



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM ENGENHARIA
QUÍMICA



Emprego do Método de Adomian Modificado para a Simulação Dinâmica de Modelos

Autor: Matheus dos Santos Costa

Orientador: Prof. Dr. Pedro Rafael Bolognese Fernandes

Porto Alegre, dezembro de 15

Sumário

Sumário	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	vii
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	2
2.1 Método da decomposição de Adomian	2
2.2 Aplicações do Método	2
3 Método da Decomposição Adomiana	6
3.1 Método de decomposição de Adomian	6
3.1.1 Método de decomposição de Adomian Clássico	6
3.1.2 Proposta de modificação da técnica de decomposição	7
3.2 Ferramentas utilizadas	10
3.3 Parâmetros de desempenho	10
3.3.1 Avaliação no estado estacionário e solução simbólica	10
4 Formulação dos Problemas	11
4.1 Reator CSTR	11
4.2 Coluna de destilação	12
4.2.1 Modelo simplificado de coluna de destilação	12
4.2.2 Aproximação da equação de equilíbrio de fases	14
4.2.3 Solução Simbólica	17
5 Resultados	18
5.1 Reator CSTR	18
5.1.1 Efeito do tamanho do passo de integração	18
5.1.2 Efeito do número de termos de Adomian	19
5.2 Coluna de destilação	20
5.2.1 Efeito do tamanho do passo de integração (h)	21
5.2.2 Efeito do número de termos de Adomian	23
5.2.3 Avaliação no estado estacionário	24
5.2.4 Solução simbólica	25
6 Conclusões e Trabalhos Futuros	27
7 Referências	29

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à Deus.

À minha família pela educação e apoio.

Ao meu orientador, Professor Pedro Rafael Bolognese Fernandes, pelo conhecimento transmitido, pela paciência, e pela atenção dedicada ao meu trabalho.

Aos meus amigos, pelos momentos compartilhados durante o período da graduação.

Aos meu padrinhos, Rosalda e Conrado, por toda ajuda desde o começo da faculdade.

À minha avó Oreni e ao meu avô Antonio, pelo amor, apoio, e por sempre acreditar em mim.

Resumo

Neste trabalho foi avaliada a viabilidade do uso da técnica de decomposição Adomiana modificada para simular duas classes de modelos típicos encontrados na Engenharia Química: reator CSTR isotérmico e de coluna de destilação binária. A modificação da técnica de Adomian empregada neste trabalho foi a partição do intervalo de integração em subintervalos, modificação esta proposta por Younker (2011), com o intuito de resolver o problema da divergência polinomial que ocorre na técnica original. A implementação dos estudos de caso foi feita no *software* Maple® 15.00 da Maplesoft®. Para tanto, foram implementados os modelos simplificados de um reator CSTR isotérmico de coluna de destilação. No caso da coluna de destilação, foi empregada uma aproximação da relação de equilíbrio através de série de Taylor e por polinômios de Chebyshev. Para validação dos resultados, comparou-se a solução obtida com a solução dada pelo método numérico de Runge-Kutta. O método proposto obteve resultados promissores, uma vez que foi possível obter a solução analítica para o modelo de reator com um erro mínimo em relação à solução numérica, e uma solução para o modelo de coluna com um erro na ordem de 10^{-4} .

Lista de Figuras

Figura 2.1: Soluções para o sistema de equações (2.3). A concentração y_1 está em vermelho, y_2 está em azul e y_3 está em preto. A solução exata e a solução Adomiana são as linhas sólidas. A solução por Runge-Kutta é a linha tracejada. No gráfico em detalhe o erro. (Fonte: Younker, 2011).....	4
Figura 2.2: Comparação entre a solução de ADM clássico e ADM modificado (Fonte: Chen <i>et al.</i> , 2014).....	5
Figura 3.1: Solução da equação (3.13) pela técnica Adomiana clássica e modificada e por Runge-Kutta.....	9
Figura 4.1: Balanço material para uma destilação binária ideal do estágio de alimentação (A) e para os demais estágios (B)	13
Figura 4.2: Comparação entre a função de equilíbrio e sua aproximação por série de Taylor. As linhas pontilhadas são os valores aproximados e as linhas contínuas são os valores exatos.....	15
Figura 4.3: Polinômios de Chebyshev do tipo 1, $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Fonte: (Gil; Segura; Temme, 2007).....	16
Figura 4.4: Comparação entre a função de equilíbrio e sua aproximação por polinômios de Chebyshev. As linhas pontilhadas são os valores aproximados e as linhas contínuas são os valores exatos.	16
Figura 5.1: Comparação entre solução Adomiana e solução numérica	18
Figura 5.2: Erro percentual médio da solução Adomiana para diferentes passos de integração.....	19
Figura 5.3: Tempo computacional em função do tamanho do intervalo.	19
Figura 5.4: Erro percentual médio da solução Adomiana em relação à solução numérica	20
Figura 5.5: Tempo computacional médio em função do número de termos de Adomian	20
Figura 5.6: Comparação da solução Adomiana com a solução numérica utilizando um intervalo de tamanho $h = 0,025$ minuto. Função de equilíbrio aproximada por série de Taylor.....	21
Figura 5.7: Comparação entre solução Adomiana e solução numérica para um intervalo de tamanho $h = 0,025$ minutos. Função de equilíbrio aproximada por polinômios de Chebyshev.....	21
Figura 5.8: Avaliação do erro percentual médio da solução Adomiana em relação à solução numérica para diferentes passos de integração (h)	22
Figura 5.9: Solução do modelo de coluna de destilação com aproximação da equação de equilíbrio por série de Taylor e tamanho de intervalo $h = 0,2$ minutos	22
Figura 5.10: Solução do modelo de coluna de destilação com aproximação da equação de equilíbrio por polinômios de Chebyshev e tamanho de intervalo $h = 0,2$ minutos.....	23
Figura 5.11: Tempo computacional para diferentes tamanhos de intervalo	23
Figura 5.12: Erro percentual médio em função do número de termos de Adomian.	24
Figura 5.13: Tempo computacional total para determinação da solução do modelo de coluna de destilação utilizando-se dois, três ou quatro termos de Adomian.	24

Figura 5.14: Comparação entre solução Adomiana com 2 termos e solução numérica para o modelo de coluna de destilação..... 25

Figura 5.15: Comparação entre solução Adomiana com 3 termos e solução numérica para o modelo de coluna de destilação..... 25

Figura 5.16: Comparação entre solução Adomiana e solução numérica 26

Lista de Tabelas

Tabela 3.1: Comparação entre solução pelo método de Adomian modificado e solução numérica (Runge-Kutta)	9
--	---

1 Introdução

O competitividade do mercado atual obriga as empresas a buscarem uma eficiência cada vez maior de seus processos. Uma possibilidade para aumento da eficiência destes processos é a simulação matemática, a qual, aliada ao controle e otimização, é uma ferramenta poderosa que minimiza os riscos do processo e aumenta seu rendimento.

Por outro lado, muitos tipos de modelos, como por exemplo, os que descrevem colunas de destilação, são complexos, com alto número de equações fortemente acopladas entre si, e por consequência a resolução destes modelos por métodos recursivos/iterativos necessita de um elevado tempo computacional. Este tempo computacional é indesejado para várias aplicações de controle e otimização em tempo real. Deste modo, a obtenção de uma solução analítica destes modelos proporcionaria uma redução significativa no tempo computacional para resolução do problema, viabilizando o emprego de modelos numa série de técnicas que não são viáveis atualmente. O principal objetivo deste trabalho é testar a técnica de Adomian para a geração das soluções de modelos dinâmicos típicos da Engenharia Química.

A técnica de Adomian é uma técnica de resolução de equações e sistemas de equações de diversos tipo (integral, diferencial, algébrica...). O princípio da técnica está em decompor cada equação em uma parte linear, uma parte não linear e mais o termo não homogêneo. A partir desta decomposição, a solução é obtida com base em um somatório de termos, os chamados termos de Adomian. Além disso, um ponto fundamental da técnica é a representação da parte não linear da equação por um somatório de polinômios conhecidos como polinômios de Adomian.

Neste trabalho, é verificada a eficiência da técnica em termos do tempo computacional necessário para resolver os sistemas de equação que descrevem os modelos. Também é verificada a possibilidade de geração das soluções de forma analítica, mesmo que aproximada, o que possibilitaria a aplicação do método, por exemplo, para controle ótimo.

A estrutura do trabalho é dada da seguinte forma: no segundo capítulo é apresentada uma revisão bibliográfica sobre a técnica de decomposição de Adomian, mostrando os trabalhos desenvolvidos na literatura e as aplicações deste método. No capítulo 3 apresenta-se a técnica de Adomian em maiores detalhes, e a modificação proposta neste trabalho. Além disso, são apresentados os parâmetros de desempenho utilizados e o *software* onde o problema foi implementado. No capítulo 4 são descritos os modelos do reator CSTR e da coluna de destilação, detalhando as considerações e simplificações feitas. Ainda neste capítulo faz-se um estudo sobre a aproximação da equação de equilíbrio de fases por série de Taylor e por polinômios de Chebyshev (os quais são sucintamente apresentados). No capítulo 5 são apresentados os resultados e as discussões sobre eles. Finalmente, o capítulo 6 traz as conclusões sobre os resultados obtidos e sugestões para trabalhos futuros.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Método da decomposição de Adomian

O método de decomposição de Adomian (ADM) foi introduzido na década de 1980 pelo americano George Adomian. A técnica é baseada na decomposição de uma dada equação em uma parte linear, uma parte não linear e mais o termo não homogêneo. Adomian (1988) demonstra que através do ADM é possível resolver problemas de equações diferenciais lineares e não-lineares, obtendo soluções contínuas e semi-analíticas. O fato de o método resolver problemas de equações diferenciais lineares e não lineares sem a necessidade de qualquer linearização, faz de sua solução uma solução mais realista quando comparada à solução de métodos que simplificam o problema. Apesar de o método da decomposição de Adomian ser simples, a sua dificuldade consiste no cálculo dos polinômios que constituem a aproximação da solução e na prova da sua convergência.

A primeira prova de convergência foi dada por Cherruault (1989). Neste trabalho, mostrou-se que, utilizando teoremas de ponto fixo e algumas suposições razoáveis, o ADM converge com uma taxa que torna o método suficientemente prático para aplicações. Desde então, diversos artigos foram publicados tratando sobre a convergência do ADM para diferentes tipos de equações e sistemas, incluindo o trabalho de Cherruault e Abbaoui (1994), que deu condições suficientes para provar a convergência do método para equações não lineares de diferentes tipos.

Mais recentemente, a convergência do método de Adomian também foi estudada especificamente para problemas de valor inicial. Em Abdelrazec *et al.* (2011) comprova-se a convergência de ADM para problemas de valor inicial utilizando-se o método das majorantes do teorema de Cauchy-Kowalevskaya para equações diferenciais com campos de vetores analíticos. Para exemplificar, utilizou-se a equação não linear de Schrodinger.

Atualmente, o ADM vem sendo utilizado por muitos autores, em diversas áreas, para resolver problemas de equações diferenciais nos problemas de valor inicial ou de condições de contorno. Além disso, muitos artigos têm sido publicados onde o ADM é utilizado para resolver sistemas de equações diferenciais lineares e não lineares.

2.2 Aplicações do Método

Wazwaz (1999) propõe um método de decomposição de Adomian modificado. A grande diferença entre o método clássico e o proposto está na definição dos primeiros termos da série do método de Adomian. Neste trabalho, a parte não homogênea da equação (2.1) é dividida em duas (conforme a equação (2.2)), modificação esta que aumentou a velocidade de convergência e a eficiência computacional. O único problema desta modificação é que ela requer certa prática e sensibilidade na maneira como é dividida a parte não homogênea $f(x)$.

$$u=f(x)-L^{-1}(Ru)-L^{-1}(Nu) \quad (2.1)$$

$$f(x)=f_1(x)+f_2(x) \quad (2.2)$$

onde u representa a variável dependente, $f(x)$ representa o termo não homogêneo da equação, L^{-1} representa a integral no tempo, Ru representa a parte linear da equação e Nu representa a parte não linear da equação. Na equação 2.2, $f_1(x)$ e $f_2(x)$ são as duas partes provenientes da divisão de $f(x)$.

