

Uma das possíveis alternativas para a redução do tempo computacional necessário para a simulação dinâmica de modelos de processo envolve o uso de métodos numéricos mais eficientes para a simulação do problema, ou seja, métodos que representem formas alternativas de resolução de problemas de valor inicial. O presente projeto objetiva a exploração e teste de alguns destes métodos alternativos (semi-analíticos) para resolução de problemas dinâmicos de interesse da Engenharia Química. Um exemplo deste tipo de técnica que despertou atenção renovada na literatura é a da integração da série de Taylor (Taylor Series Integration), principalmente em função do surgimento de algoritmos para diferenciação automática de sistemas de equações. Neste método, a solução é obtida por integração da expansão de Taylor da solução do problema, truncada após alguns termos.

Neste projeto, rotinas para integração de problemas de valor inicial (PVI) utilizando esta técnica foram implementadas em diferentes ambientes de programação (MATLAB e Python) e estudadas em termos de desempenho computacional (tempo necessário para o cálculo) e praticidade de utilização. Para realizar esta tarefa, modelos dinâmicos previamente desenvolvidos e pertinentes à Engenharia Química serviram de suporte. No que diz respeito ao cálculo das derivadas necessárias (matrizes Jacobiana e Hessiana) e à consequente obtenção da expansão de Taylor da solução do problema, foram utilizadas duas abordagens. Primeiramente, pacotes de diferenciação automática tais como ALGOPY foram testados. Em seguida, os resultados foram comparados com a derivação numérica via diferenças finitas. A técnica desenvolvida foi posteriormente adaptada para possibilitar a resolução de problemas mais genéricos e reduzir o tempo de cálculo.

No ambiente Python, a rotina de integração via série de Taylor com derivadas via diferenças finitas mostrou os melhores resultados, com desempenho comparável aos *solvers* disponíveis (*odeint*) e aos métodos clássicos para a resolução de problemas de valor inicial (Runge-Kutta de quarta ordem). Adaptações do tipo ajuste de passo podem ajudar a aumentar ainda mais a eficiência e torná-lo interessante para a simulação dinâmica rápida de processos da indústria química.