LABORATORUL NR. 3
1. SOLUTIONAREA NUMERICA A ECUATIILOR DIFERENTIALE

1.1. Ecuaţii diferenţiale ordinare

b. ***Metoda explicită Euler***

Una din cele mai simple metode de integrare numerică este metoda Euler.
Fie ecuaţia diferenţială de ordinul I şi condiţia la limită:

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = y'(x) = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \tag{1}$$

Dezvoltarea în serie Taylor:

$$y(x+\Delta x) = y(x) + \Delta x \cdot y'(x) + \frac{\Delta x^2}{2} \cdot y''(x) + \frac{\Delta x^3}{3!} \cdot y'''(x) + \ldots \tag{2}$$

poate fi scrisă pentru $x = x_i$:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta x \cdot f_i + \frac{\Delta x^2}{2} \cdot f_i' + \frac{\Delta x^3}{3!} \cdot f_i'' + \ldots \tag{3}$$

Neglijând termenii în Δx^2 şi superiori se ajunge la formula lui Euler :

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + \Delta x \cdot f(x_i, y_i)} \tag{4}$$

Deducerea acestei formule poate fi realizată şi grafic. Considerăm pe axa *OX* punctele x_1, x_2, …, x_i, x_{i+1}, …, luate la distanţe egale între ele. Distanţa dintre puncte se va nota cu ***Δx*** şi se va numi ***pas de integrare***.

Din datele iniţiale ale problemei se observă că pentru x_0 se cunoaşte valoarea funcţie, aceasta fiind y_0. Cunoscând că în punctul x_i valoarea funcţiei este y_i, ne propunem să calculăm valoarea funcţiei în punctul x_{i+1} (vrem să calculăm pe y_{i+1}).

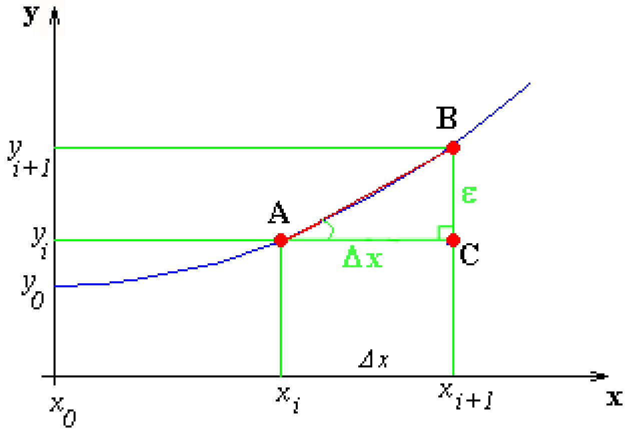

Figura 1. Deducerea formulei lui Euler

Considerând că pasul Δx este foarte mic, putem aproxima curba AB cu un segment $\Rightarrow$ vom avea un triunghi dreptunghic ΔABC.

$$tgA = \frac{BC}{AC} = \frac{\varepsilon}{\Delta x} = f(x_i, y_i) \;\Rightarrow\; \varepsilon = \Delta x \cdot f(x_i, y_i) \qquad (5)$$

$$\varepsilon = y_{i+1} - y_i \qquad (6)$$

$$\xrightarrow{(5)\ si\ (6)} \; y_{i+1} - y_i = \Delta x \cdot f(x_i, y_i)$$

$$y_{i+1} = y_i + \Delta x \cdot f(x_i, y_i)$$

Exemplul 1.

Să se rezolve următoarea ecuaţie diferenţială $\boldsymbol{y' = x + 2y}$, ştiind că soluţia iniţială este $\boldsymbol{y(0) = 0}$, iar x variază în intervalul [0,1] cu pasul $\boldsymbol{\Delta x = 0{,}25}$.

Rezolvare:

Pentru a înţelege principiul metodei Euler, rezolvarea se va face pas cu pas.

Din datele problemei rezultă că: $f(x, y) = x + 2y$ şi $x_0 = 0$, iar $y_0 = 0$.

