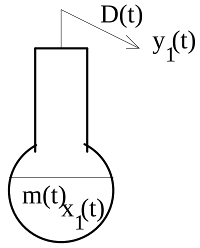
1º-) Um balão de destilação aberto a atmosfera contem uma mistura binária com massa total [m_0] e composição conhecida em t=0. Exatamente em t=0_+ a solução passa a destilar, com a composição da fase vapor em equilíbrio com a composição da fase líquida, expressa pela relação de equilíbrio termodinâmico : y_1 =f[x_1], sendo "1" o componente mais volátil. Deseja-se saber a composição da mistura líquida no balão no instante em que contiver uma massa total conhecida [m_{final} <m_0] .



$$\frac{dx_1(\tau)}{d\tau} = -\left[\frac{f[x_1(\tau)] - x_1(\tau)}{\alpha - \tau}\right]$$ sujeita à condição inicial: $x_1(0)=x_{1,0}$.

onde: $\alpha = \dfrac{m_0}{m_0 - m_{final}} > 1$

Procedendo a integração de τ=0 a τ=1, o resultado buscado é o valor de x_1 em τ=1.

Considere o problema para a destilação de uma mistura binária de n-octano e n-heptano conduzida à pressão atmosférica. Sabendo-se que no início da batelada o balão contém 25 moles de n-octano e 75 moles de n-heptano[m_0=100 moles], que no tempo final o balão contém 10 moles da mistura [m_{final} =10 moles] e que à pressão atmosférica a relação de equilíbrio entre a composição molar do n-heptano na fase líquida e na fase vapor é dada por:

$$y_1 = f(x_1) = \frac{2.16 \cdot x_1}{1 + 1.16 \cdot x_1}.$$

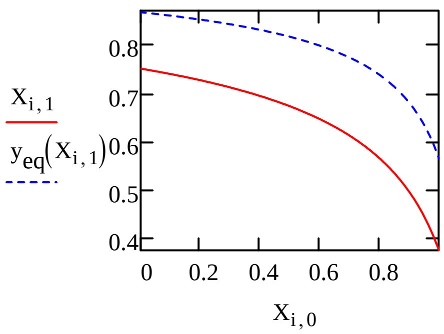
$TOL := 10^{-9}$ $\qquad \alpha := \dfrac{100}{100 - 10}$ $\qquad y_{eq}(x) := \dfrac{2.16 \cdot x}{1 + 1.16 \cdot x}$

$$D(t,x) := \left| \begin{array}{l} y \leftarrow y_{eq}(x_0) \\ D_0 \leftarrow -\dfrac{y - x_0}{\alpha - t} \\ D \end{array} \right.$$

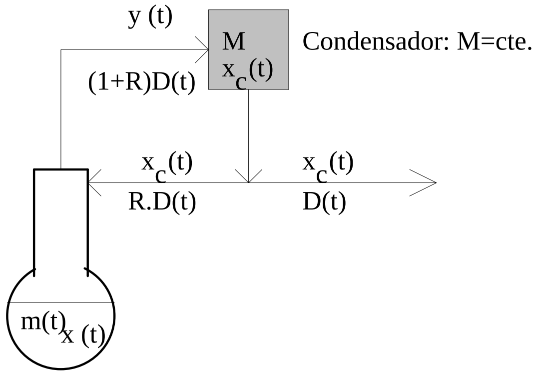
$x_0 := .75$ $\qquad x = (0.75)$

$n := 200$

$X := Rkadapt(x, 0, 1, n, D)$ $\qquad X_{n,1} = 0.375218$ $\qquad i := 0 .. n$



2^0-) Considere o balão de destilação do primeiro exercício com um condensador na saída do vapor, em acordo com a figura abaixo:



onde as composições indicadas referem-se ao n-heptano. Os balanços molares (em forma adimensional) do sistema são dados por:

$$\frac{dx_c(\tau)}{d\tau} = \frac{(1+R)}{\lambda \cdot \alpha} \cdot [y(\tau) - x_c(\tau)] \quad \text{e} \quad \frac{dx(\tau)}{d\tau} = -\frac{[x_c(\tau) - x(\tau)] + (1+R) \cdot [y(\tau) - x_c(\tau)]}{\alpha - \tau}$$

para : $0 < \tau \le 1$, em $\tau = 0 \rightarrow x(0)=0.75$ e $x_c(0)=0.85$;

Onde: $\alpha = \dfrac{m_0}{m_0 - m_{final}} = \dfrac{10}{9}$; $R = 0.3$; $\lambda = \dfrac{M}{m_0} = 0.1$ e $y = \dfrac{2.16 \cdot x}{1 + 1.16 \cdot x}$

