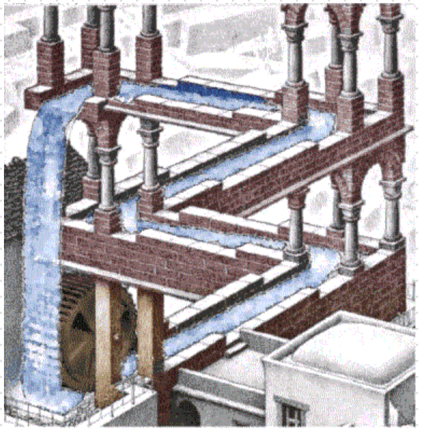
UNIVERSIDADE FEDERAL
DE LAVRAS

Departamento de Engenharia (DEG)

Análise e Otimização de Processos Químicos



Graduação em Engenharia Química

Prof. Irineu Petri Júnior

2018

Métodos numéricos

Método de Euler

Neste capítulo, construiremos o mais simples dos métodos para resolver **problemas de valor inicial**: o <u>Método de Euler com passo constante</u>. Por passo constante, queremos dizer que os pontos da malha estão todos igualmente espaçados.

$$t^{(\mathrm{i})} = h(i-1) \qquad i = 1, 2, 3, \dots, \mathrm{N}$$

Onde h é o passo, ou seja, a distância entre dois pontos da malha.

Considere o seguinte PVI:

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y) \\ y(t^{(1)}) = a \end{cases}$$

Resolvendo o PVI do ponto $t^{(1)}$ a $t^{(2)}$, temos:

$$\int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} y'(t)dt = \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t, y)dt$$

$$y(t^{(2)}) - y(t^{(1)}) = \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t, y)dt \Rightarrow y(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t, y)dt$$

Métodos numéricos

$$y(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t, y)dt$$

Aproximando a função para o ponto $t^{(1)}$ e $y^{(1)}$, temos:

$$y(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t^{(1)}, y^{(1)})dt$$

$$\Downarrow$$

$$y(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + f(t^{(1)}, y^{(1)})\int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} dt$$

$$\Downarrow$$

$$y(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + f(t^{(1)}, y^{(1)})(t^{(2)} - t^{(1)})$$

$$\Downarrow$$

$$y(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + f(t^{(1)}, y^{(1)})h$$

Aproximando a função para o ponto $t^{(n)}$ e $y^{(n)}$, temos:

$$y(t^{(n+1)}) = y(t^{(n)}) + f(t^{(n)}, y^{(n)})h$$

Métodos numéricos

Desta forma, temos:

$$\begin{cases} y(t^{(n+1)}) = y(t^{(n)}) + f(t^{(n)}, y^{(n)})h \\ y(t^{(1)}) = a \end{cases}$$

Exemplo 1:

$$\begin{cases} y' = 2y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Calcule o valor da função para t = 1s, para passos de tempo de 0,1; 0,01; 0,001; 0,0001.

Para h=0,1:

$$\begin{aligned} &y(0) \approx 1 \\ &y(0,1) \approx y(0) + h.f(y(0)) \approx 1 + 0,1.(2*1) \approx 1,2 \\ &y(0,2) \approx 1,2 + 0,1.(2*1,2) \approx 1,44 \\ &y(0,3) \approx 1,488 + 0,1.(2*1,488) \approx 1,728 \\ &y(0,4) \approx 2,074 \\ &\qquad\vdots \\ &y(1) \approx 6,192 \end{aligned}$$

Métodos numéricos

Para h=0,1: $y(1) \approx 6,192$ 3 seg.

Para h=0,01: $y(1) \approx 7,245$ 20 seg.

Para h=0,001: $y(1) \approx 7,374$ 2 min.

Para h=0,0001: $y(1) \approx 7,388$ 10 min.

Solução analítica: $y = e^{2t}$ $y(1) = 7,389$

De fato, podemos mostrar que quando h se aproxima de 0, a solução aproximada via método de Euler converge para a solução exata.