Com base em Wazwaz (1999), pôde-se avançar para uma nova modificação do ADM. Nesta nova técnica, não existe o problema da escolha apropriada da maneira como dividir a parte não homogênea da equação, uma vez que isto é feito através da expansão em série de Taylor. (WAZWAZ *et al.*, 2001)

Em Wazwaz (2000) desenvolveu-se uma técnica confiável para calcular os polinômios de Adomian para a parte não linear de uma equação. A técnica, além de ser simples, mostrou-se promissora para o cálculo dos polinômios de Adomian para diversas formas de não linearidade.

Em Choi (2003) foi feita uma implementação simbólica on *software* Mathematica da modificação proposta por Wazwaz (2000). No trabalho, verificou-se que a solução dada pelo método proposto fica tão mais próxima da solução exata do problema quanto maior for o número de termos da série de Adomian.

Mais tarde, em Fatoorehchi *et al.* (2011), pôde-se reduzir consideravelmente o tamanho do código computacional. Utilizando-se de algumas funções já inclusas no MATLAB, pode-se criar um código mais simples e eficiente para calcular os polinômios de Adomian para diferentes tipos de linearidade do que quando comparado com a implementação de Choi (2003).

Babolian *et al.* (2004) propõe uma modificação numa etapa chave do ADM: o cálculo dos polinômios de Adomian. Ao invés de calcular os polinômios através do método clássico, utiliza-se um operador semelhante ao operador diferencial, tornando o cálculo dos polinômios rápido e simples. Porém, a modificação proposta só pode ser aplicada para problemas com somente uma equação, fato que foi resolvido no trabalho de Gu; Li (2007), que estendeu a modificação para sistemas de equações diferenciais não lineares.

Baseando-se no fato de que uma equação diferencial ordinária de ordem $n > 1$ pode ser escrita como um sistema de n equações diferenciais de ordem 1, ADM pode ser utilizado para resolver sistemas de equações diferenciais não lineares e também para encontrar a solução de uma equação diferencial de ordem mais elevada. (BIAZAR *et al.*, 2004)

Em Younker (2011) utiliza-se ADM modificado para a resolução de um sistema de equações diferenciais acopladas que descrevem taxas de reação química. O desempenho da técnica é comparado com o método clássico de Runge Kutta. No trabalho, são propostas quatro modificações:

- a separação das variáveis do problema e o uso de um propagador. O propagador é definido por dois parâmetros: ' h ' e ' t_q '. O primeiro descreve o intervalo de tempo entre os valores que são amostrados. O segundo serve para discretizar o tempo, de modo que quando o valor do tempo for igual a ' t_q ', o valor da solução será utilizado como valor inicial do novo intervalo de tempo.

- a segunda modificação é uma espécie de “nivelamento da ordem da derivada”. Para uma equação cuja dependência em relação a variável independente é quadrática, por exemplo, sua derivada de terceira ordem será zero, o que reduz o número de termos no polinômio.
- a terceira modificação é um eixo discreto dinâmico. Ao invés de alterar o parâmetro ‘h’, o que muda é a distância (‘t_q’) na qual o propagador é válido.
- a última modificação é assumir que qualquer derivada que é zero em t = 0, seja zero para qualquer aproximação local.

A solução Adomiana foi comparada com a solução analítica e com a solução numérica dada por Runge-Kutta com uma tolerância de 10^{-8} . A solução para um dos sistemas de equações utilizado no trabalho está ilustrado na Figura 2.1.

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} = \frac{dy_2}{dt} &= -k_1[y_1][y_2] \\ \frac{dy_3}{dt} &= k_1[y_1][y_2] \end{aligned} \quad (2.3)$$

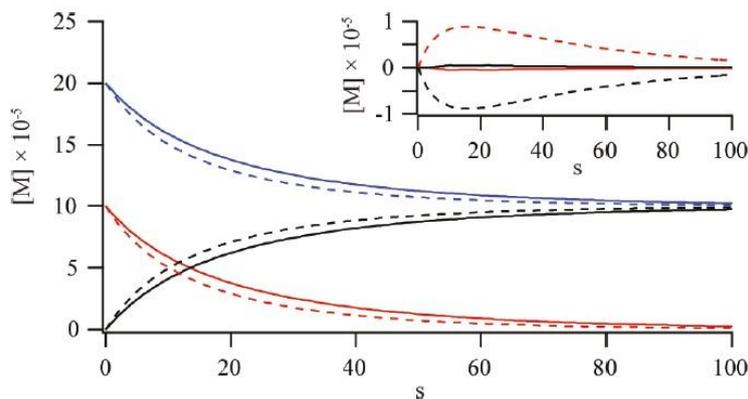


Figura 2.1: Soluções para o sistema de equações (2.3). A concentração y_1 está em vermelho, y_2 está em azul e y_3 está em preto. A solução exata e a solução Adomiana são as linhas sólidas. A solução por Runge-Kutta é a linha tracejada. No gráfico em detalhe o erro. (Fonte: Younker, 2011).

Com essas quatro modificações, o método obteve um desempenho superior do que as técnicas de Runge Kutta. Apesar disso, o ADM é um método explícito e por isso é mal adaptado para equações rígidas.

Recentemente, a técnica de decomposição de Adomian foi utilizada também para resolver o Problema de Stefan. Neste caso, o Problema de Stefan modela o fenômeno da mudança de estado físico com um calor latente fixo e também com um calor latente variável. Foi demonstrado que o ADM é capaz de lidar com estes dois casos de problema de Stefan (calor latente fixo e calor latente variável). Huang *et al.*, (2015)

Em Kaya; Yokus (2002) foi empregado ADM para resolver a equação do calor e a equação não linear de Burgers, com condições iniciais apropriadas. Demonstrou-se que a aplicação de ADM com a solução parcial em relação à x tem um custo computacional maior do que quando a solução é dada em relação à t , porém a solução numérica em relação à x é bem resolvida em termos de precisão e eficiência.

A equação de Burgers também foi objeto de estudo de outros autores. Em Abbasbandy *et al.* (2005), utilizou-se ADM modificado para resolver a equação de Burgers. A modificação consistiu na discretização do tempo. A técnica demonstrou ser eficiente, visto que o erro em relação à solução exata foi da ordem de 10^{-7} .

Em Chen *et al.* (2014) utilizou-se uma modificação da ADM assintótica para resolver a equação de Boussinesq, que neste caso descreve a dinâmica de fluxos de águas subterrâneas. Foi constatado que usando apenas dois termos da série de ADM pode-se calcular com uma razoável aproximação a solução. Mostrou-se que a solução dada pela técnica modificada é muito mais próxima da solução exata do que a solução pelo ADM clássico, conforme a Figura 2.2. Além disso, a medida que o tempo cresce, a solução dada pelo método modificado se aproxima da solução exata, enquanto que a solução dada por ADM clássico diverge continuamente.

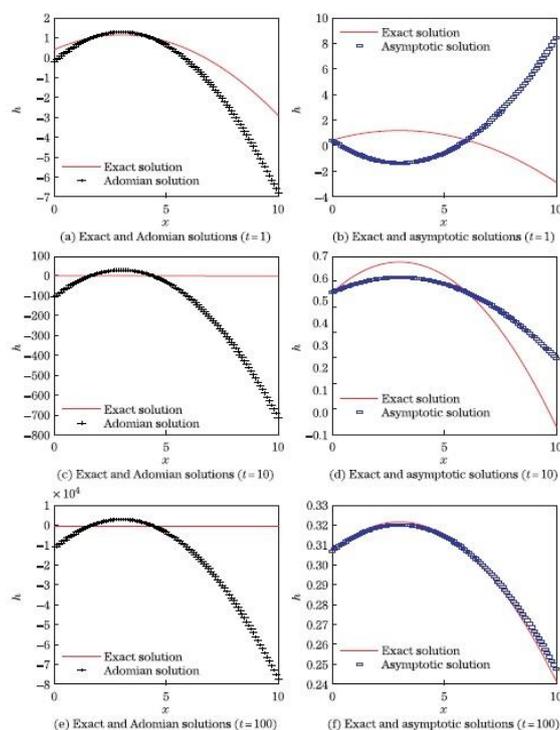


Figura 2.2: Comparação entre a solução de ADM clássico e ADM modificado (Fonte: Chen *et al.*, 2014)

Em Qin *et al.* (2011) utilizou-se ADM para resolver um modelo de reator tubular de leito fixo. Este modelo é descrito por um conjunto de equações diferenciais parciais de segunda ordem fortemente não lineares e com condições de fronteira incompatíveis. O ADM mostrou-se capaz de aproximar o valor da concentração do reagente e também de aproximar o valor da temperatura no reator.

3 Método da Decomposição Adomiana

Neste capítulo, é feito um detalhamento do método de decomposição de Adomian clássico, bem como a modificação proposta. São também descritos os critérios de comparação adotados para análise de desempenho da técnica modificada e de como foi feita a validação da solução obtida.

3.1 Método de decomposição de Adomian

3.1.1 Método de decomposição de Adomian Clássico

Considerando o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_1 \\ y_2' &= f_2(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_2 \\ &\vdots \\ y_m' &= f_m(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_m \end{aligned} \quad (3.1)$$

que, por conveniência, pode ser representado como a seguinte equação genérica:

$$y_i' = f_i(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_i, \quad i=1, 2, \dots, m. \quad (3.2)$$

onde f_i representa um conjunto de funções lineares e não lineares em y_1, y_2, \dots, y_m , que são as variáveis dependentes, g_i representa o termo não homogêneo da equação e y_i' representa a derivada de primeira ordem da variável y_i .

O método da decomposição consiste em separar cada função f_i em uma parte linear e uma parte não linear, podendo então a equação (3.2) ser escrita da seguinte forma:

$$Ly_i = g_i + R_i(y_1, y_2, \dots, y_m) + N_i(y_1, y_2, \dots, y_m) \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.3)$$

onde L é um operador linear, neste caso a derivada temporal d/dt , g_i representa a parte não homogênea, $R_i(y_1, y_2, \dots, y_m)$ é a parte linear da equação e $N_i(y_1, y_2, \dots, y_m)$ representa a parte não linear.

Aplicando nos dois lados da equação (3.3) o operador inverso de L , que neste caso é $L^{-1} = \int_0^t [] dt$, chega-se à seguinte equação:

$$y_i = y_i(0) + L^{-1}(R_i(y_1, y_2, \dots, y_m) + N_i(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_i) \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.4)$$

onde $y_i(0)$ representa o valor de y_i em $t=0$.

O princípio da técnica de decomposição está em aproximar a solução da equação (3.4) por um somatório infinito de termos, conforme a equação abaixo, que são as aproximações da solução do problema:

$$y_i = \sum_{n=0}^{\infty} y_{i,n} \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.5)$$

Na prática, não há como calcular todos os termos da equação (3.5), por isso utiliza-se uma aproximação da solução por uma série truncada.

A parte não linear da equação, $N_i(y_1, y_2, \dots, y_m)$, é aproximada por um somatório de polinômios, os chamados Polinômios de Adomian.

$$N_i(y_1, y_2, \dots, y_m) = \sum_{n=0}^{\infty} A_{i,n} \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.6)$$

onde $A_{i,n}$ são polinômios em função da variável dependente (y_1, y_2, \dots, y_m) .

Os polinômios de Adomian são calculados de acordo com a expressão a seguir:

$$A_i(y_1, y_2, \dots, y_m) = \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n}{d\lambda^n} N(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i y_i) \right]_{\lambda=0} \quad (3.7)$$

onde λ é um parâmetro introduzido por conveniência.