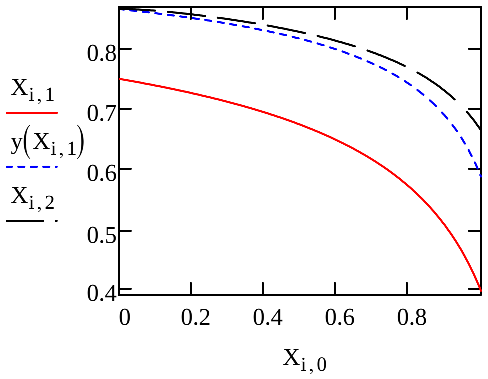
$TOL := 10^{-9} \qquad \alpha := \dfrac{10}{9} \qquad R := .3 \qquad \lambda := .1 \qquad y(x) := \dfrac{2.16 \cdot x}{1 + 1.16 \cdot x}$

$$D(\tau, x) := \left| \begin{array}{l} y \leftarrow \dfrac{2.16 \cdot x_0}{1 + 1.16 \cdot x_0} \\ \Delta \leftarrow (1 + R) \cdot (y - x_1) \\ D_0 \leftarrow -\left[\dfrac{(x_1 - x_0) + \Delta}{\alpha - \tau}\right] \\ D_1 \leftarrow \dfrac{\Delta}{\lambda \cdot \alpha} \\ D \end{array} \right.$$

$x_0 := .75 \qquad x_1 := y(x_0) \qquad x^T = (0.75 \quad 0.866)$

$D(0, x)^T = (-0.105 \quad 0)$

$X := \text{Rkadapt}(x, 0, 1, 200, D) \qquad i := 0 .. 200$



$X_{200,1} = 0.397$

$y(X_{200,1}) = 0.587$

$X_{200,2} = 0.664$

3º-) Considere o modelo cinético da reação reversível: $A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B$ conduzida em batelada em um reator de mistura, iniciando-se com o componente A puro. A variação da concentração de A com o tempo é descrito (em forma adimensional) pela EDO:

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = -\left(1+\frac{k_1}{k_2}\right)\cdot x(\tau) \quad \text{com } x(\tau)\big|_{\tau=0} = 1.$$

Com : k_1/k_2=1000 obtenha $x_1(\tau)$ aplicando o método de Euler explícito com intervalo de integração constante. Repita o procedimento com o método de Euler implícito.

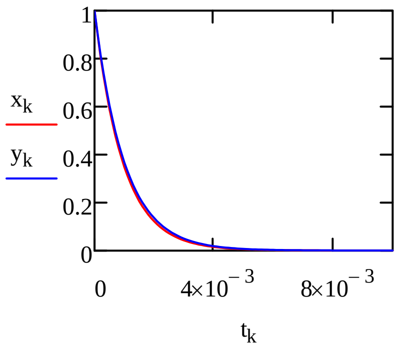
$t_{final} := 10^{-2}$ $\quad h := 10^{-4}$ $\quad N := \frac{t_{final}}{h}$ $\quad N = 100$ $\quad \lambda := 1001$ $\quad x_{exato}(t) := \exp(-\lambda\cdot t)$

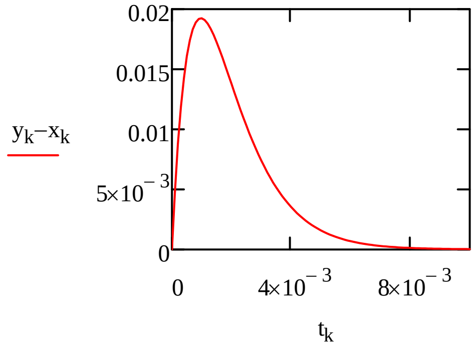
(a) Método de Euler Explícito

$p := \exp(-\lambda\cdot h)$

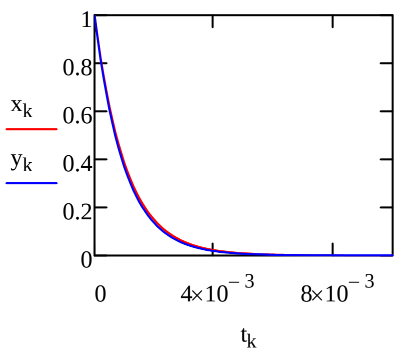
$F(x) := (1 - \lambda\cdot h)\cdot x$

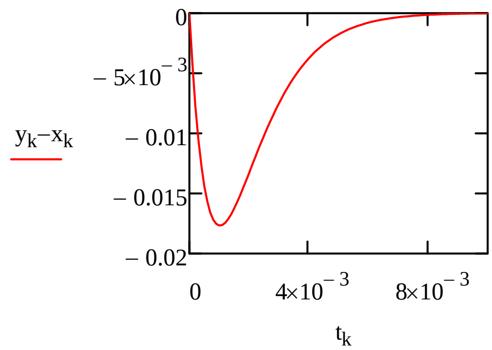
$t_0 := 0 \quad x_0 := 1 \quad k := 1..N \quad t_k := k\cdot h \quad x_k := F(x_{k-1}) \quad y_0 := 1 \quad y_k := p\cdot y_{k-1} \quad k := 0..N$





(b) Método de Euler Implícito $\quad F(x) := \frac{x}{(1+\lambda\cdot h)} \quad k := 1..N \quad x_k := F(x_{k-1}) \quad k := 0..N$





4º-) Considere o modelo cinético de reação: $A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B \overset{k_3}{\rightarrow} C$ conduzida em batelada em um reator de mistura, iniciando-se com o componente A puro.