Exemplo 2:

$$\begin{cases} y' = -0,5y + 2 + t \\ y(0) = 8 \end{cases}$$

Solução analítica

$$y = 2t + 8e^{-t/2}$$

Métodos numéricos

Método de Euler melhorado ou Método de Heun

O método de Euler estudado tem aplicação bastante restrita devido à sua pequena precisão, isto é, normalmente precisamos escolher um passo muito pequeno para obter soluções de boa qualidade, o que implica um número elevado de passos e, consequentemente, alto custo computacional.

- Vimos que:

$$\begin{cases} y'(t) = f(t,y) \\ y(t^{(1)}) = a \end{cases}$$

$$\int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} y'(t)dt = \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t,y)dt \Rightarrow y(t^{(2)}) - y(t^{(1)}) = \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t,y)dt$$

$$\Downarrow$$

$$y(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t,y)dt$$

Nesta etapa, aproximávamos a função para o ponto $t^{(1)}$ e $y^{(1)}$. Porém, vamos aproximar a integral pela regra do trapézio da seguinte forma:

$$\int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} f(t,y)dt = \left(\frac{f(t^{(1)}, y^{(1)}) + f(t^{(2)}, y^{(2)})}{2} \right) h$$

Métodos numéricos

Como o valor de $f(y^{(2)})$ ainda não é conhecido, vamos aproximar ele segundo o método de Euler:

$$\tilde{y}(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + h.f(t^{(1)}, y^{(1)})$$

Assim temos,

$$y(t^{(2)}) = y(t^{(1)}) + h\left(\frac{f(t^{(1)}, y^{(1)}) + f(t^{(2)}, \tilde{y}^{(2)})}{2}\right)$$

Se chamarmos,

$$k_1 = f(t^{(1)}, y^{(1)})$$

$$k_2 = f(t^{(2)}, \tilde{y}^{(2)}) = f(t^{(2)}, \tilde{y}^{(2)}) = f(t^{(2)}, y^{(1)} + h.k_1)$$

O método fica da seguinte forma:

$$k_1 = f(t^{(n)}, y^{(n)})$$

$$k_2 = f(t^{(n+1)}, y^{(n)} + h.k_1)$$

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + h\frac{k_1 + k_2}{2}$$

$$y^{(1)} = a$$

Métodos numéricos

Exemplo 3:

$$\begin{cases} y' = 2y + t \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Calcule o valor da função para t = 1s, para passos de tempo de 0,1.

Para h=0,1:

$$y^{(1)} = 1$$

$$k_1 = 2y^{(1)} + t^{(1)} = 2*1 + 0 = 2$$

$$k_2 = 2*(y^{(1)} + h.k_1) + t^{(2)} = 2*(1 + 0,1*2) + 0,1 = 2,5$$

$$y^{(2)} = y^{(1)} + h\frac{k_1 + k_2}{2} = 1 + 0,1\frac{2 + 2,5}{2} = 1,225$$

$y^{(2)} = 1,225$	$y^{(3)} = 1,51$	
$k_1 = 2,55$	$k_1 = 3,22$	$\ldots \quad y(t=1) = 10,339$
$k_2 = 3,16$	$k_2 = 3,97$	
$y^{(3)} = 1,51$	$y^{(4)} = 1,87$	

Métodos numéricos

EDO’s de ordem superior

Nesta seção, estenderemos as técnicas de Euler e/ou Euler melhorado para resolver alguns tipos de problemas de ordem superior. Para tal, converteremos a equação diferencial em um sistema, incluindo as derivadas da incógnita como novas incógnitas (assim como visto nos métodos analíticos).

$$\begin{cases} y'' + y' + y = \cos(t) \\ \mathrm{y}(0) = 1 \\ \mathrm{y}'(0) = 1 \end{cases}$$

Chamamos, $\begin{matrix} w = y' \\ w' = y'' \end{matrix}$

Então, $\begin{cases} w' + w + y = \cos(t) \\ y' = w \\ \mathrm{y}(0) = 1 \\ w(0) = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} w' = -w - y + \cos(t) \\ y' = w \\ \mathrm{y}(0) = 1 \\ w(0) = 1 \end{cases} \Rightarrow u(t) = \begin{bmatrix} w(t) \\ y(t) \end{bmatrix}$

