



Evento	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2013
Local	Porto Alegre - RS
Título	Testes com Métodos para a Simulação Computacional de Modelos de Processo - Integração de Série de Taylor e Decomposição Adomiana
Autor	VITOR DAL BÓ ABELLA
Orientador	PEDRO RAFAEL BOLOGNESE FERNANDES

Em função do uso cada vez maior de modelos computacionais nas Ciências Exatas e consequentemente na Engenharia, é necessário o desenvolvimento de métodos numéricos para a simulação de modelos de processo que permitam aplicações tais como estimação de parâmetros, otimização e controle, as quais apresentam grande demanda computacional. Deste modo, o objetivo desta pesquisa consiste no estudo de métodos numéricos mais eficientes para a resolução de problemas de valor inicial (PVI) constituídos por sistemas de equações diferenciais ordinárias (ODEs). Em particular, foi testada a aplicação de dois métodos para modelos típicos da Engenharia Química: método da integração da série de Taylor (TSM) e método da decomposição Adomiana (ADM).

Inicialmente, foi estudado o uso da derivação automática (AD), técnica relativamente recente que faz uso da regra da cadeia para obter o valor exato da derivada de uma função computacional, a fim de obter os termos da série de Taylor necessários ao TSM. Assim, este método foi implementado no ambiente de trabalho Python com diferenciação automática feita através do Algopy (pacote de AD disponível em Python). A rotina gerada TSM+AD foi então comparada com o método de Taylor empregando diferenças finitas (aproximação numérica das derivadas) e a matriz jacobiana analítica, e também com a solução gerada pelo solver do Python (função ODEint). Para esta comparação, foram analisados o erro quadrático médio (EQM), o tempo de processamento e o passo de integração. Os testes foram feitos com o modelo de uma coluna de destilação constituído por um sistema de 41 EDOs.

Posteriormente, estudou-se do método da Decomposição Adomiana (ADM) para a resolução de ODEs, o qual é baseado nos polinômios de Adomian. A fim de obter a solução do PVI através deste método, é preciso integrar-se tais polinômios; para tanto, empregou-se a integração analítica e alternativamente uma técnica numérica específica proposta por Younker (2013). Além disso, foi estudado o método de análise homotópica (HAM) para a integração dos polinômios de Adomian. No caso dos testes com o ADM é simulada uma coluna de destilação constituída por um sistema de 13 EDOs.

Para o método da integração da série de Taylor, os resultados do tempo de processamento foram (em ordem crescente): solver do Python, Jacobiana analítica, AD e diferenças finitas. Com relação à decomposição Adomiana, ela se mostrou eficaz na região próxima à condição inicial, no entanto não convergiu à solução exata na região próxima ao estado estacionário do modelo. A integração proposta por Younker (2013) se mostrou ineficaz por resultar em soluções computacionalmente instáveis. O método HAM gera melhores resultados, porém depende fortemente de um parâmetro para o qual não se tem uma forma de determinação.