A variação da concentração de A e de B com o tempo é descrito pelo sistema de EDO's:

$$\frac{dx_1(\tau)}{d\tau} = -\left(1+\frac{k_1}{k_2}\right)\cdot x_1(\tau) + x_2(\tau) \quad \text{com } x_1(\tau)\big|_{\tau=0} = 1 \text{ e}$$

$$\frac{dx_2(\tau)}{d\tau} = \frac{k_1}{k_2}\cdot x_1(\tau) - \left(1+\frac{k_3}{k_2}\right)x_2(\tau) \quad \text{com } x_2(\tau)\big|_{\tau=0} = 0$$

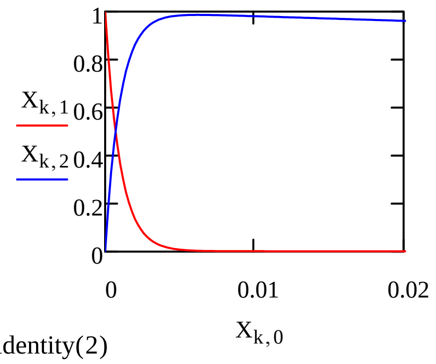
Com : k_1/k_2=1000 e k_3/k_2 = 2 obtenha $x_1(\tau)$ e $x_2(\tau)$ aplicando o método de Euler explícito com intervalo de integração constante. Repita o procedimento com o método de Euler implícito.

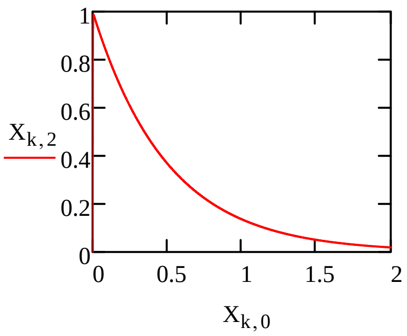
$TOL := 10^{-9}$ $K1 := 10^{3}$ $K3 := 2$

$A := \begin{bmatrix} -(1+K1) & 1 \\ K1 & -(1+K3) \end{bmatrix}$ $\lambda := \mathrm{eigenvals}(A)$ $\lambda^{T} = \begin{pmatrix} -1.002\times 10^{3} & -1.999 \end{pmatrix}$

$D(t,x) := \left| \begin{array}{l} D \leftarrow A\cdot x \\ D \end{array} \right.$

$x := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $t_{final} := 2$ $N := 10^{4}$ $X := \mathrm{Rkadapt}(x, 0, t_{final}, N, D)$ $k := 0..N$



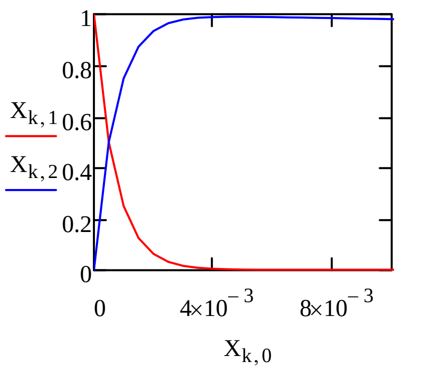


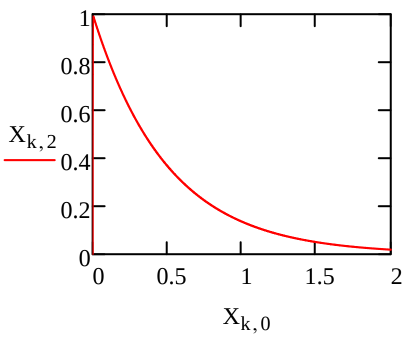
$I := \mathrm{identity}(2)$

$$Euler_{explicito}(x,h,t_{final}) := \left| \begin{array}{l} M \leftarrow I + h\cdot A \\ X \leftarrow x \\ N \leftarrow \mathrm{ceil}\left(\dfrac{t_{final}}{h}\right) \\ t_0 \leftarrow 0 \\ \text{for } i \in 1..N \\ \quad \left| \begin{array}{l} t_i \leftarrow i\cdot h \\ x \leftarrow M\cdot x \\ X^{\langle i \rangle} \leftarrow x \end{array} \right. \\ X \leftarrow X^{T} \\ X \leftarrow \mathrm{augment}(t, X) \\ X \end{array} \right.$$