Fazendo a substituição das equações (3.5) e (3.6) na equação (3.4), chega-se à seguinte equação:

$$y_i = \sum_{n=0}^{\infty} y_{i,n} = y_i(0) + L^{-1}(\sum_{n=0}^{\infty} (A_{i,n}) + R_i + g_i) \quad (3.8)$$

O primeiro termo da série pode ser determinado pela equação abaixo:

$$y_{i,0} = y_i(0) + L^{-1}g_i \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.9)$$

Os demais termos são calculados pela seguinte fórmula de recorrência:

$$y_{i,n+1} = L^{-1}(A_{i,n} + R_i) \quad i=1, 2, \dots, m \quad n=0, 1, 2, \dots, N \quad (3.10)$$

onde N é o número de termos menos um de Adomian utilizados. Com isto, é possível se obter sucessivamente os termos $y_{i,n+1}$ da aproximação da solução.

3.1.2 Proposta de modificação da técnica de decomposição

Funções polinomiais possuem o problema de divergir rapidamente à medida que a variável independente (no caso, tempo) cresce. Para resolver este problema, este trabalho empregou a técnica de discretizar o eixo do tempo, de modo que o valor inicial de cada intervalo é dado pela solução final do intervalo anterior, abordagem esta que também foi utilizada em Younker (2011).

Sendo assim, a solução dada pela equação (3.8) é válida dentro de um intervalo de tempo, conforme abaixo:

$$y_i = \sum_{n=0}^{\infty} y_{i,n} = y_i(t_{i-1}) + L^{-1}(\sum_{n=0}^{\infty} (A_{i,n}) + R_i + g_i) \text{ para } t = t_{\text{inicial}} \dots t_{\text{final}} \quad (3.11)$$

$$t_{\text{final}} = t_{\text{inicial}} + h \quad (3.12)$$

onde h é um parâmetro que determina o tamanho de cada intervalo. O valor de $y_i(0)$ do intervalo seguinte é igual ao valor de $\sum_{n=0}^{\infty} y_{i,n}$ avaliado em t_{final} .

O exemplo a seguir é utilizado para compreender melhor esta modificação.

Exemplo: a equação diferencial utilizada como exemplo é dada por:

$$\frac{dy}{dt} = -y(t)^2 \quad (3.13)$$

onde $y(t)$ representa uma variável dependente arbitrária e t representa a variável tempo. A condição inicial considerada é:

$$y(0)=1 \quad (3.14)$$

Para a equação (3.13), a parte linear (R_i) e a parte não homogênea (g_i) consideradas pela técnica de Adomian são iguais a zero. Os polinômios de Adomian, que compõem a parte não linear da equação, são dados pela equação abaixo:

$$A_n = \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n}{d\lambda^n} \left(-(\sum_{i=0}^N \lambda^i y_i)^2 \right) \right]_{\lambda=0} \quad (3.15)$$

onde N representa o número de termos menos um de Adomian utilizados para aproximar a função.

O primeiro passo para resolver a equação (3.13) utilizando a técnica de Adomian é obter o primeiro termo da aproximação:

$$y_0 = y(0) \quad (3.16)$$

onde $y_0(t)$ é o primeiro termo da expansão da solução $y(t)$. Em seguida, o primeiro polinômio de Adomian ($n = 0$) é calculado utilizando-se a equação (3.15):

$$A_0 = \frac{1}{0!} \left[\frac{d^0}{d\lambda^0} \left(-(\sum_{i=0}^0 \lambda^i y_i)^2 \right) \right]_{\lambda=0} = -y_0^2 \quad (3.17)$$

Com este resultado, calcula-se então o segundo termo da aproximação (y_1):

$$y_1 = L^{-1}(A_0) = -y_0^2 t \quad (3.18)$$

Utilizando-se o y_1 determinado acima, o segundo polinômio de Adomian é calculado:

$$A_1 = \frac{1}{1!} \left[\frac{d^1}{d\lambda^1} \left(-(\sum_{i=0}^1 \lambda^i y_i)^2 \right) \right]_{\lambda=0} = \frac{d^1}{d\lambda^1} \left(-(\lambda^0 y_0 + \lambda^1 y_1)^2 \right) = 2y_0^3 t \quad (3.19)$$

Este procedimento é feito até que seja calculado o número de termos de Adomian desejado para aproximar a solução. Neste exemplo, foram utilizados 6 termos, e a aproximação foi calculada com base na equação (3.8), gerando a seguinte equação:

$$y = y_0 + y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 = y(0) - y(0)^2 t + y(0)^3 t^2 - y(0)^4 t^3 + y(0)^5 t^4 - y(0)^6 t^5 \quad (3.20)$$

Substituindo o valor de $y(0)$:

$$y = 1 - t + t^2 - t^3 + t^4 - t^5 \quad (3.21)$$

A método clássico termina na equação (3.21). Utilizando a modificação proposta por Younker (2011), o intervalo de integração é dividido em subintervalos. Deste modo, a solução da equação (3.13) também é dada para cada subintervalo, de modo que o valor inicial de cada subintervalo é dado pelo valor da solução do intervalo anterior no tempo final daquele intervalo. Dividindo o intervalo de 0 a 2 segundos em 20 subintervalos por exemplo, a solução do primeiro intervalo é dada pela equação (3.21), e ela só é válida dentro de subintervalo de tempo de 0 até 0,10 segundos.

O valor inicial do intervalo seguinte, é dado pelo valor da equação (3.21) em $t=0,10$ segundos, conforme abaixo:

$$y=1-0,1+ 0,1^2- 0,1^3+0,1^4-0,1^5=0,90909 \quad (3.22)$$

O valor obtido na equação (3.22) é utilizado para calcular os termos e os polinômios de Adomian para o subintervalo de integração seguinte, da mesma forma como foi feito para o primeiro subintervalo.

A Figura 3.1 mostra que o método clássico de Adomian apresenta um inconveniente ao resolver o PVI representando pelas equações (3.13) e (3.14), pois se observa que o aumento do número de termos de Adomian apenas possibilita um retardo da divergência da solução, exigindo um número muito elevado de termos para uma solução aceitável. Já a técnica modificada, proposta por Younker (2011) e utilizada também neste trabalho, não só resolveu a equação (3.13) com apenas 4 termos de Adomian e com um tamanho de intervalo de $h = 0,1$, como também teve uma elevada precisão quando comparada com a solução numérica, como pode ser observado na Tabela 3.1.

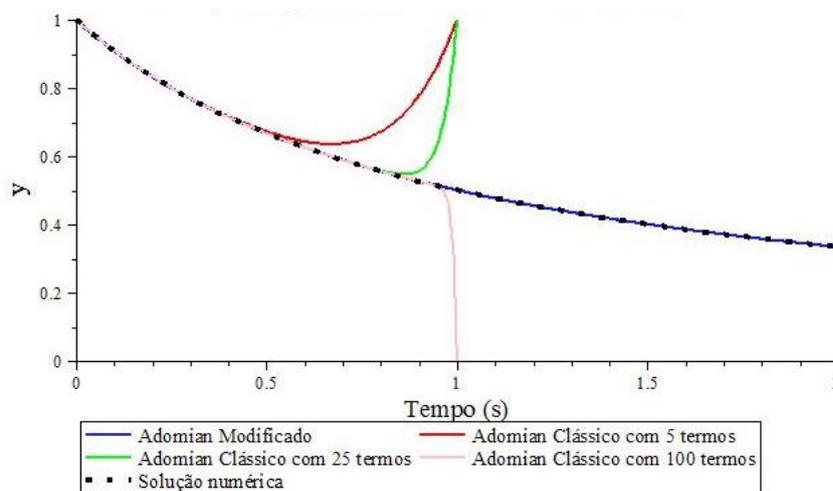


Figura 3.1: Solução da equação (3.13) pela técnica Adomiana clássica e modificada e por Runge-Kutta

O erro entre a solução Adomiana e a solução numérica é calculado pela seguinte equação:

$$\text{Erro(\%)} = \left| \frac{y_{\text{Adomian}} - y_{\text{numérico}}}{y_{\text{numérico}}} \right| \cdot 100 \quad (3.23)$$

Tabela 3.1: Comparação entre solução pelo método de Adomian modificado e solução numérica (Runge-Kutta)

Tempo (segundos)	Adomian	Runge-Kutta	Erro (%)
0,0	1,0000	1,0000	0,0000
1,0	0,5000	0,5000	0,0000
2,0	0,3333	0,3333	0,0000
3,0	0,2499	0,2499	0,0000
4,0	0,2000	0,2000	0,0000
5,0	0,1666	0,1666	0,0000
6,0	0,1429	0,1429	0,0000
7,0	0,1250	0,1250	0,0000
8,0	0,1111	0,1111	0,0000
9,0	0,1000	0,1000	0,0000
10,0	0,0909	0,0909	0,0000

3.2 Ferramentas utilizadas

Este trabalho foi implementado no *software* Maple® 15.00 da Maplesoft®. O Maple® é um ambiente computacional que permite a resolução de problemas numéricos e simbólicos, permitindo também a obtenção de gráficos. Além disso, o *software* contém diversas funções pré-definidas, o que facilita a programação e a implementação.

Para validar as soluções obtidas neste trabalho, utilizou-se a função *dsolve*, que é uma função pré-definida do Maple® e que utiliza métodos numéricos, no caso deste trabalho o método de Runge-Kutta Fehlberg com uma tolerância de 1.10^{-15} , para resolver equações diferenciais ou sistemas de equações diferenciais. A função poder ser utilizada tanto para a resolução de problemas de valor inicial quanto para problemas do valor de fronteira.

3.3 Parâmetros de desempenho

No presente trabalho, o desempenho da técnica modificada em termos de precisão e tempo computacional para a resolução do problema foi avaliado em função de dois parâmetros: o tamanho do intervalo (passo de integração) e o número de termos da aproximação de Adomian.

O tamanho do intervalo (passo) é um parâmetro importante, pois está diretamente relacionado com o tempo computacional, de modo que se espera que quanto menor o tamanho do intervalo, maior é o tempo computacional. Portanto, busca-se encontrar um tamanho de intervalo tal que o tempo computacional seja relativamente baixo e que, ao mesmo tempo, a solução apresente um erro pequeno em relação à solução numérica.

O número de termos de Adomian também está relacionado com o tempo computacional, já que se espera que quanto maior o número de termos de Adomian utilizados para aproximar a solução do problema, maior é o tempo de cálculo dos polinômios de Adomian.

3.3.1 Avaliação no estado estacionário e solução simbólica

Funções polinomiais geralmente apresentam um comportamento divergente em problemas que têm características de estado estacionário. Por isso, também foi feita uma avaliação específica do desempenho da técnica proposta neste trabalho no estado estacionário do reator e da coluna de destilação.

4 Formulação dos Problemas

Neste capítulo, são formulados e detalhados os problemas que este trabalho se propõe a resolver.

4.1 Reator CSTR

A técnica foi testada em um sistema de equações diferenciais que descrevem um reator químico com o seguinte esquema reacional:



O principal objetivo desta parte do estudo é testar a modificação da técnica para um sistema de equações diferenciais e verificar se o resultado é satisfatório. Além disso, embora modelos de reatores CSTR sejam em geral mais simples do que modelos de colunas de destilação são também casos importantes para aplicações de controle e estimação de parâmetros da técnica de decomposição de Adomian, por exemplo, e que poderia ser beneficiados pela aplicação da mesma.

Para a obtenção do modelo fenomenológico do reator, foram feitas as seguintes considerações:

- CSTR bem agitado: neste caso a concentração dos reagentes é uniforme ao longo do reator
- processo isotérmico
- Sob estas condições, um modelo representativo deste sistema é dado pelo seguinte conjunto de equações

$$\frac{dCa}{dt} = f \cdot Ca_e - f \cdot Ca - k_1 Ca^2 \quad (4.2)$$

$$\frac{dCb}{dt} = f \cdot Cb_e - f \cdot Cb + \frac{1}{2} k_1 Ca^2 \quad (4.3)$$

onde Ca e Cb são as concentrações molares dos reagentes, f é a constante de diluição em hora⁻¹ e k_1 é constante cinética em L/mol.hora.

