a lista de associações das equações (indica qual equação,  $B(i)$ , foi criada a partir da  $i$ -ésima equação) e também indica o índice diferencial do sistema. Para o sistema em estudo o índice diferencial é no máximo 2 (ou seja, 1 + número máximo de diferenciações das equações originais). O vetor  $ASSIGN$  faz associação entre as variáveis e as equações, isto é, contém a equação,  $ASSIGN(j)$ , à qual cada variável  $j$  está associada, fornecendo as equações que fazem parte do sistema reduzido. O sistema final tem dimensão  $M = 4$  equações e  $N = 5$  variáveis, implicando o sistema possuir 1 grau de liberdade.

Após vários testes executados pelo código descrito, obtiveram-se resultados satisfatórios em quase todos os casos. O código DAGRAFO não detecta subconjuntos de equações que sejam singulares, mas estruturalmente não-singular (PANTELIDES, 1988). Após encontrar o conjunto de equações que compõem o sistema estendido, a próxima etapa é encontrar as condições iniciais consistentes que satisfazem tanto o sistema original como o sistema estendido, para esta etapa, utilizou-se o código computacional DASSLC (SECCHI, 1992).

### 3 Técnicas de inicialização

Sistemas de EADs da forma (2) sempre que puderem ser transformados para a forma explícita poderão ser resolvidos por métodos aplicados a sistemas de EDOs. Entretanto, nem sempre é possível realizar este procedimento e, quando possível, não há garantia que a solução numérica do novo sistema seja compatível com a solução exata do sistema original.

Técnicas de inicialização de sistemas de EADs estão sendo aprimoradas para apresentarem resultados confiáveis em problemas como os citados e em alguns sistemas de EADs, nos quais a resolução direta nem sempre é possível, devido à singularidade na matriz jacobiana. Dessa forma, a maneira mais coerente de resolver sistemas de EADs que apresentem singularidade na matriz jacobiana e/ou índice elevado, é reduzir o índice diferencial do sistema, isto é, transformar o sistema original de EADs em um sistema reduzido na forma de EDOs, ou EADs de índice 1.

Após encontrar o sistema reduzido fornecido pelo vetor ASSIGN, através do código DAGRAFO, observa-se que algumas equações que compõem o sistema original não fazem parte desta associação. Essas equações passam a representar as equações “rejeitadas” e geralmente são as equações algébricas do sistema original de EADs que foram diferenciadas na construção do sistema reduzido.

Embora as equações “rejeitadas” não estejam associadas à variável alguma, elas são de extrema importância para a inicialização e devem ser satisfeitas não somente na inicialização, mas também em todos os tempos de integração. Caso, após o processo de redução de índice, o sistema resultante apresente mais equações que variáveis novas, o novo sistema apresentará restrições entre as variáveis do sistema que estavam implícitas nas equações originais. Algumas destas restrições serão as equações “rejeitadas” na construção do sistema reduzido, mas que podem conter informações importantes, como balanços globais de massa.

Do exposto, conclui-se que é necessário trabalhar com o sistema reduzido para resolver sistemas de EADs de índice elevado. Porém,

deve-se ficar alerta à perda de algumas restrições algébricas que estavam presentes no sistema original, restrições que podem ser importantes para a viabilidade do método utilizado. Ou seja, para a obtenção das condições iniciais consistentes, deve-se resolver o sistema estendido e para a integração do sistema de EADs, deve-se, no mínimo, resolver o sistema reduzido.

O exemplo 1, após a aplicação do código numérico, indica que seu sistema reduzido é composto pelas equações (3), (4) e (7). A equação (7) surge a partir da derivação da equação (5):

$$\dot{x}_2 + x_1 \cdot \dot{x}_1 = 0 \quad (7)$$

Este novo sistema apresenta índice diferencial 1 e pode ser resolvido por técnicas de integração de EDOs, entretanto, a equação (5) foi “rejeitada” no processo de redução de índice, podendo interferir na interpretação física da solução do sistema original.

Como estas restrições são de grande importância para a confiabilidade do método numérico aplicado, optou-se por desenvolver uma técnica que as levem em conta na integração do sistema. O desenvolvimento desta técnica gera equações a mais no sistema reduzido e, por conseqüência, a dimensão do sistema deve ser aumentada, com um número de variáveis novas igual ao de equações não associadas. Essas variáveis novas são denominadas “variáveis de restrição”. Deste modo, resolve-se o sistema estendido ao invés do sistema reduzido.

