

Aula 6 - EDO-PVI

Ardson dos S. Vianna Jr.

Departamento de Engenharia Química - USP

15 de fevereiro de 2021



- 1 Sumário
- 2 Introdução
- 3 Método de múltiplos passos, gênese
- 4 Fórmula final
- 5 Conclusões

Introdução



As equações diferenciais ordinárias com problema de valor inicial (EDO-PVI) podem ser representadas por:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \text{em } x = 0 \quad y = y_0 \quad (1)$$

Integral



$$dy = f(x, y) dx \quad \rightarrow \quad \int_i^{i+1} dy = \int_i^{i+1} f(x, y) dx$$

O lado esquerdo é calculado pela teoria geral do cálculo, ou pode ser visto com a inversa da inversa, que resgata o integrando:

$$y_{i+1} - y_i = \int_i^{i+1} f(x, y) dx$$

Integral - quadratura

Uma forma de calcular uma integral numericamente é por meio de quadratura numérica:



$$I = \int_a^b w(x) f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n p_i f(x_i) \quad (2)$$

onde p_i são os pesos da quadratura e x_i são os pontos de quadratura.

exemplo: fórmula do trapézio, área sob a reta, um trapézio de base $(b-a)$ e bases $b=f(a)$ e $B=f(b)$:

$$I = \int_a^b w(x) f(x) dx \simeq \frac{f(a) + f(b)}{2} (b - a) \quad (3)$$

Um outro caminho é interpolar pelos pontos (x_i, u_i) um polinômio.

$$L(x) = \sum_{j=0}^k y_j l_j(x) \quad (4)$$



$$l_j(x) = \prod_{i=0, i \neq j}^k \frac{x - x_i}{x_j - x_i} \quad (5)$$

Vamos gerar a fórmula mais simples que usa somente dois pontos $(x_i, u_i), (x_{i-1}, u_{i-1})$. O polinômio interpolador que passa por estes pontos é dado por:

$$p_1(x) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} f[x_i, u_i] + \frac{x_i - x}{x_i - x_{i-1}} f[x_{i-1}, u_{i-1}] \quad (6)$$

Vamos gerar a fórmula mais simples $(x_i, u_i), (x_{i-1}, u_{i-1})$. O polinômio interpolador é dado por:



$$p_1(x) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} f[x_{i-1}, u_{i-1}] + \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} f[x_i, u_i] \quad (7)$$

Substituindo na Eq. 2, vem:

$$y_{i+1} - y_i \simeq \int_i^{i+1} \left\{ \frac{x - x_i}{-h} f[x_i, u_i] + \frac{x - x_{i-1}}{h} f[x_{i-1}, u_{i-1}] \right\} dx \quad (8)$$

$$u_{i+1} - u_i = \left\{ \frac{-1}{2} \frac{(x - x_i)^2}{h} f[x_i, u_i] + \frac{(x - x_{i-1})^2}{2h} f[x_{i-1}, u_{i-1}] \right\} \Big|_i^{i+1} \quad (9)$$

método de Adams-Moulton de 3ª ordem:



$$u_{i+1} = u_i + \frac{3h}{2}f[x_i, u_i] - \frac{h}{2}f[x_{i-1}, u_{i-1}] \quad (10)$$

$$u_{i+1} = u_i + \frac{h}{12}[23u'_i - u'_{i-1} + 5u'_{i-2}] \quad (11)$$

Método de múltiplos passos



Na verdade, os métodos de passos múltiplos efetivamente utilizados são os que também adotam a estratégia de predição-correção. O método de Adams-Bashforth de terceira ordem é:

$$\begin{cases} u_{i+1}^* = u_i + \frac{h}{12} [23u'_i - 16u'_{i-1} + 5u'_{i-2}] \\ u_{i+1} = u_i + \frac{h}{12} [5u'_{i+1} + 8u'_i - u'_{i-1}] \end{cases}$$

Conclusões



- i. Um ponto x mais pontos
- ii. Preditor-corretor
- iii. Tempo de máquina

Bibliografia



-  A.S. Vianna Jr., *Equações Diferenciais*, Blucher, 2021.
-  M.E. Davis, *Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers*, John Wiley & Sons, 1984.
-  R.G. Rice, D.D. Do, *Applied Mathematics and modeling for Chemical Engineers*, 2nd edition, Wiley-AIChE, 2012.