Nas equações (4.2) e (4.3), os termos $f \cdot Ca_e$ e $f \cdot Cb_e$ podem ser identificados como a parte não homogênea (g_a e g_b), os termos $-f \cdot Ca$ e $-f \cdot Cb$ à parte linear R_1 e os termos $-k_1 Ca^2$ e $\frac{1}{2} k_1 Ca^2$ como a parte não linear do problema. Portanto, a aproximação das equações (4.2) e (4.3) através da técnica de Adomian modificada fica da seguinte forma:

$$Ca_0 = Ca(0) + L^{-1} g_a \quad (4.4)$$

$$Cb_0 = Cb(0) + L^{-1} g_b \quad (4.5)$$

$$Ca_{n+1} = L^{-1} (A_{a,n} + R_a) \quad n=0, 1, 2, \dots, N \quad (4.6)$$

$$Cb_{n+1} = L^{-1} (A_{b,n} + R_b) \quad n=0, 1, 2, \dots, N \quad (4.7)$$

A condição inicial do problema é dada a seguir:

$$Ca_0 = 1,0 \text{ mol/L} \quad (4.8)$$

$$Cb_0 = 1,0 \text{ mol/L} \quad (4.9)$$

Os parâmetros do reator utilizados estão dados abaixo:

$$f = 1,0 \quad (4.10)$$

$$Ca_e = 2,0 \text{ mol/L} \quad (4.11)$$

$$Cb_e = 2,0 \text{ mol/L} \quad (4.12)$$

$$k_1 = 0,01 \frac{L}{\text{mol.hora}} \quad (4.13)$$

4.2 Coluna de destilação

4.2.1 Modelo simplificado de coluna de destilação

A técnica proposta foi utilizada para resolver um sistema de equações diferenciais que representa uma coluna de destilação. Para simplificar a implementação e a simulação, foram feitas as seguintes considerações com relação ao modelo da coluna:

- destilação binária: considera-se que a mistura a ser destilada contém somente dois componentes
- fluxos equimolares: para qualquer estágio, com excessão do estágio de alimentação, considera-se que a vazão de vapor de um estágio de equilíbrio é igual a vazão de vapor do estágio de equilíbrio abaixo. Matematicamente, isso se representa na seguinte equação:

$$V_i = V_{i+1} = V = 1,0 \text{ mol/min} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.14)$$

onde V_i representa a vazão de vapor de cada estágio de equilíbrio i e N é o número de estágios.

a mesma consideração é feita para as vazões de líquido de cada estágio, conforme abaixo:

$$L_i = L_{i-1} = L = 1,0 \text{ mol/min} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.15)$$

onde L_i representa a vazão de líquido no estágio i .

- mistura ideal: neste caso, a relação do equilíbrio entre as fases líquida e gasosa é função da volatilidade relativa, assumida constante, conforme a equação dada abaixo.

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (4.16)$$

onde y_i representa a fração do componente mais volátil no vapor, α é a volatilidade relativa e x_i é a fração do componente mais volátil presente no líquido

- *holdup's* molares são assumidos como constantes;

- condensador e refeedor em equilíbrio;
- controle perfeito do inventário do condensador e do refeedor;
- coluna de 5 estágios de equilíbrio;

Com base nas considerações feitas acima, pode-se fazer o balanço material para cada estágio da coluna, conforme a figura a seguir.

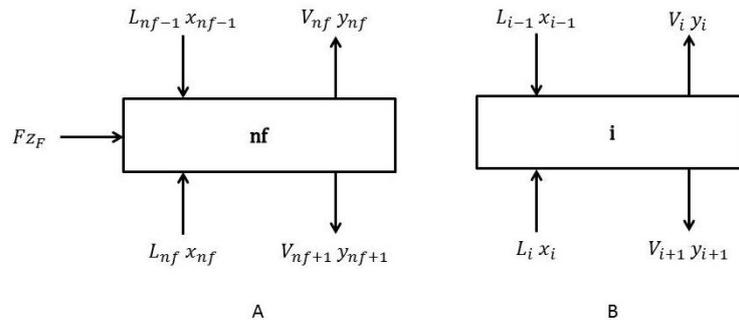


Figura 4.1: Balanço material para uma destilação binária ideal do estágio de alimentação (A) e para os demais estágios (B)

Considerando os estágios contados do topo da coluna em direção ao fundo, para a seção de enriquecimento (topo da coluna, acima do estágio de alimentação), o balanço material por componente pode ser escrito da seguinte forma:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{m_t} \cdot \left(L \cdot (x_{i-1} - x_i) - V \cdot \left(\frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} - \frac{\alpha x_{i+1}}{1 + (\alpha - 1)x_{i+1}} \right) \right) \quad i=2, \dots, NF-1 \quad (4.17)$$

onde NF representa o estágio de alimentação e m_t é o *holdup* molar dos estágios.

Neste trabalho, foi utilizado $m_t = 2$ mols e o estágio de alimentação é o terceiro (NF=3).

Para o estágio de alimentação, o balanço material é dado pela equação abaixo:

$$\frac{dx_{NF}}{dt} = \frac{1}{m_t} \cdot \left((F \cdot z) + L \cdot x_{NF-1} - (L + F) \cdot x_{NF} - V \cdot \left(\frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_{NF}} - \frac{\alpha x_{NF+1}}{1 + (\alpha - 1)x_{NF+1}} \right) \right) \quad (4.18)$$

onde F representa a vazão de alimentação e z é a fração molar do componente mais volátil na corrente de alimentação. A vazão de entrada utilizada foi de 5,0 mol/min e $z=0,60$.

O balanço por componente do condensador fica:

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{V}{m_{\text{cond}}} \cdot \left(\frac{\alpha x_2}{1 + (\alpha - 1)x_2} - x_1 \right) \quad (4.19)$$

onde m_{cond} representa o *holdup* molar para o estágio 1, cujo valor utilizado neste trabalho foi de 1,0 mol.

E o balanço material para o refeedor fica:

$$\frac{dx_5}{dt} = \frac{1}{m_{ref}} \cdot \left((L+F) \cdot x_4 - (L+F-V) \cdot x_5 - V \cdot \frac{\alpha x_5}{1+(\alpha-1)x_5} \right) \quad (4.20)$$

onde m_{ref} é o *holdup* molar para o estágio 5. O valor adotado para m_{ref} foi de 1,0 mol.

As condições iniciais da coluna de destilação são dadas por:

$$x_i(0) = 0,30 \quad (4.21)$$

4.2.2 Aproximação da equação de equilíbrio de fases

Para encontrar a solução do modelo de coluna de destilação descrito acima através da técnica de Adomian modificada, é necessário realizar uma aproximação da equação (4.16). A modificação se faz necessária, pois esta equação possui a variável x_i no denominador, o que, na etapa de integração da técnica (equação (3.8)), gera termos logarítmicos os quais devem ser sucessivamente integrados. No entanto, não foi possível se obter os resultados analíticos para estes termos no *software* Maple®, o que não é desejado para se obter uma solução genérica da coluna. Deste modo, foram empregadas técnicas para aproximar a função de equilíbrio, equação (4.16). Neste caso, aproximações do tipo polinomial são as mais indicadas, por permitirem a integração simbólica dos termos, além de permitirem aproximações com precisão arbitrária das funções sendo integradas.

Foram comparados dois métodos para a aproximação da equação (4.16): expansão em série de Taylor e Chebyshev. Primeiramente, a função é aproximada por uma série de Taylor truncada em 5 termos. Tal aproximação irá gerar uma função polinomial que irá substituir a equação (4.16). A aproximação da equação (4.16) por série de Taylor para diferentes volatilidades relativas pode ser observada na Figura 4.2. As expansões em todos os casos são feitas em torno do ponto $x_0 = 0,5$ com 5 termos, ou seja, o erro é da ordem de x_1^6 .

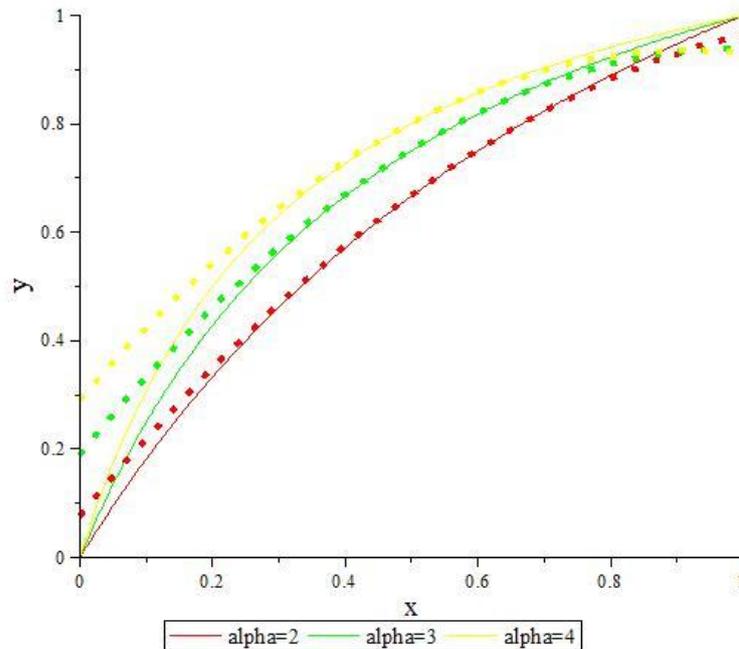


Figura 4.2: Comparação entre a função de equilíbrio e sua aproximação por série de Taylor. As linhas pontilhadas são os valores aproximados e as linhas contínuas são os valores exatos.

Analisando-se a Figura 4.2 é possível afirmar que quanto maior o valor de α maior é o erro da aproximação da equação (4.16) por série de Taylor com 5 termos.

Em segundo lugar, a aproximação foi feita através dos polinômios de Chebyshev de primeiro tipo. Os polinômios de Chebyshev são uma classe especial de polinômios ortogonais amplamente utilizados para aproximar outras funções. Alguns exemplos de aplicação da técnica em análise numérica são: aproximação uniforme, aproximação por mínimos quadrados, solução numérica de equações diferenciais parciais e ordinárias (Gil; Segura; Temme, 2007)

Os polinômios de Chebyshev de primeiro tipo são descritos pela seguinte relação geradora:

$$T_n(x) = \cos \left[n \cdot \cos^{-1}(x) \right], \quad x \in [-1, 1], \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (4.22)$$

onde n é a ordem do polinômio.

As expressões explícitas para os 6 primeiros polinômios de Chebyshev de primeiro tipo são dadas abaixo:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, & T_1(x) &= x, \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1, & T_3(x) &= 4x^3, \\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1, & T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Estes polinômios podem ser observados também na Figura 4.3.