As equações, que até então não estavam associadas e passaram a compor o novo sistema, têm o seu valor subtraído de uma dessas variáveis de restrições, que são inicializadas com valor nulo. Desta forma, o código passa a controlar a violação das restrições escondidas e o usuário tem informação direta do quanto cada restrição escondida é violada.

Ao se considerar o sistema estendido para ter um melhor desempenho do código, deve-se levar em consideração uma propriedade característica do problema, chamada condicionamento. Esta também contribuirá para a exatidão do resultado computado. O

condicionamento mostra como a solução do problema muda se os dados de entrada contêm alguma perturbação em relação aos verdadeiros.

Esta preocupação surge porque, na prática, muitos destes dados provêm de observações experimentais, nas quais as medições estão sujeitas a perturbações e muitos códigos tendem a falhar devido a duas situações: a natureza do problema e/ou o algoritmo utilizado. O algoritmo DASSLC apresentou-se eficiente quando aplicado a sistemas genéricos, porém, a solução de sistemas de EADs nem sempre é confiável devido à inicialização do mesmo. Por este motivo, optou-se por levar em consideração as restrições escondidas no sistema reduzido para se ter um melhor controle da solução. No presente trabalho, executou-se o código DASSLC para todos os exemplos estudados, considerando três situações:

(i) Sistema reduzido: sistema de EADs de índice 1 ou zero, resultante do processo de redução de índice.

$$F_r(x, \dot{x}, y, t) = 0 \quad (8)$$

(ii) Sistema estendido com variáveis de restrições: sistema de EADs formado pelas equações do sistema reduzido e equações “rejeitadas” ou restrições escondidas com a introdução da variável de restrição. Essas restrições são controladas pelo integrador, e o usuário pode monitorar o quanto elas interferem na solução aproximada do sistema.

$$\begin{cases} F_r(x, \dot{x}, y, t) = 0 \\ G(x, \dot{x}, y, t) = \varepsilon \end{cases} \quad (9)$$

O novo sistema passa a contar com as variáveis de restrição  $\varepsilon$  que, ao executar o código numérico DASSLC, fornece além do erro de restrição  $\varepsilon$  no instante  $t$ , a derivada do erro  $\dot{\varepsilon}$ . No momento em que as variáveis de restrição são introduzidas no sistema, passa-se a monitorar o quanto cada restrição escondida é violada. Desta forma, tem-se uma solução numérica mais confiável.

(iii) Sistema estendido com as integrais das variáveis de restrições: sistema de EADs composto pelo sistema reduzido e pelas equações

rejeitadas, com introdução das integrais das variáveis de restrição.

$$\begin{cases} F_r(x, \dot{x}, y, t) = 0 \\ G(x, \dot{x}, y, t) = \dot{\varepsilon} \end{cases} \quad (10)$$

A integração do novo sistema pelo código numérico DASSLC fornece a integral do erro  $e = \int \varepsilon dt$  e o erro da restrição no instante  $t$ ,  $\varepsilon = \dot{\varepsilon}$ .

Como exemplo das três técnicas de integração, utilizou-se o exemplo 1, onde:

$$\begin{aligned} \text{Sistema (i)} \quad & \dot{x}_1 - y_1 - 1 = 0 \\ & \dot{x}_2 + x_1 = 0 \\ & \dot{x}_2 + x_1 \cdot \dot{x}_1 = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Sistema (ii)} \quad & \dot{x}_1 - y_1 - 1 = 0 \\ & \dot{x}_2 + x_1 = 0 \\ & \dot{x}_2 + x_1 \cdot \dot{x}_1 = 0 \end{aligned}$$

$$x_2 + \frac{x_1^2}{2} = \varepsilon$$

$$\begin{aligned} \text{Sistema (iii)} \quad & \dot{x}_1 - y_1 - 1 = 0 \\ & \dot{x}_2 + x_1 = 0 \\ & \dot{x}_2 + x_1 \cdot \dot{x}_1 = 0 \\ & x_2 + \frac{x_1^2}{2} = \dot{\varepsilon} \end{aligned}$$

Após vários testes, concluiu-se que a primeira e terceira técnicas podem gerar um conjunto solução mesmo quando recebem condições iniciais inconsistentes. Para a primeira técnica, essa característica decorre do fato de, no sistema reduzido, algumas restrições, muitas vezes com significado físico importante, serem perdidas quando as equações algébricas são diferenciadas. Trabalhando com o sistema reduzido e as integrais das variáveis de restrição, o erro da inicialização é absorvido pelas variáveis de restrição, mascarando a precisão do código numérico.