După identificarea datelor iniţiale se va folosi metoda Euler pentru a genera, din aproape în aproape, valorile pentru x_1, y_1; x_2, y_2; … până la parcurgerea întregului interval pe axa x.

Formula generală a metodei Euler este $y_{i+1} = y_i + \Delta x \cdot f(x_i, y_i)$.

Pentru i =0 vom avea :

$$x_1 = x_0 + \Delta x = 0 + 0{,}25 = 0{,}25$$

$$y_1 = y_0 + \Delta x \cdot f(x_0, y_0) = y_0 + \Delta x \cdot (x_0 + 2 \cdot y_0) = 0 + 0{,}25 \cdot (0 + 2 \cdot 0) = 0$$

Pentru i =1 vom avea :

$$x_2 = x_1 + \Delta x = 0{,}25 + 0{,}25 = 0{,}5$$

$$y_2 = y_1 + \Delta x \cdot f(x_1, y_1) = y_1 + \Delta x \cdot (x_1 + 2 \cdot y_1) = 0 + 0{,}25 \cdot (0{,}25 + 2 \cdot 0) = 0{,}0625$$

Pentru i =2 vom avea :

$$x_3 = x_2 + \Delta x = 0{,}5 + 0{,}25 = 0{,}75$$

$$y_3 = y_2 + \Delta x \cdot f(x_2, y_2) = y_2 + \Delta x \cdot (x_2 + 2 \cdot y_2) = 0{,}0625 + 0{,}25 \cdot (0{,}5 + 2 \cdot 0{,}0625) = \\ = 0{,}21875$$

Pentru i =3 vom avea :

$$x_4 = x_3 + \Delta x = 0{,}75 + 0{,}25 = 1$$

$$y_4 = y_3 + \Delta x \cdot f(x_3, y_3) = y_3 + \Delta x \cdot (x_3 + 2 \cdot y_3) = \\ = 0{,}21875 + 0{,}25 \cdot (0{,}75 + 2 \cdot 0{,}21875) = 0{,}515625$$

Dacă centralizăm rezultatele obţinute într-un tabel obţinem:

i	x_i	y_i
0	0,00	0,000000
1	0,25	0,000000
2	0,50	0,062500
3	0,75	0,218750
4	1,00	0,515625

De fiecare dată când rezolvăm o problemă folosind o metodă numerică ne întrebăm cât de corectă este soluţia obţinută.

Pentru exemplul considerat, ecuaţia care generează derivata noastră este:

$y = 0{,}25\, e^{2x} - 0{,}5\, x - 0{,}25$

Dacă calculăm valoarea lui y, cu această formulă şi pentru valorile lui x din metoda numerică, vom obţine următoarele rezultate:

x	y
0,00	0,000000
0,25	0,037180
0,50	0,179570
0,75	0,495422
1,00	1,097264

Reprezentând comparativ rezultatele din cele două tabele obţinem figura 2 (linia continuă reprezintă soluţia reală, iar punctele soluţia numerică):

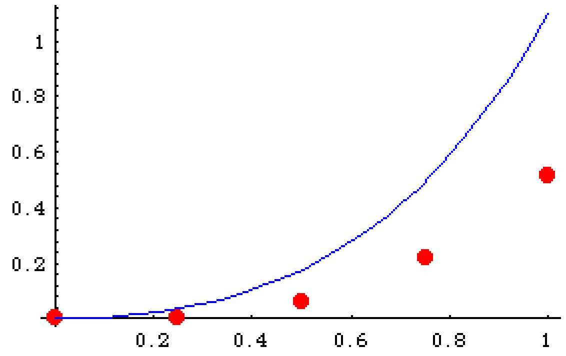

Figura 2. Reprezentarea comparativă a soluţie reale şi a celei numerice pentru ecuaţia din exemplul 1, pas de integrare = 0,25

Din figură se observă că soluţia numerică este din ce în ce mai îndepărtată de cea reală pe măsură ce înaintăm pe axa x. De aici, este evident că rezultatul obţinut este incorect. **Motivul pentru care soluţia numerică generează erori atât de mari este valoarea pasului de integrare. Cu cât pasul de integrare este mai mic, cu atât valoarea numerică va fi mai apropiată de valoarea reală.**

Pentru a demonstra influenţa pasului de integrare asupra rezultatelor obţinute, în figura 3 este reprezentată soluţia reală şi noua soluţie numerică pentru un pas de integrare egal cu 0,02.