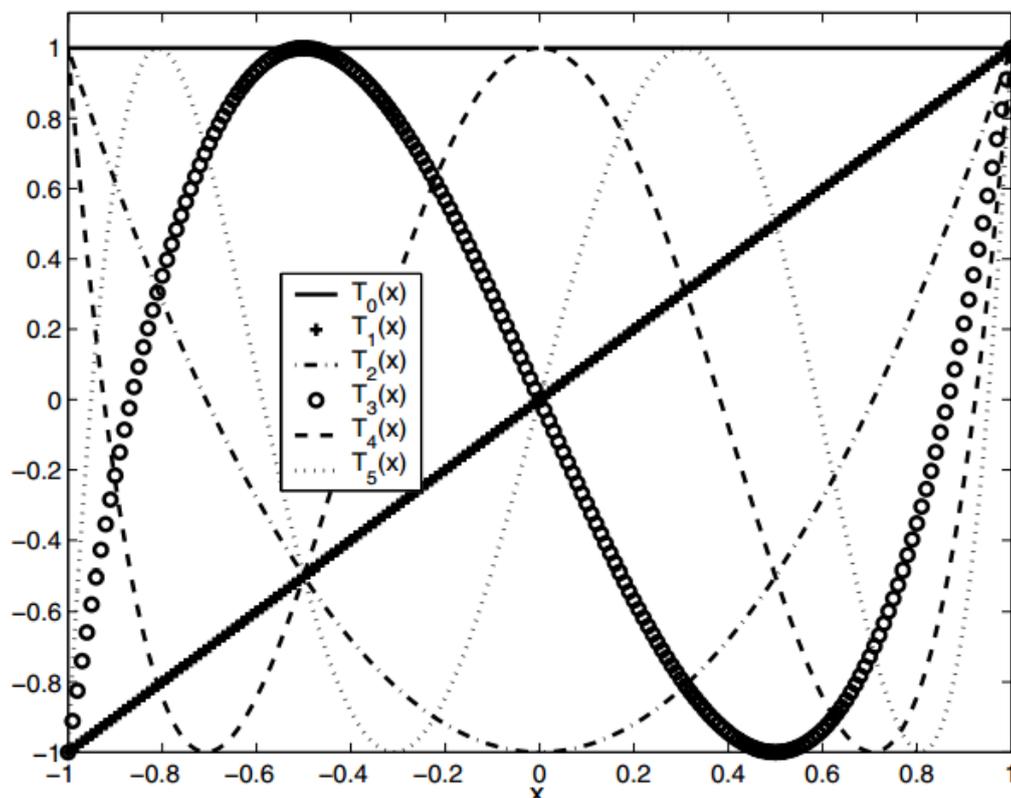


Figura 4.3: Polinômios de Chebyshev de tipo 1, $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Fonte: (Gil; Segura; Temme, 2007)

A aproximação da equação (4.16) utilizando os 5 primeiros polinômios de Chebyshev para diferentes volatilidades relativa pode ser observada na Figura 4.4.

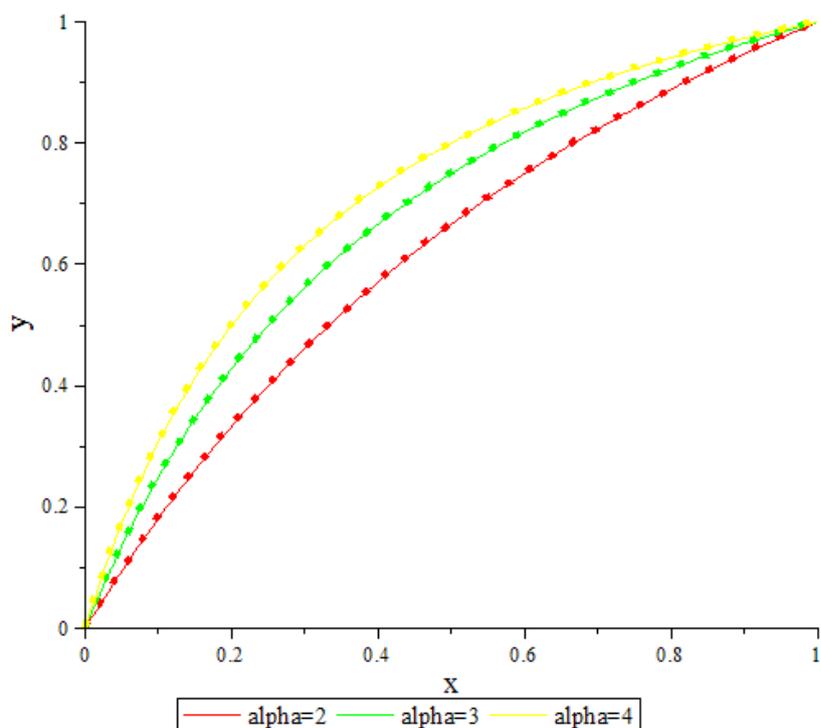


Figura 4.4: Comparação entre a função de equilíbrio e sua aproximação por polinômios de Chebyshev. As linhas pontilhadas são os valores aproximados e as linhas contínuas são os valores exatos.

A Figura 4.4 mostra que, para os valores de α estudados, a aproximação por polinômios de Chebyshev não depende do valor de α . Além disso, comparando-se as Figuras 4.2 e 4.4 fica claro que a aproximação da equação (4.16) por polinômios de Chebyshev é superior em relação à aproximação por séries de Taylor. Porém, diferentemente da aproximação por séries de Taylor, onde é possível obter uma aproximação em função de um α genérico, o cálculo da aproximação deve ser feito caso a caso para cada α .

4.2.3 Solução Simbólica

Além disso, foi testada a viabilidade de se obter uma solução simbólica do modelo de coluna de destilação. Para tanto, a implementação das condições iniciais das equações diferenciais do modelo, apresentado no capítulo 4, foi feita de maneira simbólica, como mostra a equação abaixo:

$$x_i(0) = c_i \quad (4.24)$$

onde $x_i(0)$ é a condição inicial da fração molar no estágio i .

Com isso, as soluções serão funções do tempo e das condições iniciais, conforme a equação dada a seguir:

$$x_i = f(x_1(0), x_2(0), x_3(0), x_4(0), x_5(0), t) \quad i=1, 2, 3, 4, 5 \quad (4.25)$$

5 Resultados

Neste capítulo, são apresentados os resultados dos testes e simulações, avaliando a capacidade da técnica proposta em resolver os problemas descritos no capítulo 0. Os resultados foram separados por cada problema a ser resolvido: reator CSTR e a coluna de destilação.

5.1 Reator CSTR

A utilização da técnica de Adomian resolveu satisfatoriamente o modelo de reator descrito anteriormente neste trabalho. O resultado de uma das simulações (com 3 termos de Adomian e passo de integração $h = 0,5$ hora) está ilustrado na Figura 5.1.

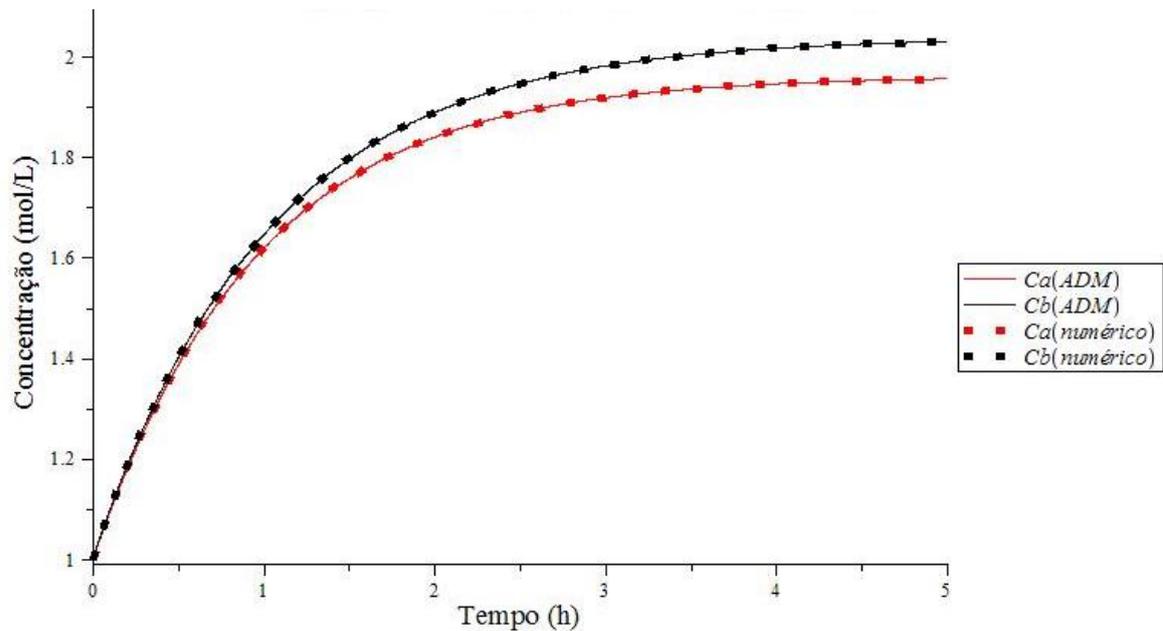


Figura 5.1: Comparação entre solução Adomiana e solução numérica

A Figura 5.1 mostra que a solução através da técnica de Adomian é possível tanto no estado estacionário quanto no estado transiente.

5.1.1 Efeito do tamanho do passo de integração

Para avaliar a influência do tamanho do passo de integração na eficiência de resolução do problema através da técnica proposta, foram realizados testes com diferentes passos de integração e os resultados comparados em termos de tempo computacional e erro percentual médio. Para todos os testes desta seção, foram utilizados 3 termos de Adomian para calcular a aproximação. O erro em função do tamanho do passo de integração é apresentado na Figura 5.2.

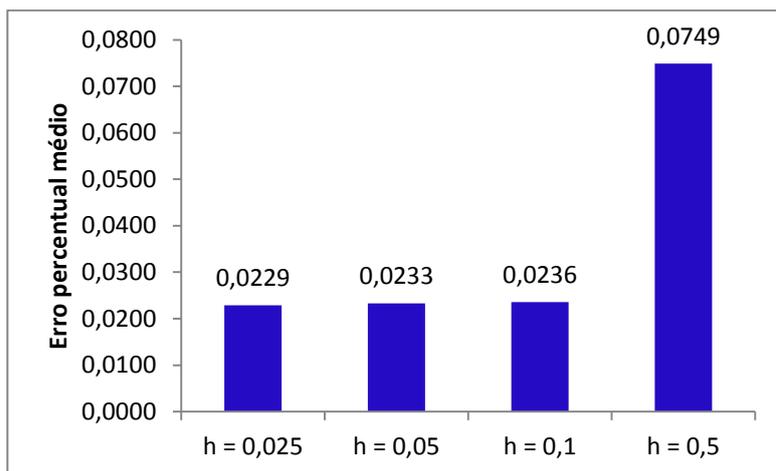


Figura 5.2: Erro percentual médio da solução Adomiana para diferentes passos de integração

Com base na Figura 5.2 é possível afirmar que o erro percentual não varia para um tamanho de intervalo na faixa de 0,025 hora até 0,1 hora. Já para um tamanho de intervalo de 0,5 hora, o erro percentual é aproximadamente 3 vezes maior para a variável C_a e 1,5 vez maior para a variável C_b quando comparado com os intervalos de menor tamanho.

O tempo computacional é inversamente proporcional ao tamanho do intervalo, como mostra a Figura 5.3.

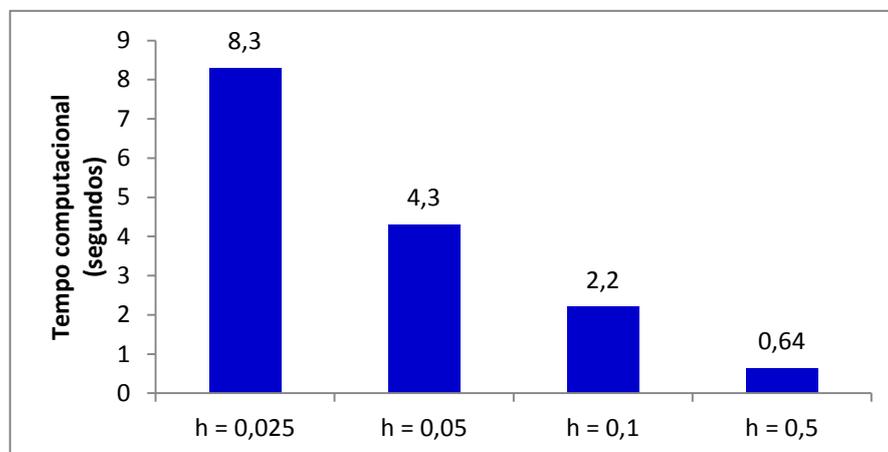


Figura 5.3: Tempo computacional em função do tamanho do intervalo.