A segunda técnica adotada não tem como absorver os erros da inicialização pelas variáveis de restrição, dessa forma, quando as restrições adicionais não são satisfeitas, não é gerada solução alguma.

Entretanto, ao aplicar condições iniciais consistentes para todas as técnicas, conclui-se que o sistema reduzido com as integrais das variáveis de restrição é o método mais conveniente, pois apresenta melhor desempenho computacional (inclusive quando a matriz jacobiana do sistema apresenta problema de mau condicionamento) e garante que todas as restrições que compõem o sistema original estejam presentes no sistema reduzido.

#### 4 Exemplos numéricos

Os resultados das aplicações das técnicas de inicialização consistentes e integração numérica de sistemas de EADs são mostrados para dois problemas físicos. A análise da eficácia de cada solução leva em consideração as observações dos dados obtidos a partir das técnicas empregadas e a estrutura da matriz jacobiana do sistema discretizado, também chamada de matriz de iteração do sistema.

Exemplo 2: O modelo utilizado foi proposto por Logsdon e Biegler (1993) e apresenta índice diferencial 3. O sistema aqui resolvido consiste no controle da pureza obtida na fase de produção de uma coluna de destilação em batelada. A descrição pode ser ilustrada na figura 4:

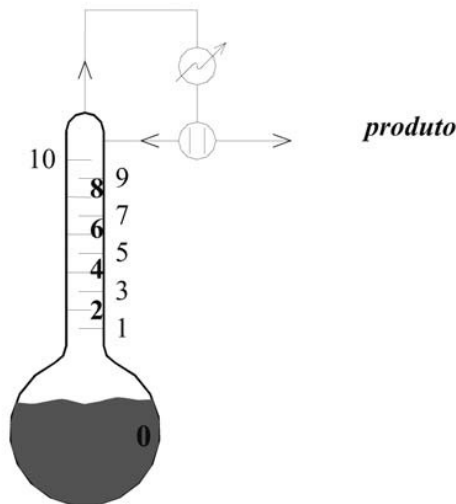


Figura 4 – Coluna de destilação em batelada – exemplo 2.

As equações de (11) a (16) constituem o modelo:

$$\dot{x}_0^j = \frac{V}{H_0} \left( x_0^j - y_0^j + \frac{R}{R+1} (x_1^j - x_0^j) \right) \quad (11)$$

$$\dot{x}_i^j = \frac{V}{H_i} \left( y_{i-1}^j - y_i^j + \frac{R}{R+1} (x_{i+1}^j - x_i^j) \right) \quad (12)$$

$$i = 1, \dots, np$$

$$\sum_{j=1}^{nc} y_i^j = 1 \quad i = 0, \dots, np+1 \quad (13)$$

$$\dot{x}_{np+1}^j = \frac{V}{H_{np+1}} (y_{np}^j - x_{np+1}^j) \quad (14)$$

$$\dot{H}_0 = -\frac{V}{R+1} \quad (15)$$

$$x_{np+1}^j = 0,998 \quad (16)$$

onde:

$V$  vazão molar de vapor em todos os estágios;

$H_i$  número de moles em cada estágio da coluna;

$R$  razão do refluxo;

$i$  número de estágio, sendo igual a 0 para o refeedor e  $np+1$  para o condensador;

$j$  número do componente, variando de 1 a  $nc-1$  ( $nc$  é o número de componentes);

$x$  fração molar na fase líquida;

$y$  fração molar na fase vapor em função de  $x$  e da temperatura  $T$  do estágio, sendo calculado pela relação de equilíbrio  $y_i^j = K(T_i, x_i^j) x_i^j$   
 $i = 0, \dots, np+1$