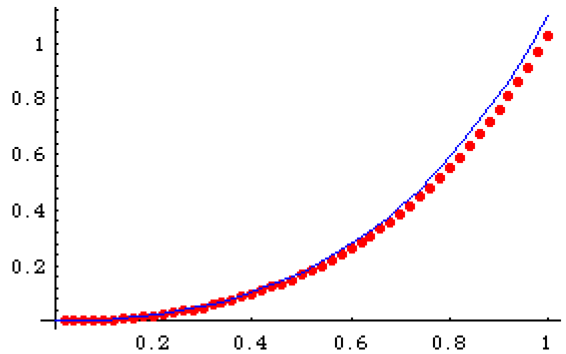

Figura 3. Reprezentarea comparativă a soluţie reale şi a celei numerice pentru ecuaţia din exemplul 1, pas de integrare = 0,02

Se observă că acurateţea rezultatelor este mult mai ridicată.

Obs. Un pas de integrare mic înseamnă foarte multe valori de calculat, respectiv impune utilizarea unor limbaje de programare (Matlab).

Exemplul 2 : Să se stabilească un program care, pe baza ecuaţiei diferenţiale de ordinul I ce descrie dinamica evoluţiei nivelului (h(t)) într-un rezervor cu scurgere liberă, să determine evoluţia nivelului pentru o modificare sub forma de semnal treaptă a debitului de alimentare.

Ecuaţia diferenţială de ordinul I ce descrie dinamica evoluţiei nivelului (h(t)) într-un rezervor cu scurgere liberă în cazul modificării debitului de intrare este:

$$T_t * h'(t) + h(t) = K * dq \quad (7)$$

Unde: dq – variaţia debitului, T_t- constanta de timp, K – coeficientul de transfer.
dq=0,2 ; T_t=20 ; K=2 ; la t=0, h0=0,5, iar limita superioară în timp până la care se urmăreşte evoluţia lui h este de 100 secunde. Pasul pe axa timpului se consideră dt = 2.

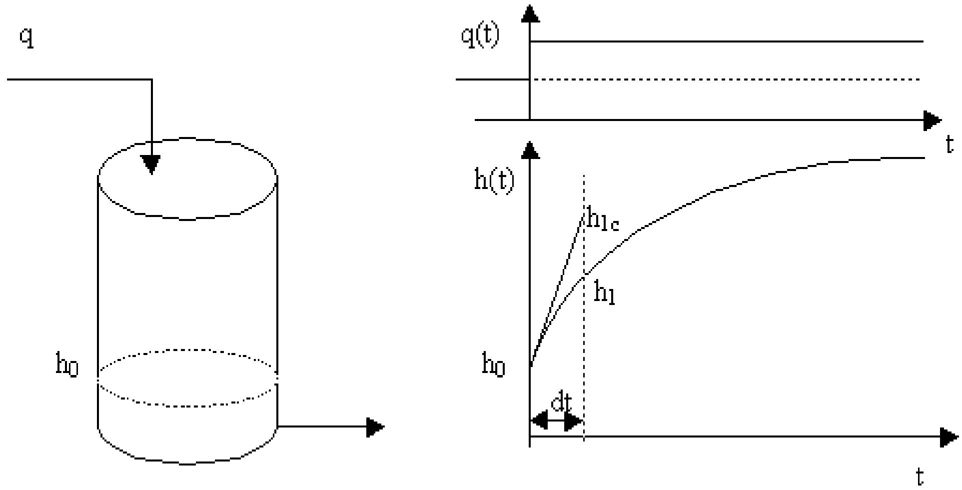

Figura 4. Rezervor hidraulic cu scurgere liberă : evoluţia nivelului ca urmare a modificării debitului sub forma de semnal treaptă. Principiul metodei Euler.