Analisando-se em conjunto o tempo computacional e o erro percentual, chega-se a conclusão que o ideal é utilizar um intervalo de tamanho $h = 0,1$ hora, já que neste caso o tempo computacional é o menor dentre os casos com menor erro percentual.

5.1.2 Efeito do número de termos de Adomian

Utilizando-se um passo de integração $h = 0,1$ hora, observa-se que, com exceção da solução utilizando somente um termo de Adomian, a variação no número de termos praticamente não afeta o erro percentual médio em relação à solução numérica, conforme a Figura 5.4.

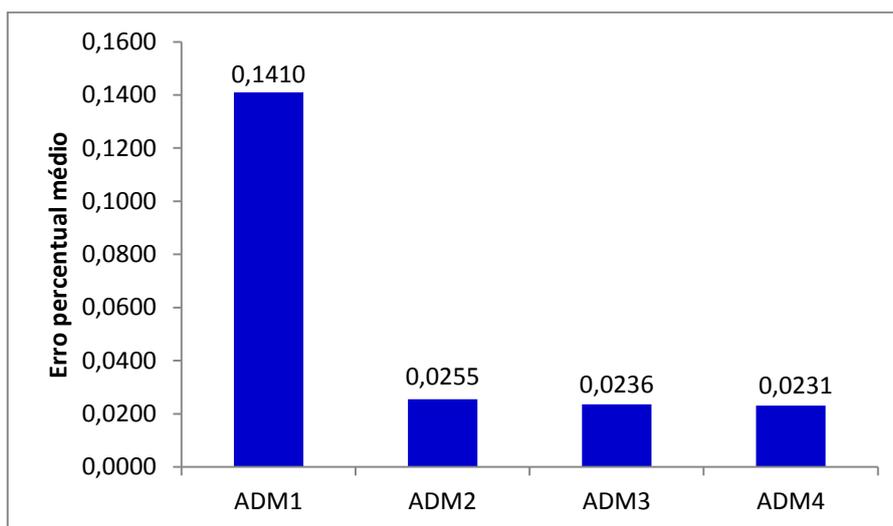


Figura 5.4: Erro percentual médio da solução Adomiana em relação à solução numérica

Em relação ao tempo computacional, o aumento do número de termos de Adomian provoca um aumento no tempo computacional, o que já era esperado, uma vez que isto implica não só num número maior de cálculos, mas também em um maior grau de complexidade no cálculo dos polinômios de Adomian. A comparação é apresentada na Figura 5.5.

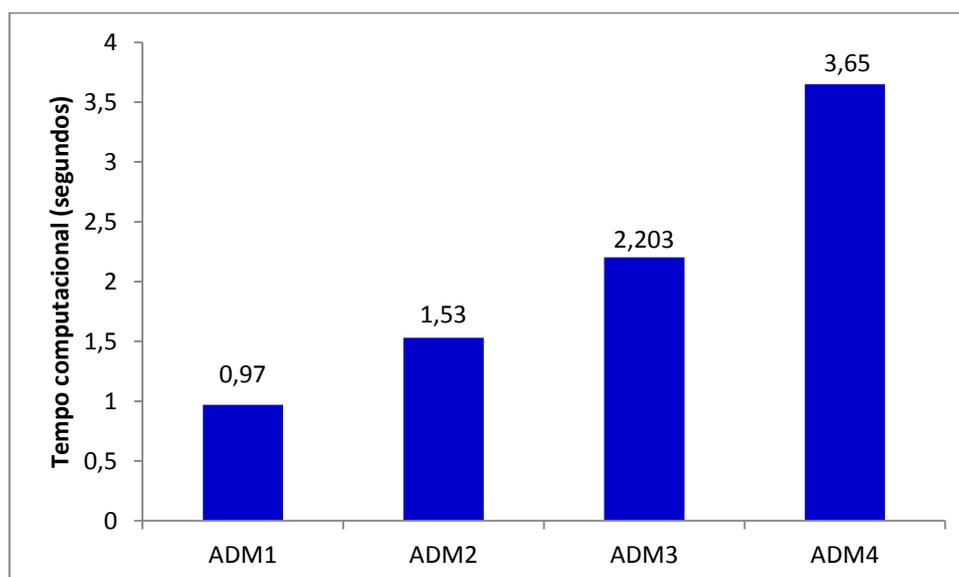


Figura 5.5: Tempo computacional médio em função do número de termos de Adomian

Avaliando conjuntamente o erro e o tempo computacional, verifica-se que não se faz necessário, para o modelo de reator estudado, a utilização de mais de 2 termos de Adomian, uma vez que isso resulta em pouca melhoria em termos de precisão (a ordem do erro permanece a mesma) e um aumento do tempo computacional.

5.2 Coluna de destilação

Nesta seção, serão apresentados os resultados dos testes e simulações para o modelo de coluna de destilação. Utilizando a técnica de Adomian modificada aliada à aproximação por série de Taylor da função de equilíbrio, obteve-se a solução do modelo de coluna de destilação, que pode ser observada na Figura 5.6.

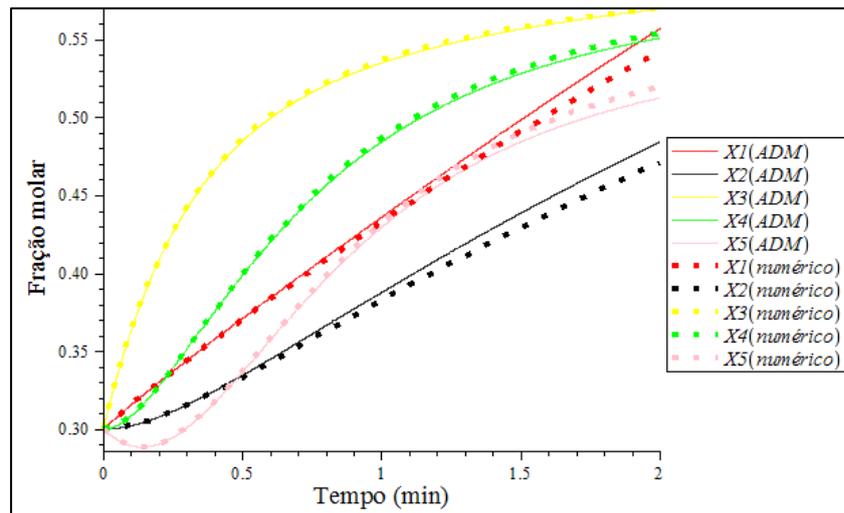


Figura 5.6: Comparação da solução Adomiana com a solução numérica utilizando um intervalo de tamanho $h = 0,025$ minuto. Função de equilíbrio aproximada por série de Taylor.

O resultado da simulação utilizando-se a técnica de Adomian modificada aliada à aproximação da função de equilíbrio de fases por polinômios de Chebyshev está ilustrado na Figura 5.7.

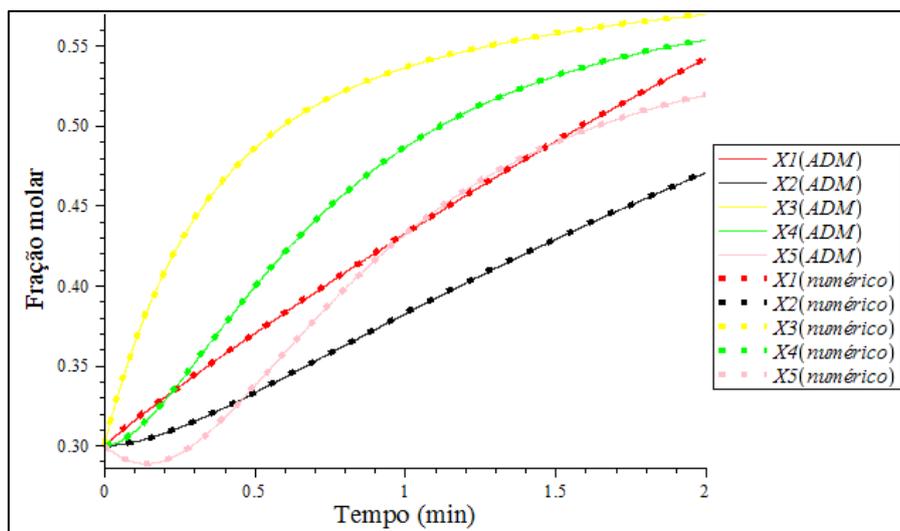


Figura 5.7: Comparação entre solução Adomiana e solução numérica para um intervalo de tamanho $h = 0,025$ minutos. Função de equilíbrio aproximada por polinômios de Chebyshev.

Analisando-se as Figuras 5.6 e 5.7, observa-se claramente um melhor desempenho em termos de precisão quando se aproxima a função de equilíbrio por polinômios de Chebyshev ao invés de aproximá-la por série de Taylor.

5.2.1 Efeito do tamanho do passo de integração (h)

Para avaliar a influência do tamanho do passo de integração no desempenho da técnica proposta, foram realizadas simulações com diferentes passos de integração tanto para o caso de aproximação da função de equilíbrio por série de Taylor quanto para aproximação por polinômios de Chebyshev. A solução obtida foi utilizada para avaliar as composições x_1 , x_2 , x_3 , x_4 e x_5 em diferentes pontos no tempo. A solução foi então

comparada com a solução numérica. Para simplificar a apresentação do resultado, foi feita uma média do erro percentual de cada composição para diferentes passos de integração, conforme mostra a Figura 5.8. Na figura, “Taylor” indica as soluções obtidas com aproximação da função de equilíbrio por série de Taylor e “Chebyshev” as soluções que aproximam a função de equilíbrio por polinômios de Chebyshev.

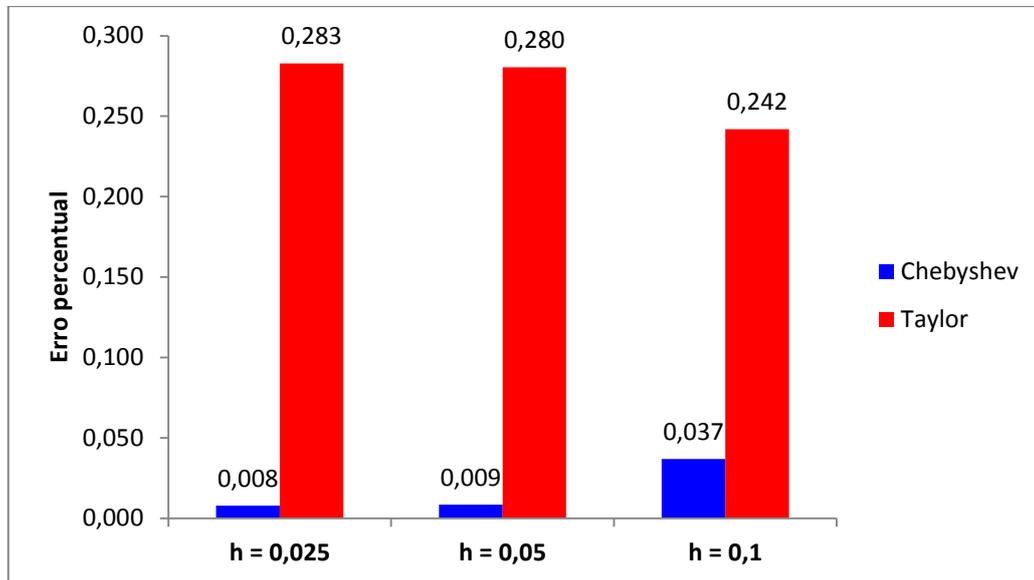


Figura 5.8: Avaliação do erro percentual médio da solução Adomiana em relação à solução numérica para diferentes passos de integração (h)

Fazendo-se uma análise da Figura 5.8 é possível afirmar que, para o mesmo passo de integração, a técnica modificada de Adomian, aliada à aproximação por polinômios de Chebyshev da função de equilíbrio teve um desempenho muito melhor em termos de precisão do que a aproximação por séries de Taylor. O erro médio das soluções que utilizam Taylor é aproximadamente 35 vezes maior do que o erro médio das soluções que utilizam Chebyshev. Para um tamanho de passo maior, $h = 0,2$ minutos, a solução começa a ter um comportamento divergente para os dois tipos de aproximação, conforme mostram as Figuras 5.9 e 5.10.