$t_{final} := 2$ $h := \dfrac{10^{-3}}{2}$ $x := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $X := Euler_{explicito}(x,h,t_{final})$ $N := \mathrm{length}\left(X^{\langle 0 \rangle}\right)$ $N = 4001$

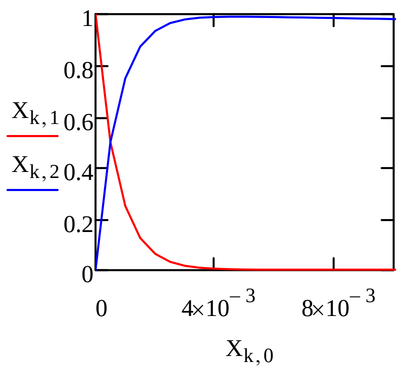
$k := 0..N$

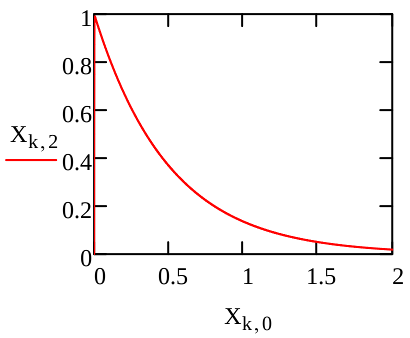




$$
\text{Euler}_{implicito}(x,h,t_{final}) := \left|
\begin{array}{l}
M \leftarrow (I - h\cdot A)^{-1} \\
X \leftarrow x \\
N \leftarrow \text{ceil}\left(\dfrac{t_{final}}{h}\right) \\
t_0 \leftarrow 0 \\
\text{for } i \in 1..N \\
\quad \left| \begin{array}{l} t_i \leftarrow i\cdot h \\ x \leftarrow M\cdot x \\ X^{\langle i\rangle} \leftarrow x \end{array}\right. \\
X \leftarrow X^T \\
X \leftarrow \text{augment}(t, X) \\
X
\end{array}\right.
$$

$t_{final} := 2$ $\quad h := \dfrac{10^{-3}}{2}$ $\quad x := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\quad X := \text{Euler}_{explicito}(x,h,t_{final})$ $\quad N := \text{length}(X^{\langle 0\rangle})$ $\quad N = 4001$ $\quad k := 0..N$





5º-) Um reator tubular conduz adiabaticamente uma reação em fase gasosa exotérmica e irreversível, as equações que descrevem as variações de concentração de reagente e da temperatura ao longo do reator são [em forma adimensional]:

Balanço do Reagente: $\dfrac{dy(x)}{dx} = -Da\cdot y(x)\cdot \exp\left[\gamma\cdot\left(1-\dfrac{1}{\theta(x)}\right)\right] \rightarrow y(0)=1$

Balanço de Energia: $\dfrac{d\theta(x)}{dx} = \beta\cdot Da\cdot y(x)\cdot \exp\left[\gamma\cdot\left(1-\dfrac{1}{\theta(x)}\right)\right] \rightarrow \theta(0)=1$

a eliminação do termo não linear nas equações acima, a integração da equação resultante e a utilização das condições de alimentação permitem chegar a:

$\theta(x) = 1+\beta[1-y(x)] \Rightarrow 1-\dfrac{1}{\theta(x)} = \dfrac{\beta[1-y(x)]}{1+\beta[1-y(x)]}$, assim o perfil de concentração pode ser descrito apenas por uma EDO:

$\dfrac{dy(x)}{dx} = -Da\cdot y(x)\cdot \exp\left\{\dfrac{\gamma\cdot\beta[1-y(x)]}{1+\beta[1-y(x)]}\right\} \rightarrow y(0)=1$

As variáveis e parâmetros adimensionais do problema são:

$x = \dfrac{z}{L}$; $y = \dfrac{C}{C_{alim}}$; $\theta = \dfrac{T}{T_{alim}}$; $Da = \dfrac{k_0\cdot L}{v_z}$; $\gamma = \dfrac{E}{R_{gas}\cdot T_{alim}}$ e $\beta = \dfrac{C_{alim}\cdot[-\Delta H]}{\rho\cdot c_P\cdot T_{alim}}$ Utilizando os dados: L=2 m; R =0.1 m [raio do rator]; C_{alim}=0.03kmol/m^3 ; T_{alim}=700K [-ΔH]=10^4 kJ/kmol; c_P = 1 kJ/(kg.K) ; E = 100kJ/kmol ; ρ= 1.2 kg/m^3, v_z = 3 m/s e k_0= 5 s^{-1}, obtenha a variação de y e θ com x.