In acest caz, y=h; x=t, iar expresia derivatei este :

$$f(x,y) = y'(x) = f(h,t) = h'(t) = (K*dq-h)/T_t \quad (8)$$

Condiţia iniţială este $h(t=0) = h_0 = 0,5$.
Dacã se face pe axa t un pas de valoare dt, conform metodei Euler se poate calcula (aproxima) valoarea lui h cu relaţia:

$$h_{i+1} = h_i + f(h_i, t_i) \cdot dt \quad (9)$$

unde : $t_n = n \cdot dt$

Programul de mai jos, construit pe baza unui ciclu « while », reţine valorile succesive ale timpului şi nivelului în vectorii hvect şi tvect. Algoritmul de soluţionare numerică este prezentat în figura 5.

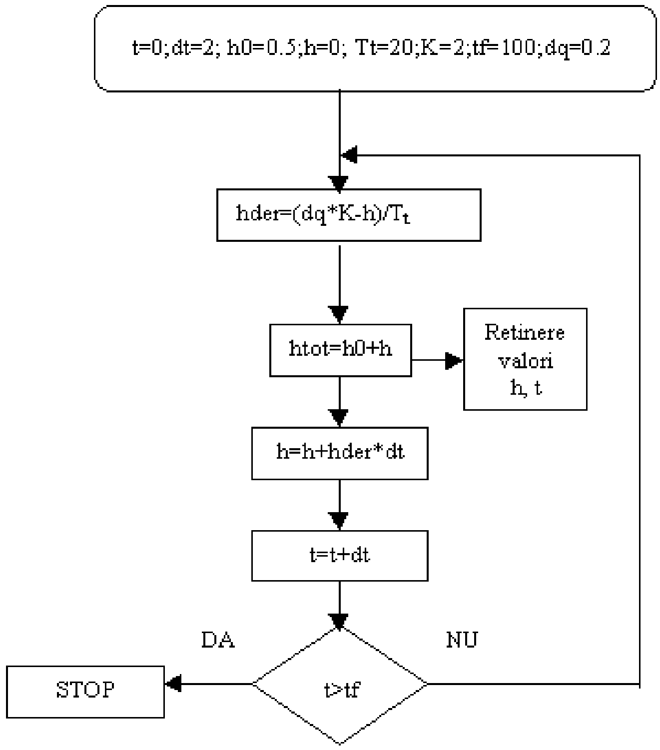

Figura 5. Ordinograma de soluţionare prin metoda Euler a ecuaţiei 2

```
%dinamica evolutiei nivelului intr-un rezervor cu scurgere libera - Metoda Euler
%valori initiale, pas, contor, timp final
h0=0.5;h=0;t=0;dt=2;n=1;tf=100;
%coeficientul de transfer, constanta de timp, valoare salt
K=2;Tt=20;dq=0.2;
while t<=tf
   %derivata
   hder=(dq*K-h)/Tt;
   htot=h0+h;
   hvect(n)=htot;
   tvect(n)=t;
   %Euler:
   h=h+hder*dt;
   t=t+dt;
   n=n+1;
end;
plot(tvect, hvect, 'r*');grid;
title('Evolutia nivelului intr-un rezervor cu scurgere libera');
xlabel('timp t, [s]');
ylabel('nivel h, [cm]');
```

In figura 6 sunt prezentate, comparativ, rezultatele obţinute prin utilizarea a doi paşi de integrare diferiţi(2 şi 10). Se pot constata erorile generate de un pas de integrare mare.