Métodos numéricos

Já vimos que,

$$u(t^{(n+1)}) = u(t^{(n)}) + h\,.\,f(u^{(n)})$$

Logo:

$$\begin{bmatrix} w^{(n+1)} \\ y^{(n+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w^{(n)} \\ y^{(n)} \end{bmatrix} + h\,.\begin{bmatrix} f(w^{(n)}) \\ f(y^{(n)}) \end{bmatrix}$$

Ou seja,

$$\begin{cases} w^{(n+1)} = w^{(n)} + h.f(w^{(n)}) \\ y^{(n+1)} = y^{(n)} + h.f(y^{(n)}) \\ \mathrm{y}(0) = 1 \\ \mathrm{w}(0) = 1 \end{cases}$$

Métodos numéricos

Exemplo 4:

$$\begin{cases} y''+y'+y=\cos(t) \\ \mathrm{y}(0)=1 \\ \mathrm{y}'(0)=1 \end{cases}$$

Foi visto que:

$$\begin{cases} w'=-w-y+\cos(t) \\ y'=w \\ \mathrm{y}(0)=1 \\ w(0)=1 \end{cases} \xrightarrow{\text{Método de Euler}} \begin{array}{l} w^{(\mathrm{n}+1)}=w^{(\mathrm{n})}+h.f(w^{(\mathrm{n})}) \\ y^{(\mathrm{n}+1)}=y^{(\mathrm{n})}+h.f(y^{(\mathrm{n})}) \\ \mathrm{y}(0)=1 \\ \mathrm{w}(0)=1 \end{array}$$

Para h=0,1 e t=1s, temos:

$$w^{(2)}=w^{(1)}+h.f(w^{(1)})=1+0,1*(-1-1+\cos(0))=0,9$$

$$y^{(2)}=y^{(1)}+h.f(y^{(1)})=1+0,1*(1)=1,1$$

$$w^{(3)}=w^{(2)}+h.f(w^{(2)})=0,9+0,1*(-0,9-1,1+\cos(0,1))=0,799$$

$$y^{(3)}=y^{(2)}+h.f(y^{(2)})=1,1+0,1*(0,9)=1,19$$

Métodos numéricos

$$w^{(4)} = 0,799 + 0,1*(-0,799 - 1,19 + \cos(0,2)) = 0,698$$

$$y^{(4)} = 1,19 + 0,1*(0,799) = 1,2699$$

$$w^{(5)} = 0,698 + 0,1*(-0,698 - 1,2699 + \cos(0,3)) = 0,597$$

$$y^{(5)} = 1,2699 + 0,1*(0,698) = 1,3397$$

.

.

.

$$w = -0,1107$$

$$y = 1,5443$$

Outros métodos:

- Métodos de Runge-Kutta (explícitos e implícitos)
- Método de Adams-Bashforth
- Método de Adams-Moulton
- etc.

Método das Diferenças Finitas

Nesta seção, discutimos os fundamentos do método de diferenças finitas (MDF) para **problemas de valores de contorno** (PVC). Este método consiste na reformulação do problema contínuo em um problema discreto (equações algébricas) usando fórmulas de diferenças finitas tomadas sobre uma malha apropriada.

Expansão por série de Taylor

$$\begin{cases} -u_{xx} = f(x,u) \\ u(a) = u_a \\ u(b) = \mathrm{u_b} \end{cases}$$

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)(x-a)^2}{2!} + \ldots\ldots\ldots + \cancel{\frac{f^{(n-1)}(a)(x-a)^{n-1}}{(n-1)!}}$$