$x_i^{nc}$  fração molar na fase líquida do componente  $nc$  no estágio  $i$ , representada por  $x_i^{nc} = 1 - \sum_{j=1}^{nc-1} x_i^j$ ,  $i = 0, \dots, np+1$

O modelo possui  $nc = 2$  componentes e  $np = 10$  pratos, desta forma, o sistema de equações algébrico-diferencial original é composto por 26 equações, das quais 13 representam as equações diferenciais, e as demais representam as algébricas, e 26 variáveis das quais  $x_i^j$  ( $j = 1, \dots, nc-1$ ;  $i = 0, \dots, np+1$ ) e  $H_0$

representam as variáveis diferenciais e  $T_i$  ( $i = 0, \dots, np + 1$ ) e  $R$  representam as variáveis algébricas. O processo final deve apresentar 99,8% de pureza para o elemento que está sendo retirado do sistema, equação (16).

De forma genérica, é possível estabelecer a relação existente entre o número de equações e o número de variáveis. Sabe-se que para qualquer número de componentes e pratos, o sistema contém  $(2nc - 2)(np + 2) + 2$  equações, sendo  $(nc - 1)(np + 2) + 1$  equações diferenciais e as demais equações algébricas;  $(nc - 1)(np + 2) + 1$  variáveis diferenciais e  $(nc - 1)(np + 2) + 1$  variáveis algébricas. O fato da variável  $R$  não estar presente em equação algébrica alguma torna o sistema de índice superior.

As condições iniciais devem satisfazer, também, o sistema estendido. Assim, torna-se necessário determinar quais equações devem ser diferenciadas para reduzir o índice diferencial do sistema. Nesta etapa, a matriz de dependência do sistema original deve ser fornecida ao código DAGRAFO. Após a execução do código, obteve-se o seguinte resultado:

$$X = \begin{pmatrix} x_0, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9, x_{10}, x_{11}, H_0 \\ \dot{x}_0, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3, \dot{x}_4, \dot{x}_5, \dot{x}_6, \dot{x}_7, \dot{x}_8, \dot{x}_9, \dot{x}_{10}, \dot{x}_{11}, \dot{H}_0 \\ T_0, T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6, T_7, T_8, T_9, T_{10}, T_{11}, R \end{pmatrix},$$

$$A = \begin{pmatrix} 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 0, 0, 0, 0, 0 \\ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 40, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 41, 0, 0, 0, 0 \end{pmatrix}$$

$$B = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 28, 29, 0, 0, 27, 30, 0, 0, 0),$$

$$ASSIGN = \begin{pmatrix} 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 29 \\ 23, 24, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 21, 30, 28 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Analisando os vetores  $ASSIGN$  e  $B$ , percebe-se que o novo sistema é resultante de uma diferenciação das equações (13) do estágio  $np$  (14) e duas diferenciações, da equação (16), caracterizando-se como um sistema de índice 3. Após estas diferenciações, o novo sistema passa a apresentar quatro novas equações e duas novas variáveis:  $\dot{x}_{11}$  e  $\dot{T}_{10}$ . O sistema estendido apresenta 30 equações e 41 variáveis, resultando em 11 graus de liberdade.

Com o sistema estendido já determinado, a próxima etapa refere-se ao uso do código DASSLC, o qual necessita de um conjunto

consistente de condições iniciais, como o dado abaixo, para dar início à integração do sistema:

$$\begin{aligned} x_0 : 0.55, & \quad x_1 : 0.59, & \quad x_2 : 0.64, \\ x_3 : 0.69, & \quad x_4 : 0.74, & \quad x_5 : 0.79, \\ x_6 : 0.84, & \quad x_7 : 0.89, & \quad x_8 : 0.98, \\ x_9 : 0.98, & \quad x_{10} : 0.99, & \quad x_{11} : 0.99, \\ T_0 : 91.34, & \quad T_1 : 90.02, & \quad T_2 : 88.75, \\ T_3 : 87.52, & \quad T_4 : 86.34, & \quad T_5 : 85.19, \\ T_6 : 84.08, & \quad T_7 : 83.01, & \quad T_8 : 80.97, \\ T_9 : 80.97, & \quad T_{10} : 80.83, & \quad T_{11} : 80.76. \\ H_0 : 100, & \quad R : 10.06, \\ \dot{x}_1 : 0, & \quad \dot{T}_{10} : 0. \end{aligned}$$