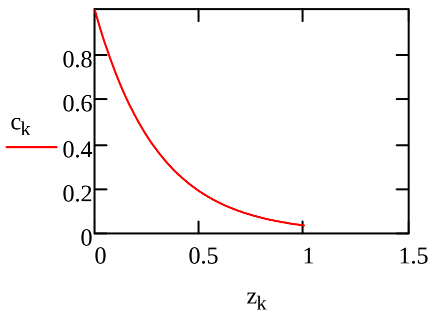
$TOL := 10^{-9}$ $\quad R_{gas} := 8.314510 \cdot \dfrac{joule}{mol \cdot K}$ $\quad L := 2 \cdot m$ $\quad R := .1 \cdot m$ $\quad C_{feed} := .03 \cdot 10^{3} \cdot \dfrac{mol}{m^{3}}$

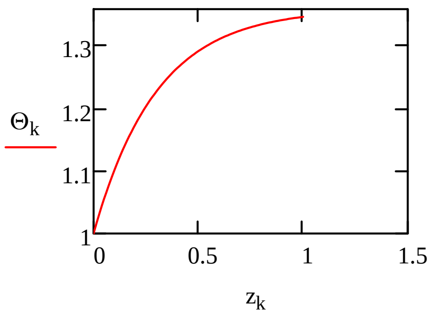
$T_{feed} := 700 \cdot K$ $\quad \Delta H := 10^{4} \cdot \dfrac{J}{mol}$ $\quad c_p := 10^{3} \cdot \dfrac{J}{kg \cdot K}$ $\quad E := 100 \cdot \dfrac{J}{mol}$ $\quad \rho := 1.2 \cdot \dfrac{kg}{m^{3}}$ $\quad k_0 := 5 \cdot \dfrac{1}{s}$ $\quad v_z := 3 \cdot \dfrac{m}{s}$

$Da := \dfrac{k_0 \cdot L}{v_z}$ $\quad \gamma := \dfrac{E}{R_{gas} \cdot T_{feed}}$ $\quad \beta := \dfrac{\Delta H \cdot C_{feed}}{\rho \cdot c_p \cdot T_{feed}}$ $\quad Da = 3.333$ $\quad \gamma = 0.017$ $\quad \beta = 0.357$

$\theta(y) := 1 + \beta \cdot (1 - y)$ $\quad R(y) := Da \cdot y \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \dfrac{1}{\theta(y)}\right)\right]$ $\quad D(t,y) := \left| \begin{array}{l} D_0 \leftarrow -R(y_0) \\ D \end{array} \right.$ $\quad u_0 := 1$

$Y := Rkadapt(u, 0, 1, 100, D)$ $\quad k := 0 .. 100$ $\quad z_k := Y_{k,0}$ $\quad c_k := Y_{k,1}$ $\quad \Theta_k := \theta(c_k)$



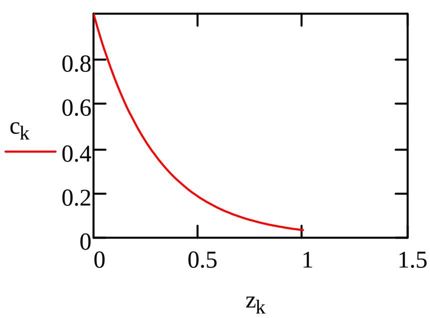


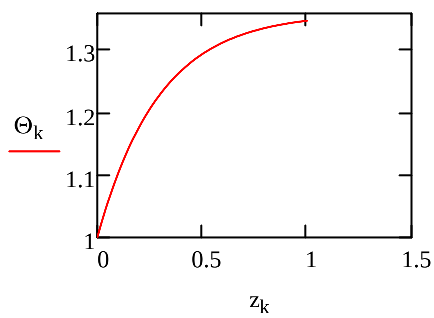
$taxa(y, \Theta) := Da \cdot y \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \dfrac{1}{\Theta}\right)\right]$

$$Euler_{explicito}(N) := \left| \begin{array}{l} h \leftarrow \dfrac{1}{N} \\ r_{0,0} \leftarrow 0 \\ r_{0,1} \leftarrow 1 \\ r_{0,2} \leftarrow 1 \\ j \leftarrow 0 \\ \text{for } i \in 1 .. N \\ \quad \left| \begin{array}{l} r_{i,0} \leftarrow r_{j,0} + h \\ r_{i,1} \leftarrow r_{j,1} - h \cdot taxa(r_{j,1}, r_{j,2}) \\ r_{i,2} \leftarrow \theta(r_{i,1}) \\ j \leftarrow j + 1 \end{array} \right. \\ r \end{array} \right.$$

$N := 100$ $\quad Y := Euler_{explicito}(N)$

$k := 0 .. N$ $\quad z_k := Y_{k,0}$ $\quad c_k := Y_{k,1}$ $\quad \Theta_k := Y_{k,2}$