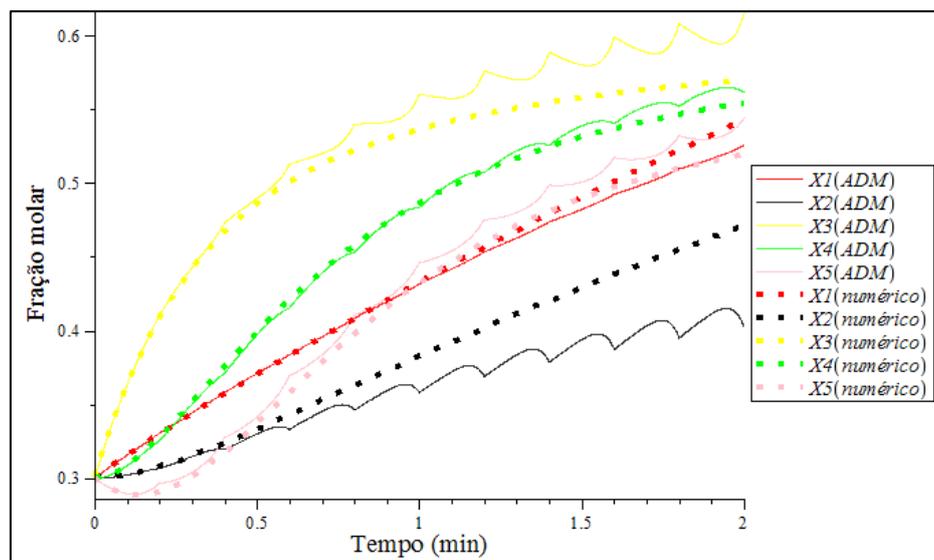


Figura 5.9: Solução do modelo de coluna de destilação com aproximação da equação de equilíbrio por série de Taylor e tamanho de intervalo $h = 0,2$ minutos

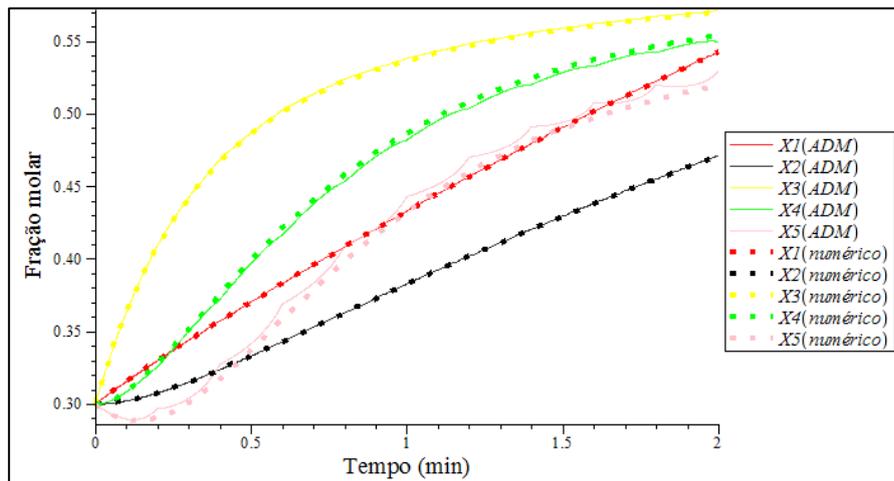


Figura 5.10: Solução do modelo de coluna de destilação com aproximação da equação de equilíbrio por polinômios de Chebyshev e tamanho de intervalo $h = 0,2$ minutos

Em termos de tempo computacional, a implementação que utiliza série de Taylor como aproximação para a equação de equilíbrio necessitou de um tempo computacional em média 30% menor do que a solução que utiliza polinômios de Chebyshev, ou seja, teve um desempenho 30% melhor, o que está ilustrado na Figura 5.11.

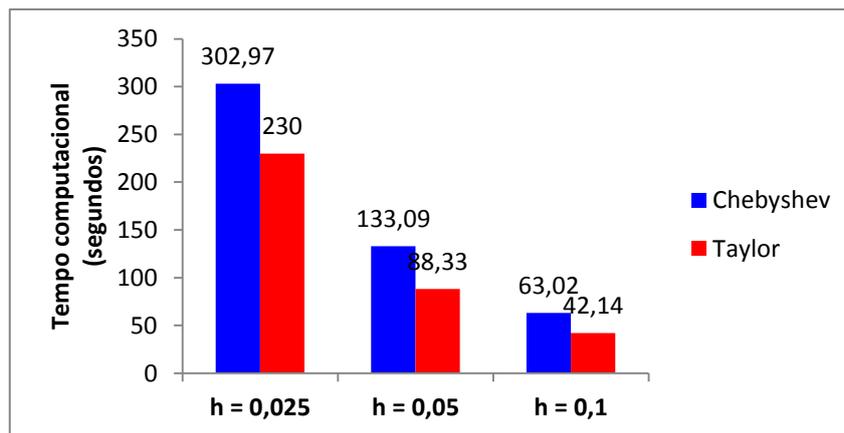


Figura 5.11: Tempo computacional para diferentes tamanhos de intervalo

5.2.2 Efeito do número de termos de Adomian

Como a aproximação por série de Taylor da equação de equilíbrio obteve um desempenho inferior em relação à solução que utiliza os polinômios de Chebyshev, o efeito do número de termos de Adomian foi analisado só para o segundo caso.

Foram feitas simulações utilizando dois, três e quatro termos de Adomian e com um passo de integração de 0,05 minutos. Os resultados obtidos foram comparados com base no erro percentual médio e no tempo computacional de cada um, como mostram as Figuras 5.12 e 5.13.

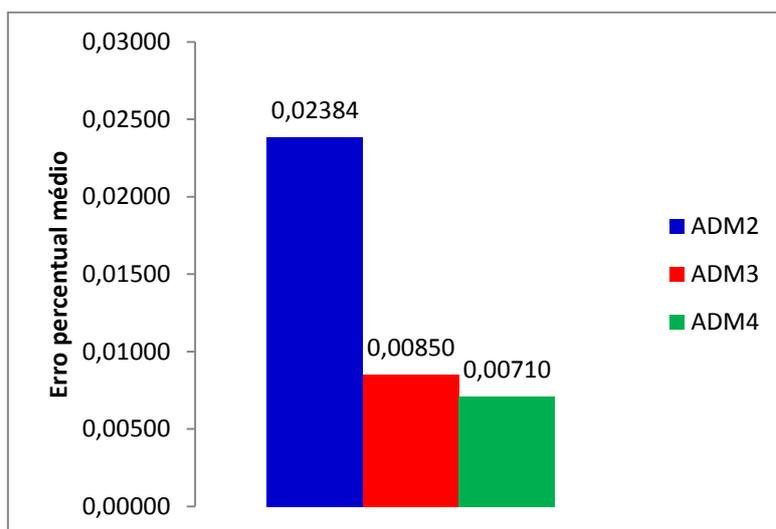


Figura 5.12: Erro percentual médio em função do número de termos de Adomian.

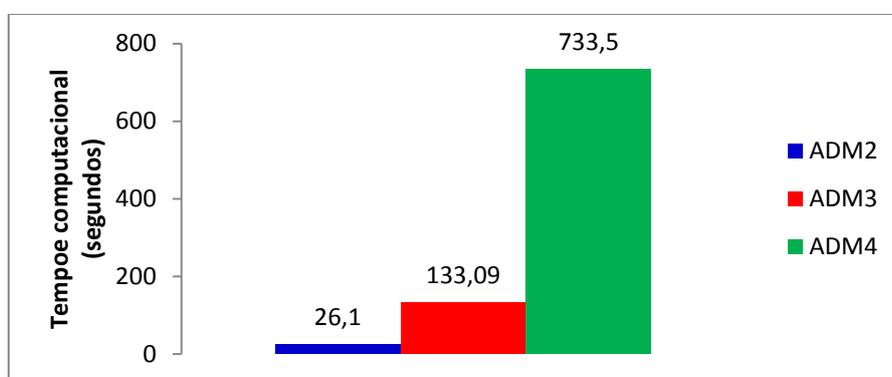


Figura 5.13: Tempo computacional total para determinação da solução do modelo de coluna de destilação utilizando-se dois, três ou quatro termos de Adomian.

As Figuras 5.12 e 5.13 mostram que praticamente não há diferença entre utilizar três ou quatro termos de Adomian para resolver o modelo de coluna de destilação. Além disso, a utilização de dois termos de Adomian apresentou um erro percentual aproximadamente 3 vezes maior quando comparado com as soluções que utilizam três e quatro termos. Porém, em termos de tempo computacional, a solução que utiliza dois termos apresenta um tempo 5 vezes menor do que a solução com três termos, e um tempo quase 30 vezes menor do que a solução com quatro termos, conforme a Figura 5.13. Portanto, dependendo do erro permitido, é mais vantajoso utilizar dois termos de Adomian do que três ou mais termos.

5.2.3 Avaliação no estado estacionário

Como a avaliação no estado estacionário da coluna de destilação precisa de um tempo computacional maior, foram feitas apenas 2 simulações, uma utilizando 2 termos de Adomian e outra 3 termos e ambas com um passo de integração de 0,05 minutos, apenas para ilustrar a validade da técnica proposta para o estado estacionário. Os resultados podem ser observados nas Figuras 5.14 e 5.15.

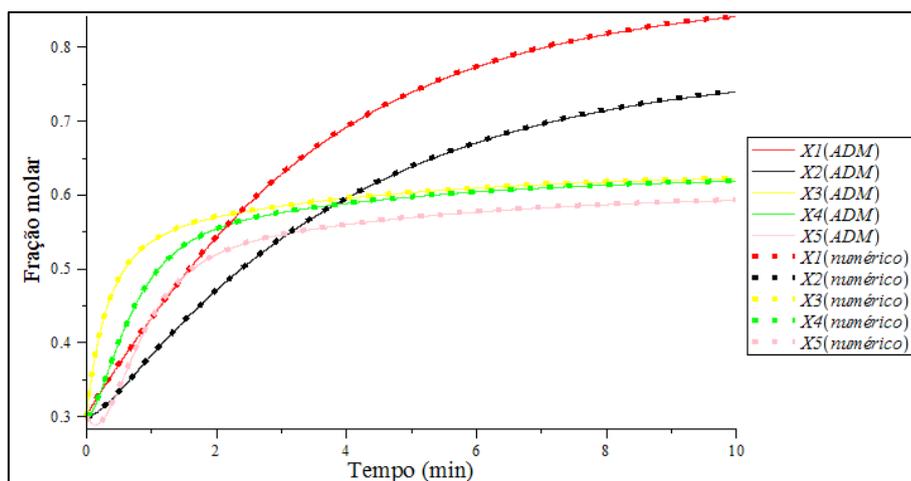


Figura 5.14: Comparação entre solução Adomiana com 2 termos e solução numérica para o modelo de coluna de destilação

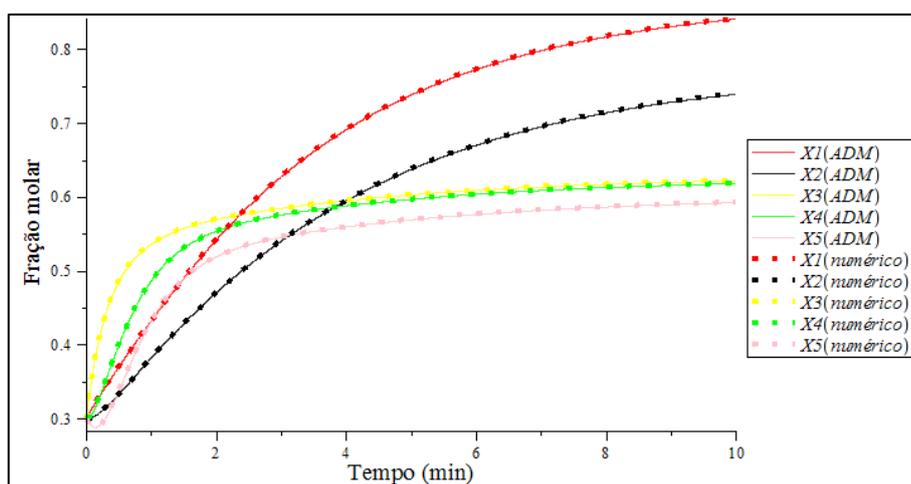


Figura 5.15: Comparação entre solução Adomiana com 3 termos e solução numérica para o modelo de coluna de destilação

As Figuras 5.14 e 5.15 mostram que a técnica proposta também é capaz de resolver o modelo de coluna de destilação no estado estacionário, não sofrendo do problema de oscilação polinomial.