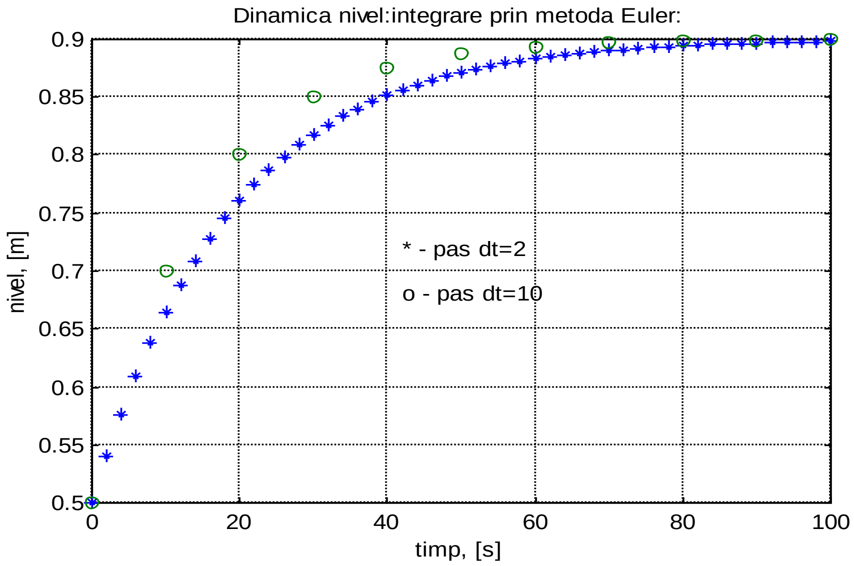

Figura 6. Efectul pasului de integrare asupra preciziei metodei Euler.

a. ***Funcţii Matlab pentru integrarea numerică a ecuaţiilor diferenţiale***

Funcţiile MATLAB pentru integrarea numerică a ecuaţiilor diferenţiale se bazează pe metoda Runge – Kutta pentru rezolvarea ecuaţiilor diferenţiale de ordinul I şi a ecuaţiilor de ordin superior prin conversia lor în sisteme de ecuaţii diferenţiale de ordinul I.

Funcţiile pentru integrarea numerică a ecuaţiilor de ordinul I sunt:

ode23 – rezolvă ecuaţii diferenţiale prin metoda Runge – Kutta de ordin 2/3;

ode45 – rezolvă ecuaţii diferenţiale prin metoda Runge – Kutta de ordin 4/5;

Sintaxe:

[x,y]=ode23('yprim',x0,xf,y0) sau [x,y]=ode23('yprim',tspan,yo)

[x,y]=ode45('yprim',x0,xf,y0) sau [x,y]=ode45('yprim',tspan,yo)

Unde: yprim – o variabilă şir cu numele unui fişier M care defineşte derivata funcţiei necunoscute y;

x0 – valoarea iniţială a variabilei x;

xf – valoarea finală a variabilei x;

tspan – vector linie care conţine limitele intervalului pe care este definită variabila x;

y0 – un vector coloană conţinând condiţiile iniţiale.

Utilizând funcţiile ode se poate obţine atât soluţia numerică cât şi cea analitică a ecuaţiei diferenţiale.

Exemplul 1:

Să se integreze ecuaţia diferenţială $y' = 3 \cdot x^2$, pe intervalul [2,4] cu condiţia iniţială y(2) = 0,5. Soluţia analitică este ya=x^3-7,5. Să se reprezinte grafic comparativ soluţia numerică şi cea analitică.

Rezolvare:

Etapa 1: Se creează un fişier funcţie cu numele g1.m şi se transcrie în limbaj Matlab expresia matematică a funcţiei:

```
function dy=g1(x,y);
dy=3*x^2;
```

Etapa 2: Apelăm funcţia g1.m cu secvenţa:

```
[x,y]=ode23('g1',2,4,0.5);
ya=x.^3-7.5;
plot(x,y,’or’,x,ya,’-.b’);grid;
title('Solutionare cu functia ode23');
xlabel('x');
ylabel('y numeric si analitic')
```

varianta 2:

```
tspan=[2,4];y0=0.5;
[x,y]=ode23('g1',tspan,y0);
ya=x.^3-7.5;
plot(x,y,'go:',x,ya,'rd-');grid;xlabel('x');ylabel('y')
```

PROBLEME

1. Să se integreze, folosind funcţia ode23, ecuaţia diferenţială $y' = -0.1 \cdot y$ pe intervalul [0,5] cu condiţia iniţială y(0) = 4. Soluţia analitică este $ya = 4 \cdot e^{-0,1x}$. Să se reprezinte grafic comparativ soluţia numerică şi cea analitică.