6º-) Em um sistema fechado com três componentes o seguinte esquema cinético ocorre:

$$\begin{cases} A \xrightarrow{k_1} B \\ B + C \xrightarrow{k_2} A + C \\ 2 \cdot B \xrightarrow{k_3} B + C \end{cases}$$

Sendo desta forma a variação temporal da concentração dos três componentes descrita pelo sistema de

$$\text{EDO's:}\begin{cases} \dfrac{dy_1}{dt} = -k_1 \cdot y_1 + k_2 \cdot y_2 \cdot y_3 \rightarrow y_1(0) = 1 \\ \dfrac{dy_2}{dt} = k_1 \cdot y_1 - k_2 \cdot y_2 \cdot y_3 - k_3 \cdot y_2^2 \rightarrow y_2(0) = 0 \\ \dfrac{dy_3}{dt} = k_3 \cdot y_2^2 \rightarrow y_3(0) = 0 \end{cases}$$

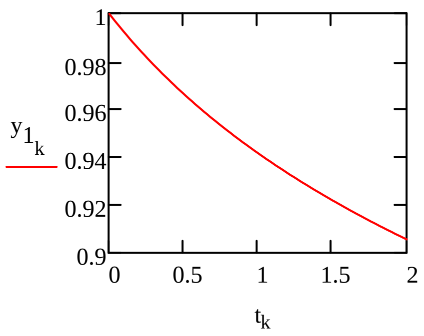
Sendo: $y_1 = C_A/C_{A,0}$; $y_2 = C_B/C_{A,0}$ e $y_3 = C_C/C_{A,0}$ .Calcule a variação de y_1 , y_2 e y_3 com t utilizando os seguintes valores das constantes cinéticas:$k_1 = .08\ s^{-1}$; $k_2 = 2.00 \times 10^4\ s^{-1}$ e $k_3 = 6.00 \times 10^7\ s^{-1}$ [Note que para todo $\underline{t}$ tem-se: $y_1 + y_2 + y_3 = 1$]

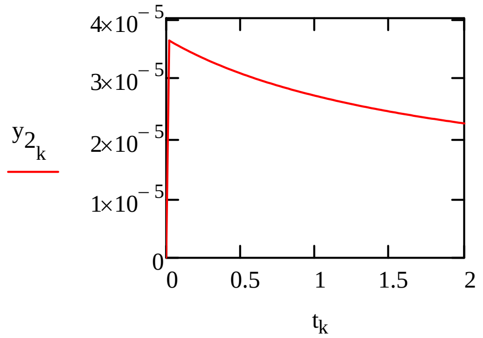
$TOL := 10^{-9}$ $\quad k_1 := .08$ $\quad k_2 := 2 \cdot 10^4$ $\quad k_3 := 6 \cdot 10^7$

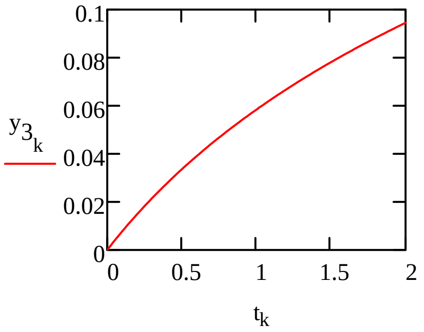
$$D(t,y) := \left| \begin{array}{l} r_0 \leftarrow k_1 \cdot y_0 \\ r_1 \leftarrow k_2 \cdot y_1 \cdot y_2 \\ r_2 \leftarrow k_3 \cdot (y_1)^2 \\ D_0 \leftarrow r_1 - r_0 \\ D_1 \leftarrow r_0 - r_1 - r_2 \\ D_2 \leftarrow r_2 \\ D \end{array} \right. \qquad y := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad D(0,y) = \begin{pmatrix} -0.08 \\ 0.08 \\ 0 \end{pmatrix}$$

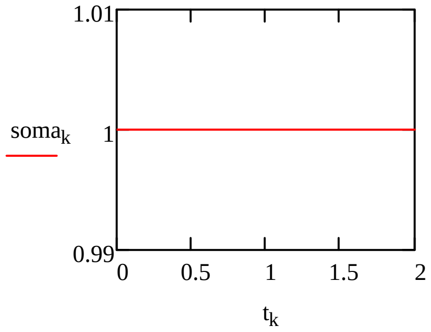
$t_{final} := 2$ $\quad N := 100$ $\quad Y := \mathrm{Rkadapt}(y, 0, t_{final}, N, D)$

$k := 0 .. N$ $\quad t_k := Y_{k,0}$ $\quad y1_k := Y_{k,1}$ $\quad y2_k := Y_{k,2}$ $\quad y3_k := Y_{k,3}$ $\quad soma_k := y1_k + y2_k + y3_k$