Após a execução do código em estudo, deseja-se analisar o comportamento do sistema de EADs com e sem restrição após a redução do sistema. O exemplo em questão foi submetido às três técnicas de integração, cujos resultados podem ser visualizados nas figuras 5 a 8 através das variáveis  $x_0$ ,  $T_0$ ,  $R$ ,  $H_0$ , respectivamente:

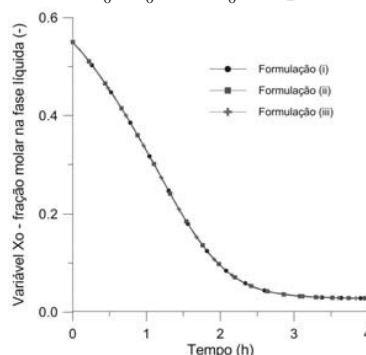


Figura 5 – Variável  $x_0$  – exemplo 2

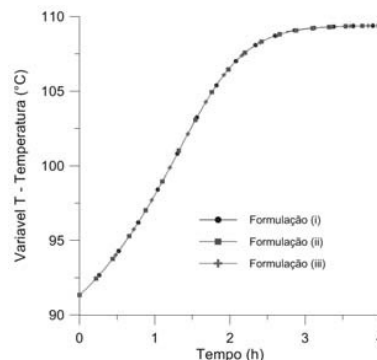


Figura 6 – Temperatura ( $T_0$ ) – exemplo 2

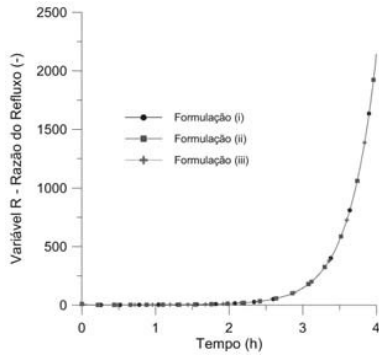


Figura 7 – Razão do refluxo ( $R$ ) – exemplo 2

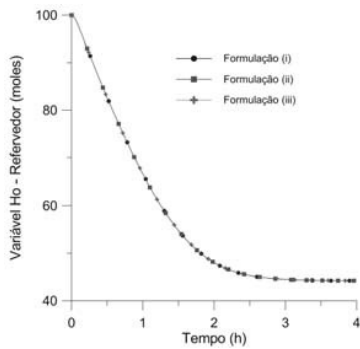


Figura 7 – Refluxo ( $H_0$ ) – exemplo 2

Analisando os resultados obtidos, conforme figuras 5 a 8, conclui-se que o código numérico em estudo apresentou desempenho satisfatório, entretanto, o objetivo em estudo é a eficácia das técnicas de inicialização e integração. Dessa forma, através da análise gráfica, afirma-se que os comportamentos das três técnicas de inicialização e integração são similares, não fornecendo visualmente a melhor técnica de integração. No entanto, a análise do erro ( $\epsilon$ ), figuras 8 e 9, e a integral do erro ( $e$ ), figuras 10 e 11, juntamente com os dados estatísticos do método de integração, tabela 1, fornecem uma melhor análise das técnicas de integração.

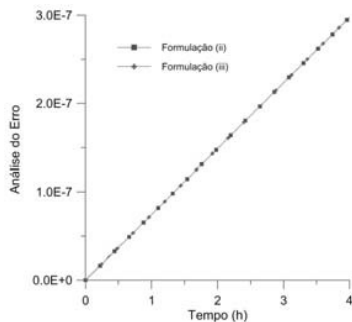


Figura 8 – Análise do erro ( $\epsilon_1$ )

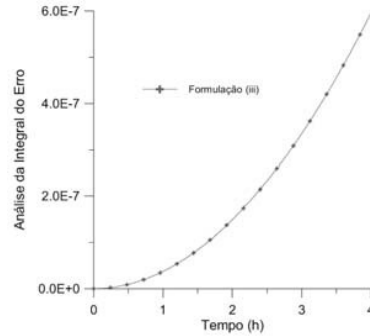


Figura 9 – Análise da integral do erro ( $e_1$ )