Se a = x_i , x = x_{i+1} , x-a = h

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2!} f_i'' \pm erro$$

Então,

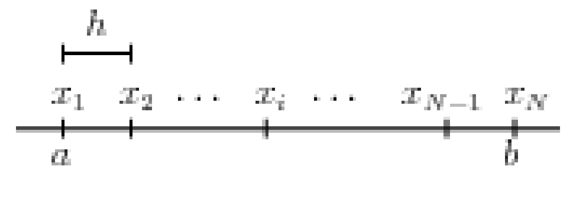
$$\boxed{f_i' \cong \frac{(f_{i+1} - f_i)}{h}} \qquad \boxed{f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}}$$

Método das Diferenças Finitas

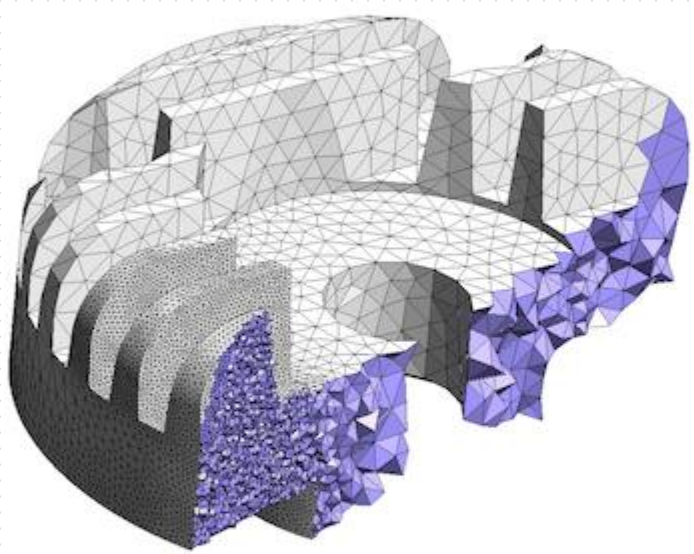
Construção da malha

A malha consiste em uma representação discreta do domínio [a,b]. Como veremos, sua construção tem impacto direto nas próximas etapas do método. Aqui, vamos construir a malha mais simples possível, aquela que consiste de pontos igualmente espaçados, isto é, a chamada malha uniforme.

$$h = \frac{b-a}{N-1}$$



Onde h é o passo da malha e N é o número de pontos igualmente espaçados



Método das Diferenças Finitas

Construção do problema discreto

Consiste na discretização das equações, aproximando as derivadas por diferenças finitas:

Para primeira derivada temos:

Diferenças avançadas $f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$

Diferenças atrasadas $f'(x) = \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h}$

Diferenças centradas $f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$

Para segunda derivada temos:

Diferenças centradas $f''(x) = \dfrac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}$

$$\left.\begin{aligned} & \\ & \\ & \\ & \\ \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \\ f'(x_i) &= \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} \\ f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} \\ f''(x_i) &= \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2} \end{aligned}$$

Método das Diferenças Finitas

Resolução do problema discreto

Neste método, o problema discreto pode ser isolado como um sistema linear (A.u=b) e, portanto, a solução é:

$$u = A^{-1}b$$

Sendo, A uma matriz de coeficientes, u é um vetor de incógnitas e b um vetor de termos constantes.

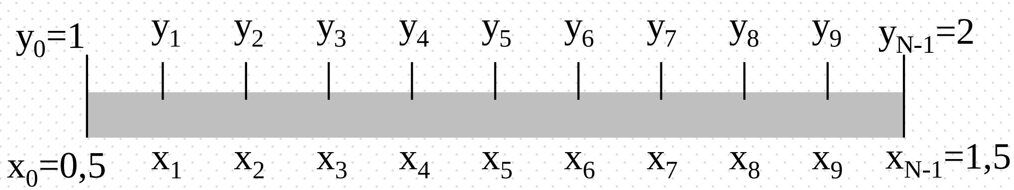
$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} \qquad A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 0 \\ -100h^2(x_2-1)^2 \\ -100h^2(x_3-1)^2 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Exemplo 5

- Use o método de diferenças finitas para resolver o seguinte problema de valor de contorno:

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2y}{dx^2} + y = e^{-x} \\ y(0,5) = 1 \\ y(1,5) = 2 \end{cases}$$