2. Să se integreze, folosind funcţia ode23, ecuaţia diferenţială $y' = 3y + e^{2x}$ pe intervalul [0,2] cu condiţia iniţială y(0) = 3. Soluţia analitică este $ya = 4 \cdot e^{3x} - e^{2x}$. Să se reprezinte grafic comparativ soluţia numerică şi cea analitică.

3. Un sistem este descris de următoarea ecuaţie diferenţială: $0{,}5e'(t) + e(t) = i(t)$. Să se stabilească evoluţia mărimii de ieşire, dacă mărimea de intrare i se modifică sub formă de semnal treaptă unitară pe intervalul de timp 0 – 4 minute, cu condiţia iniţială e(0) = 0.

PROBLEME

1. Reactorul de tip şarjă (BATCH Reactor) – în acest reactor toţi reactanţii sunt introduşi în momentul iniţial, iar când reacţia se încheie, reactorul este golit şi pregătit pentru o nouă şarjă.

Se consideră un reactor tip şarjă cu amestecare perfectă în care are loc reacţia:

$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$, k_1, k_2 - constante de viteză de reacţie, [1/s];

Din bilanţul de materiale pentru fiecare component rezultă următoarele ecuaţii de variaţie a concentraţiei componenţilor în timp:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A \\ \dfrac{dC_B}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B \\ \dfrac{dC_C}{dt} = k_2 \cdot C_B \end{cases}$$

Pentru o temperatură constantă în reactor, să se calculeze variaţia concentraţiilor C_A, C_b, C_C în timp ştiind că: C_A = 2 kmol/m^3, k_1 = 10 l/h, k_2 = 7,5 l/h, V_r = 1 m^3, reacţia durează o oră, iar pasul de integrare se consideră dt = 0,001 h.

2. Reactorul tubular - curgere tip piston, regim staţionar

Se consideră un reactor tubular, curgere tip piston în care au loc reacţiile:

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$$

Ecuaţiile bilanţurilor de materiale pe componenţi sunt:

$$\frac{dC_A}{dh} = -\frac{k_1 \cdot C_A}{w}$$

$$\frac{dC_B}{dh} = \frac{k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B}{w}$$

$$\frac{dC_C}{dh} = \frac{k_2 \cdot C_B}{w}$$

unde :

$$k_1 = k_{10} \cdot e^{-\frac{E_1}{R \cdot T}}$$

$$k_2 = k_{20} \cdot e^{-\frac{E_2}{R \cdot T}}$$

In relaţiile de mai sus:

k_1, k_2 = constantele de viteză de reacţie, [1/s];

k_{10} = 2*10^5; k_{20} == 6*10^5

E_1 = 30000; E_2 = 35000 - energii de activare, [kJ/kmol];

R = 8.314 [kJ/K/kmol];

T_K = T_C + 273, [K]

Valori numerice ale parametrilor modelului:

C_A = 2,5 [kmol/m^3] - Concentraţia iniţială;

T_C = 25 [^{0}C] + temperatura iniţială;

F= 1 [m^3/h] + debitul de fluid;

D = 0,02 [m] + diametrul reactorului;

h = 0; hf = 2 [m] – lungimea reactorului;

dh = 0,01 – pasul;

$$w = \frac{F}{S} = \frac{F}{\frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot 3600}$$ [m/s] – viteza fluidului;

Să se reprezinte evoluţia concentraţiilor molare ale componenţilor în lungimea reactorului tubular.