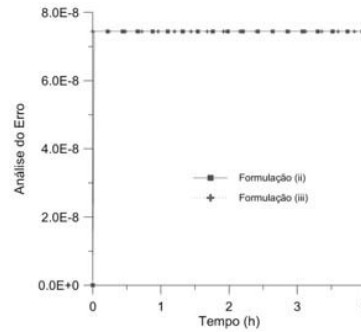


Figura 10 – Análise do erro ( $\epsilon_2$ )

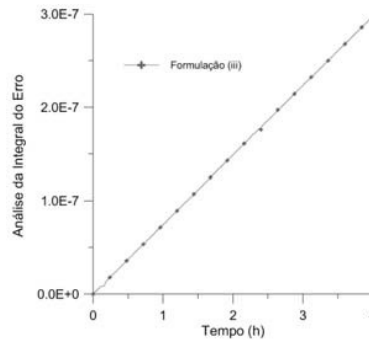


Figura 11 – Análise da integral do erro ( $e_2$ )

Total do número de	Sistema i	Sistema ii	Sistema iii
pontos	344	340	358
avaliações do resíduo	484	445	498
avaliações da matriz jacobiana	51	50	59
iterações de Newton	484	445	498
falhas do teste do erro	15	22	19
falhas do teste da convergência	0	0	0
pontos rejeitados	15	22	19
iterações de Newton-Raphson rejeitadas	89	87	75
Tempo total (segundos)	0,34	0,36	0,39

Tabela 1 – Tabela comparativa dos métodos de integração – exemplo 2

A análise do erro ( $\epsilon$ ) e a integral do erro ( $e$ ) mostraram-se equivalentes para as técnicas ii e iii. A tabela comparativa (tabela 1), apresentou resultados diferentes, porém não suficientes para afirmar que um método seja extremamente



melhor que outro. Entretanto, por motivos já mencionados ao longo desta análise, recomenda-se utilizar o sistema estendido que apresenta a integral da variável de restrição, sendo este um elemento importante para verificar o quanto o método em estudo torna-se confiável. Outro elemento que deve ser levado em consideração, quando o sistema de EADs é composto por um número elevado de equações e variáveis, é o tempo de execução do código numérico. Para o exemplo em estudo, o tempo também manteve-se muito próximo para todas as três técnicas de integração.

Exemplo 3: O modelo discutido a seguir é um problema mecânico clássico (PETZOLD, 1982) com índice diferencial 3. O sistema de EADs consiste em um pêndulo com haste de comprimento fixo e massa desprezível. Essa descrição pode ser ilustrada pela figura 12.

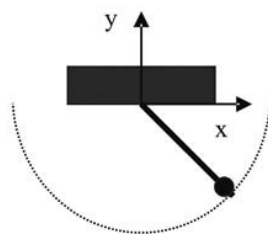


Figura 12 – Pêndulo com haste de comprimento fixo – exemplo 3

As equações (18) a (22) constituem o seu modelo em coordenadas cartesianas:

$$\dot{x} = w \quad (18)$$

$$\dot{y} = z \quad (19)$$

$$\dot{w} = T.x \quad (20)$$

$$\dot{z} = T.y - g \quad (21)$$

$$0 = x^2 + y^2 - L^2 \quad (22)$$

onde:

$x$  e  $y$  são as posições horizontal e vertical do pêndulo;

$\dot{x}$  e  $\dot{y}$  são as componentes da velocidade;

$T$  é a tensão da haste do pêndulo.

O sistema de equações algébrico-diferencial é composto por 5 equações, das quais 4 representam as equações diferenciais (18), (19), (20), (21), e uma representa a equação algébrica (22). As variáveis  $x$ ,  $y$ ,  $z$ ,  $w$ ,  $\dot{x}$ ,  $\dot{y}$ ,  $\dot{z}$  e  $\dot{w}$  representam as variáveis diferenciais e respectivas derivadas, e  $T$  representa a variável algébrica.

Como  $T$  é a única variável algébrica e não aparece na equação algébrica, isso faz com que o sistema apresente índice superior. Portanto, para que o sistema original seja integrado, é necessário reduzir o índice diferencial. Após a aplicação do código DAGRAFO e DASSLC, encontraram-se resultados satisfatórios que podem ser analisados através das figuras 13 a 17.