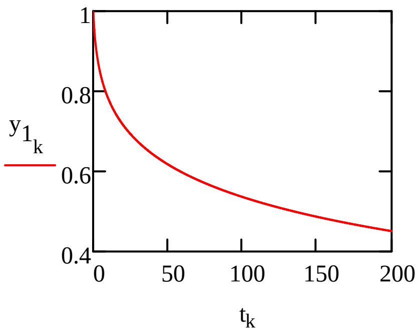


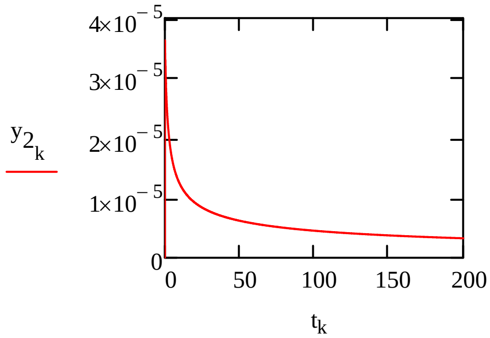


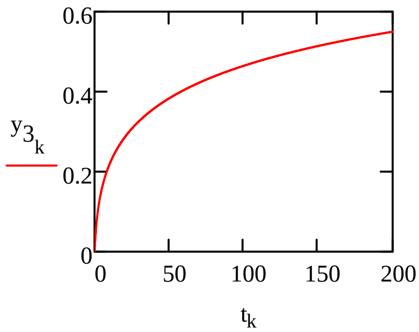


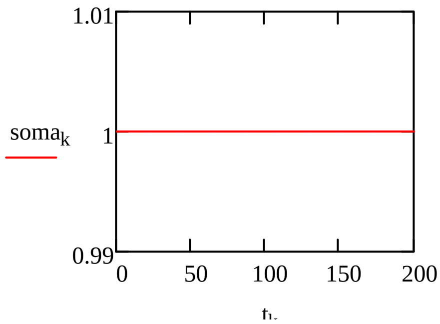
$t_{final} := 200$ $\quad N := 10^4$ $\quad Y := Rkadapt(y, 0, t_{final}, N, D)$

$k := 0..N$ $\quad t_k := Y_{k,0}$ $\quad y1_k := Y_{k,1}$ $\quad y2_k := Y_{k,2}$ $\quad y3_k := Y_{k,3}$ $\quad soma_k := y1_k + y2_k + y3_k$







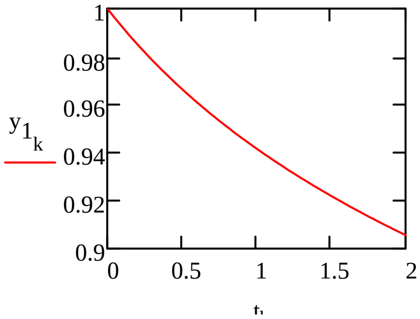


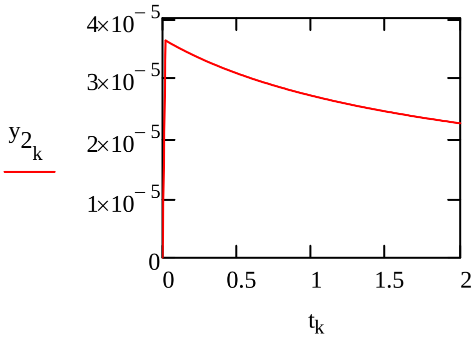
$$d(t,y) := \begin{array}{|l} y_3 \leftarrow 1 - y_0 - y_1 \\ r_0 \leftarrow k_1 \cdot y_0 \\ r_1 \leftarrow k_2 \cdot y_1 \cdot y_3 \\ r_2 \leftarrow k_3 \cdot (y_1)^2 \\ D_0 \leftarrow r_1 - r_0 \\ D_1 \leftarrow r_0 - r_1 - r_2 \\ D \end{array}$$

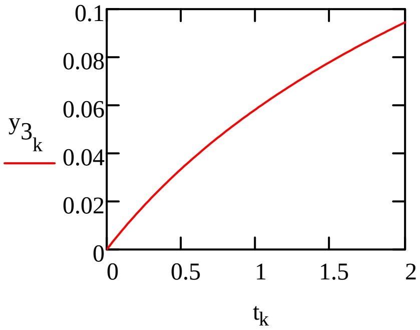
$y := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\quad d(0,y) = \begin{pmatrix} -0.08 \\ 0.08 \end{pmatrix}$

$t_{final} := 2$ $\quad N := 100$ $\quad Y := Rkadapt(y, 0, t_{final}, N, d)$

$k := 0 .. N \quad t_k := Y_{k,0} \quad y1_k := Y_{k,1} \quad y2_k := Y_{k,2} \quad y3_k := 1 - y1_k - y2_k$