5.2.4 Solução simbólica

A solução simbólica do modelo, conforme descrito anteriormente, foi obtida utilizando-se 2 termos de Adomian. O tempo computacional de cálculo foi de aproximadamente 25000 segundos (quase 7 horas). Tendo em vista que este cálculo é feito somente uma vez para cada modelo, este tempo é aceitável para algumas aplicações de controle e otimização. Deve-se observar também que a forma de obtenção da solução não foi otimizada em relação ao tempo computacional, conforme descrito, por exemplo, em Younker (2011).

Com a solução simbólica obtida, foram utilizadas as mesmas condições iniciais (equação (4.21)) e um passo de integração $h=0,025$ minutos para calcular a solução do modelo da coluna num dado intervalo de tempo, conforme a Figura 5.16.

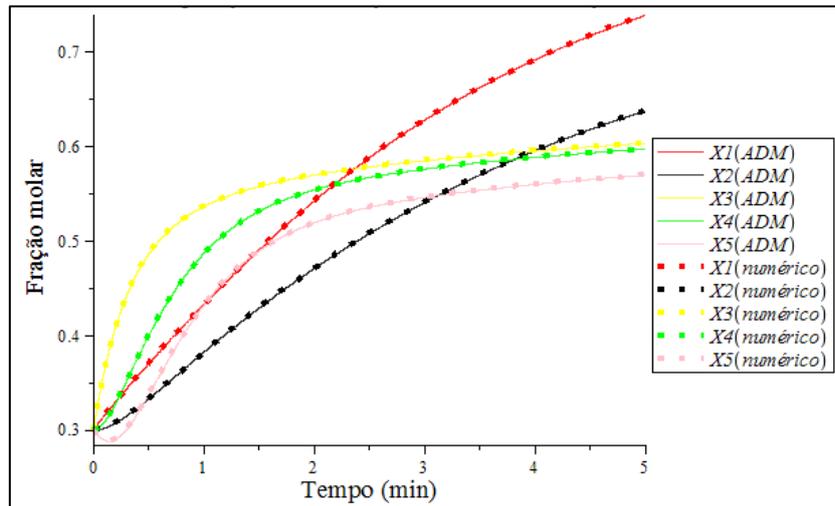


Figura 5.16: Comparação entre solução Adomiana e solução numérica

O tempo computacional necessário para calcular a solução através de Adomian no intervalo de 0 a 5 minutos foi de aproximadamente 7 segundos contra um tempo de 0,2 segundos da solução numérica. Portanto, em termos de tempo computacional, a solução Adomiana foi inferior à solução numérica de Runge-Kutta.

A solução foi testada também para em um intervalo de tempo do tamanho do passo de integração ($h = 0,025$ minutos). Neste caso, o tempo de computacional para obter a solução através de Adomian foi de 0,156 segundos. Sendo assim, verificou-se que, mantendo-se constante o passo de integração, quanto maior o intervalo onde se deseja avaliar a solução Adomiana, maior é o tempo computacional necessário, e consequentemente pior é o desempenho em relação ao método numérico.

6 Conclusões e Trabalhos Futuros

Este trabalho testou a viabilidade da aplicação do método de Adomian modificado para a obtenção analítica de soluções de modelos dinâmicos típicos da Engenharia Química, visando aplicações de controle, estimação de parâmetros, otimização em tempo real, etc. Para possibilitar tais aplicações, são importantes, além da possibilidade da obtenção da solução, a precisão na resposta e a escolha de parâmetros da aproximação tais como o intervalo de integração e o número de termos da aproximação da Adomian.

Neste contexto, a técnica de Adomian mostrou ter potencial para ser utilizada na resolução de modelos de coluna de destilação e de reator CSTR, inclusive no estado estacionário, onde a divergência polinomial é mais acentuada. Os resultados mostraram que é possível obter soluções para o modelo de reator CSTR e para o modelo de coluna de destilação com erro da ordem de 10^{-4} utilizando-se polinômios de Chebyshev para aproximar a equação de equilíbrio de fases.

Em relação à aproximação da equação de equilíbrio, a aproximação por polinômios de Chebyshev mostrou ser mais eficiente em termos de precisão do que a aproximação por série de Taylor. Em detrimento disto, o cálculo da aproximação por polinômios de Chebyshev levou mais tempo do que a aproximação por série de Taylor. Além disso, a aproximação por Chebyshev precisa ser feita caso a caso para cada coeficiente de volatilidade (α), diferentemente da aproximação por série de Taylor, que gera uma aproximação para um α genérico. Esta mesma conclusão pode ser obtida analisando-se a Figura 5.8, que indica que, para um mesmo passo de integração, o erro da solução que aproxima a função de equilíbrio por série de Taylor é 35 vezes maior do que a solução que aproxima a função de equilíbrio por polinômios de Chebyshev.

A análise da influência do tamanho do passo de integração mostra que, quanto maior o tamanho do passo, maior é o erro da aproximação e menor é o tempo computacional do cálculo. No caso do modelo de coluna de destilação estudado, o ideal seria utilizar, dentre os passos estudados, um passo de integração $h = 0,5$ minutos, pois é o que apresenta a melhor relação entre tempo computacional e erro de aproximação. Para o modelo do reator, o passo de integração que apresentou melhores resultados foi $h = 0,1$ hora.

O estudo da influência do número de termos de Adomian sobre o tempo de cálculo e sobre o erro da aproximação, indicou que, para o modelo de coluna de destilação considerado, o ideal é utilizar 3 termos de Adomian, pois este número apresentou, com um tempo computacional 5 vezes menor, um erro relativo da mesma ordem de grandeza do que a aproximação com 4 termos. Além disso, apresentou também um erro 130 vezes menor do que a aproximação que utiliza 2 termos e um tempo computacional apenas 5 vezes maior. Para o modelo do reator, o mesmo raciocínio indica que a utilização de 2 termos de Adomian apresentou melhores resultados.

Apesar de ter sido possível a obtenção de uma solução simbólica do modelo através de Adomian, seu desempenho ainda é pior do que a técnica usual de Runge-Kutta, já que tempo computacional para gerar a solução Adomiana é maior do que o tempo para gerar a solução numérica por Runge-Kutta. Obviamente, este resultado não é definitivo, uma vez que este trabalho não estudou formas de tornar a obtenção da solução Adomiana de forma mais rápida, por exemplo, explorando a estrutura das equações que constituem o modelo. Além disso, as soluções aqui obtidas são semi-analíticas, e deste modo são

interessantes para serem utilizadas em outros tipos de aplicação, como, por exemplo, otimização dinâmica.

Sabendo que é possível obter soluções semi-analíticas de modelos através da técnica de Adomian, trabalhos futuros podem focar na otimização da velocidade de cálculo da solução, e estudar a possibilidade de utilizar esta metodologia para resolver modelos mais complexos ou abrangentes.

7 Referências

- ABBASBANDY, S.; DARVISHI, M. T. A numerical solution of Burgers' equation by time discretization of Adomian's decomposition method. **Applied Mathematics and Computation**, v. 170, n. 1, p. 95–102, 2005.
- ABDELRAZEC, A.; PELINOVSKY, D. Convergence of the Adomian Decomposition Method for Initial-Value Problems. **Numerical Methods for Partial Differential Equations**, v. 27, n. 4, p. 749–766, 2011.
- ADOMIAN, G. Analytic solutions for nonlinear equations. **Applied Mathematics and Computation**, v. 26, n. 1, p. 77–88, abr. 1988.
- BABOLIAN, E.; JAVADI, S. New method for calculating Adomian polynomials. **Applied Mathematics and Computation**, v. 153, n. 1, p. 253–259, 2004.
- BIAZAR, J.; BABOLIAN, E.; ISLAM, R. Solution of the system of ordinary differential equations by Adomian decomposition method. **Applied Mathematics and Computation**, v. 147, n. 3, p. 713–719, 2004.
- CHEN, F.; LIU, Q. Modified asymptotic Adomian decomposition method for solving Boussinesq equation of groundwater flow. **Applied Mathematics and Mechanics**, v. 35, n. 4, p. 481–488, 2014.
- CHERRUAULT, Y. Convergence of Adomian 's Method. **Kybernets**, v. 18, n. 2, p. 31–38, 1989.
- CHERRUAULT, Y.; ABBAOUI, K. Convergence of Adomian 's Method Applied to Nonlinear Equations. **Mathl. Comput Modelling**, v. 20, n. 9, p. 69–73, 1994.
- CHOI, H. Symbolic implementation of the algorithm for calculating Adomian polynomials. **Applied Mathematics and Computation**, v. 146, n. 1, p. 257–271, 2003.
- FATOOREHCHI, H.; ABOLGHASEMI, H. On Calculation of Adomian Polynomials by MATLAB. **Journal of Applied Computer Science & Mathematics**, v. 11, n. 5, p. 85–88, 2011.
- GIL, A.; SEGURA, J.; TEMME, N. 3. Chebyshev Expansions. In: **Numerical Methods for Special Functions**. Other Titles in Applied Mathematics. [s.l.] Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007. p. 51–86.
- GU, H.; LI, Z. A modified Adomian method for system of nonlinear differential equations. **Applied Mathematics and Computation**, v. 187, p. 748–755, 2007.
- HUANG, H.; LEE, T. S.; SHU, C. On the Adomian decomposition method for solving the Stefan problem. **International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow**, v. 25, n. 4, p. 912–928, 2015.
- KAYA, D.; YOKUS, A. A numerical comparison of partial solutions in the decomposition method for linear and nonlinear partial differential equations. **Mathematics and Computers in Simulation**, v. 60, n. 6, p. 507–512, 2002.

QIN, X.-Y.; SUN, Y.-P. Approximate analytical solutions for a mathematical model of a tubular packed-bed catalytic reactor using an Adomian decomposition method. **Applied Mathematics and Computation**, v. 218, n. 5, p. 1990–1996, nov. 2011.

WAZWAZ, A. A reliable modification of Adomian decomposition method. **Applied Mathematics and Computation**, v. 102, p. 77–86, 1999.

WAZWAZ, A. A new algorithm for calculating adomian polynomials for nonlinear operators. **Applied Mathematics and Computation**, v. 111, p. 53–69, 2000.

WAZWAZ, A.; EL-SAYED, S. M. A new modification of the Adomian decomposition method for linear and nonlinear operators. **Applied Mathematical Sciences**, v. 122, p. 393–405, 2001.

YOUNKER, J. M. Numerical integration of the chemical rate equations via a discretized adomian decomposition. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 50, n. 6, p. 3100–3109, 2011.