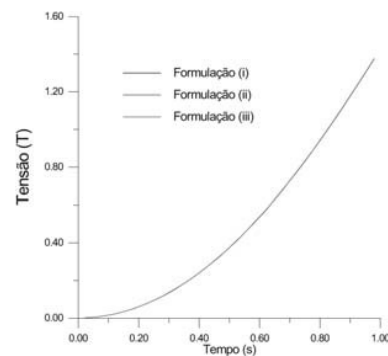


Figura 13 - Tensão ( $T$ ) – exemplo 3

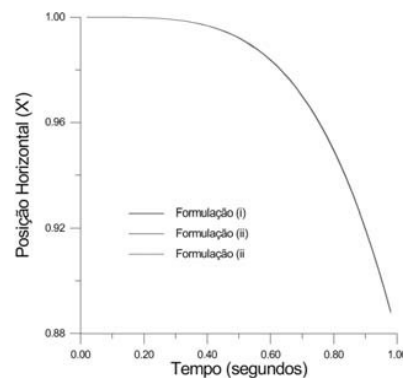


Figura 14 – Variável da posição horizontal ( $x$ ) – exemplo 3

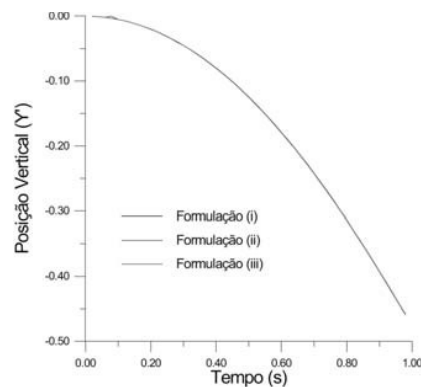


Figura 15 – Variável da posição vertical ( $y$ ) – exemplo 3

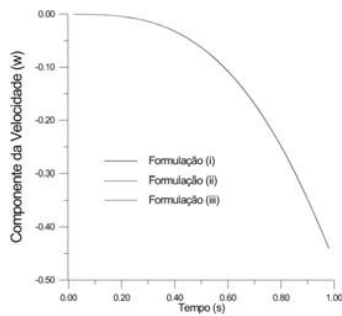


Figura 16 – Componente horizontal da velocidade ( $w$ ) – exemplo 3

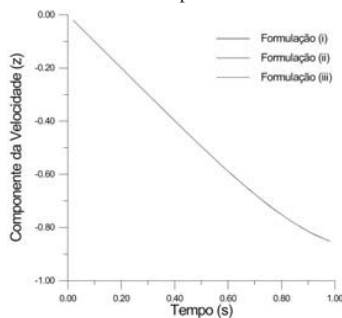


Figura 17 – Componente vertical da velocidade ( $z$ ) – exemplo 3

Analisando os resultados obtidos, conforme figuras 13 a 17, análise do erro ( $\epsilon$ ), através das figuras 18 a 21 e os dados estatísticos, tabela 2, é possível concluir que a terceira técnica de inicialização mostra-se mais eficiente.

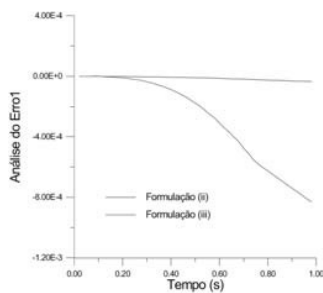


Figura 18 – Análise do erro ( $\epsilon_1$ )

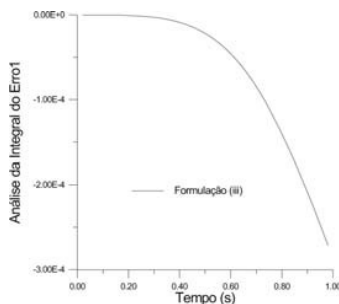


Figura 19 – Análise da integral do erro ( $e_1$ )

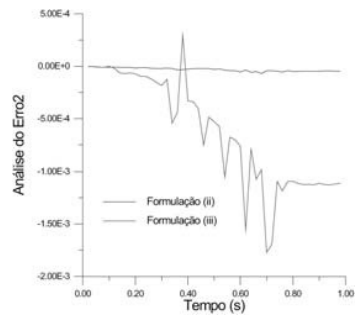


Figura 20 – Análise do erro ( $\epsilon_2$ )