Para tanto, use a fórmula de diferenças finitas central de ordem 2 para discretizar a derivada em uma malha uniforme com passo de 0,1 . Faça, então, um esboço do gráfico da solução computada.



$$h = \frac{b-a}{N-1} \Rightarrow 0{,}1 = \frac{2-1}{N-1} \Rightarrow N = 11$$

O MDF para segunda derivada é:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2}$$

Então o problema fica:

$$-\frac{d^2y}{dx^2} + y = e^{-x} \quad \Rightarrow \quad -\left[\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}\right] + y_i = e^{-x}$$

$$\Downarrow$$

$$-y_{i-1} + \left(2 + h^2\right) y_i - y_{i+1} = h^2 e^{-x_i}$$

Portanto,

$$\begin{cases} y_0 = 1 \\ -y_{i-1} + \left(2 + h^2\right) y_i - y_{i+1} = h^2 e^{-x_i} \qquad i = 1, 2, 3 \ldots N-2 \\ y_{N-1} = 2 \end{cases}$$

Resolvendo o sistema:

Para i=0: $y_0 = 1$

Para i=1: $-y_0 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_1 - y_2 = 0{,}1^2 e^{-0,6}$

Para i=2: $-y_1 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_2 - y_3 = 0{,}1^2 e^{-0,7}$

Para i=3: $-y_2 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_3 - y_4 = 0{,}1^2 e^{-0,8}$

Para i=4: $-y_3 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_4 - y_5 = 0{,}1^2 e^{-0,9}$

Para i=5: $-y_4 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_5 - y_6 = 0{,}1^2 e^{-1}$

Para i=6: $-y_5 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_6 - y_7 = 0{,}1^2 e^{-1,1}$

Para i=7: $-y_6 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_7 - y_8 = 0{,}1^2 e^{-1,2}$

Para i=8: $-y_7 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_8 - y_9 = 0{,}1^2 e^{-1,3}$

Para i=9: $-y_8 + \left(2 + 0{,}1^2\right) y_9 - y_{10} = 0{,}1^2 e^{-1,4}$

Para i=10: $y_{10} = 2$

$$
\begin{aligned}
y_0 &= 1 \\
-y_0 + (2{,}01) y_1 - y_2 &= 0{,}01 e^{-0,6} \\
-y_1 + (2{,}01) y_2 - y_3 &= 0{,}01 e^{-0,7} \\
-y_2 + (2{,}01) y_3 - y_4 &= 0{,}01 e^{-0,8} \\
-y_3 + (2{,}01) y_4 - y_5 &= 0{,}01 e^{-0,9} \\
-y_4 + (2{,}01) y_5 - y_6 &= 0{,}01 e^{-1} \\
-y_5 + (2{,}01) y_6 - y_7 &= 0{,}01 e^{-1,1} \\
-y_6 + (2{,}01) y_7 - y_8 &= 0{,}01 e^{-1,2} \\
-y_7 + (2{,}01) y_8 - y_9 &= 0{,}01 e^{-1,3} \\
-y_8 + (2{,}01) y_9 - y_{10} &= 0{,}01 e^{-1,4} \\
y_{10} &= 2
\end{aligned}
$$

Transformando para uma matriz de equações:

$$
\begin{aligned}
&y_0 = 1 \\
&-y_{i-1} + \left(2 + h^2\right) y_i - y_{i+1} = h^2 e^{-x_i} \qquad i = 1, 2, 3 \ldots N-2 \\
&y_{N-1} = 2
\end{aligned}
$$