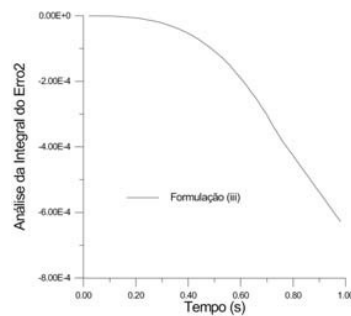


Figura 21 – Análise da integral do erro ( $e_2$ )

Total do número de	Sistema i	Sistema ii	Sistema iii
passos de integração	502	42340	476
avaliações do resíduo	1276	98380	1208
avaliações da matriz jacobiana	304	46301	292
iterações de Newton	1276	98380	1208
falhas do teste do erro	87	20	84
falhas do teste da convergência	0	14862	0
pontos rejeitados	87	14882	84
iterações de Newton-Raphson rejeitadas	195	16219	186
Tempo total (segundos)	0,15	10,60	0,17

Tabela 2 – Tabela comparativa dos métodos de integração – exemplo 3

## Conclusão

A técnica de integração que utiliza o sistema estendido com as integrais das variáveis de restrição é a técnica mais promissora. Esta apresentou melhor desempenho computacional, inclusive quando a matriz jacobiana do sistema apresentou problema de mau condicionamento, além de garantir a presença de todas as variáveis que compõem o sistema original. Este fato não ocorre para a formulação somente com o sistema reduzido, pois, além de “rejeitar” determinadas equações que podem conter variáveis com significado físico importante e/ou representar restrições implícitas no sistema, pode gerar uma solução imprecisa.

Com base na comparação dos resultados numéricos, a técnica de integração do sistema estendido com as integrais das variáveis de restrição apresentou-se mais eficiente que o sistema estendido com as variáveis de restrição. Um dos motivos que permite esta afirmação é o fato de o sistema estendido com as variáveis de restrição apresentar-se bastante falho, quando submetido a sistemas mal condicionados, além de não possibilitar a solução, partindo de condições iniciais inconsistentes.

Outro fato que favorece a técnica do sistema estendido com as integrais das variáveis de restrição é a facilidade de tratar as reinicializações do sistema. Caso o sistema trabalhe com reinicialização ao longo do processo de integração, este necessita sempre de um novo cálculo das condições iniciais consistentes. Este problema é facilmente resolvido pela formulação iii, pois essa atribui na inicialização valor zero às integrais das variáveis de restrição e distribui o erro de inicialização para as variáveis de restrição. Esta facilidade não ocorre para a formulação ii, pois essa não inicializa o sistema se as condições iniciais não forem consistentes. A maior preocupação com este tipo de situação é saber aceitar ou rejeitar o conjunto solução fornecido após o processo de integração numérica, pois o erro de integração, devido às condições iniciais inconsistentes, estará presente no conjunto solução.

## Referências

COSTA Jr., E. F. **Caracterização Estrutural Automática de Sistemas Algébrico-Diferenciais**, proposta de tese de doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 2001.

COSTA Jr., E. F.; SECCHI, A. R.; BISCAIA Jr, E. C., “**Automatic Structural Characterization of DAE Systems**”, In: Proc. ESCAPE 11, Kolding, Denmark, S 109-114, 2000.

LOGSDON, J.S.; BIEGLER, T. **Accurate Determination of Optimal Reflux Polices for the Maximum Distillate Problem in Batch Distillation**, Ind. Eng. Chem. Res., v. 32, n. 4, p.692-700, 1993.

PANTELIDES, C.C. **The Consistent Initialization of Differential-Algebraic Systems**”, SIAM Journal of Sci. Stat. Comput., v. 9 p. 213-232, 1988.

PETZOLD, L. **A description of DASSL: a Differential/Algebraic System Solve**, Proceedings of IMACS Word Congress, Montreal, Canada, 1982.

SECCHI, A. R., **DASSLC User’s Manual Version 1.0**, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, DEQUI, Porto Alegre, RS, Brasil, 1992.