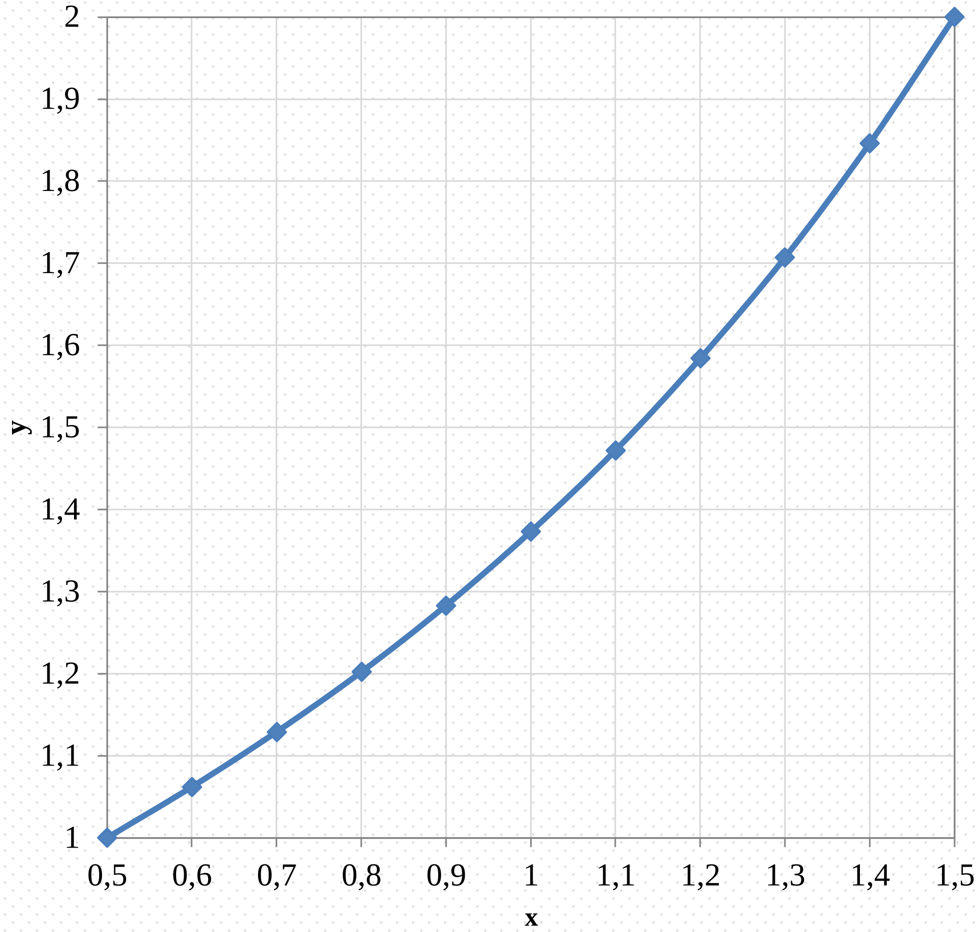
$$
\underbrace{\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-1 & 2{,}01 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & 2{,}01 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2{,}01 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -1 & 2{,}01 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2{,}01 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2{,}01 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2{,}01 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2{,}01 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2{,}01 & -2 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}}_{\text{A}}
.
\underbrace{\begin{bmatrix}
y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \\ y_9 \\ y_{10}
\end{bmatrix}}_{\text{u}}
=
\underbrace{\begin{bmatrix}
1 \\ 0{,}01e^{-0{,}6} \\ 0{,}01e^{-0{,}7} \\ 0{,}01e^{-0{,}8} \\ 0{,}01e^{-0{,}9} \\ 0{,}01e^{-1} \\ 0{,}01e^{-1{,}1} \\ 0{,}01e^{-1{,}2} \\ 0{,}01e^{-1{,}3} \\ 0{,}01e^{-1{,}4} \\ 2
\end{bmatrix}}_{\text{b}}
$$

Para resolver a matriz u, basta calcular:

$$u = b.A^{-1}$$

https://matrixcalc.org/pt/

$$\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \\ y_9 \\ y_{10} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1,062 \\ 1,129 \\ 1,202 \\ 1,283 \\ 1,373 \\ 1,472 \\ 1,584 \\ 1,707 \\ 1,846 \\ 2 \end{bmatrix}$$



Exemplo 6

- Use o método de diferenças finitas para resolver o seguinte problema de valor de contorno:

$$\begin{cases} -y''+2y'-\dfrac{y}{3}-\cos(x)-x=0 \\ y(0)=100 \\ y(1)=25 \end{cases}$$

Lista de Exercícios III

www.irineupetri.com