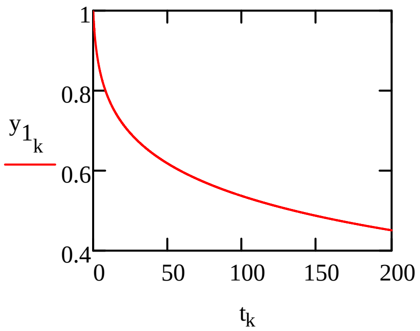


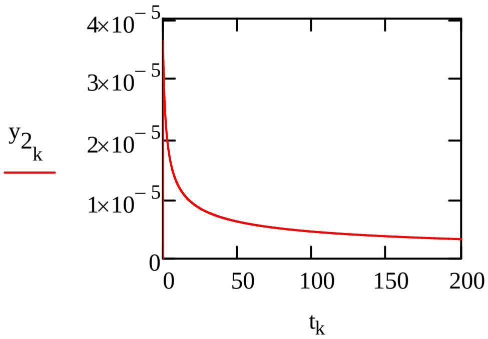


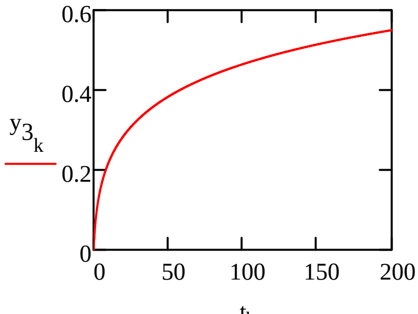


$t_{final} := 200 \qquad N := 10^4 \qquad Y := \mathrm{Rkadapt}\left(y, 0, t_{final}, N, d\right)$

$k := 0 .. N \quad t_k := Y_{k,0} \quad y1_k := Y_{k,1} \quad y2_k := Y_{k,2} \quad y3_k := 1 - y1_k - y2_k$







Resolução do Problema considerando que y2 está em estado quase estacionário

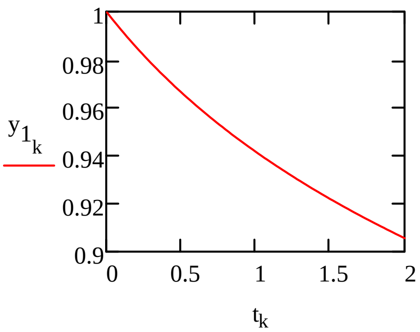
$TOL := 10^{-9}$

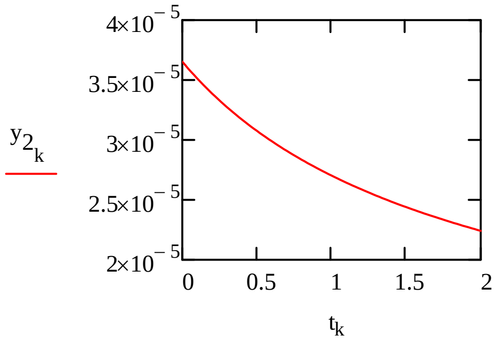
$k_1 := .08 \qquad k_2 := 2\cdot 10^4 \qquad k_3 := 6\cdot 10^7 \qquad y_{2\_eq}(y_1, y_3) := \dfrac{\sqrt{{k_2}^2\cdot {y_3}^2 + 4\cdot k_1\cdot k_3\cdot y_1} - k_2\cdot y_3}{2\cdot k_3}$

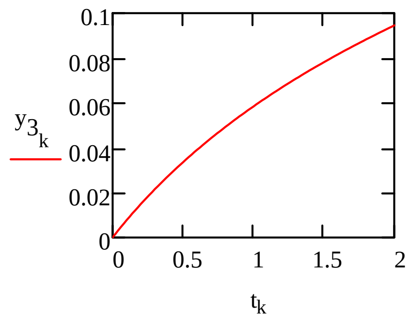
$$d(t,y) := \left| \begin{array}{l} y_2 \leftarrow y_{2\_eq}(y_0, y_1) \\ r_0 \leftarrow k_1\cdot y_0 \\ r_1 \leftarrow k_2\cdot y_1\cdot y_2 \\ r_2 \leftarrow k_3\cdot (y_2)^2 \\ D_0 \leftarrow r_1 - r_0 \\ D_1 \leftarrow r_2 \\ D \end{array} \right. \qquad y := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad d(0,y) = \begin{pmatrix} -0.08 \\ 0.08 \end{pmatrix}$$

$t_{final} := 2 \qquad N := 100 \qquad Y := \mathrm{Rkadapt}(y, 0, t_{final}, N, d)$

$k := 0..N \qquad t_k := Y_{k,0} \qquad {y_1}_k := Y_{k,1} \qquad {y_3}_k := Y_{k,2} \qquad {y_2}_k := y_{2\_eq}({y_1}_k, {y_3}_k)$

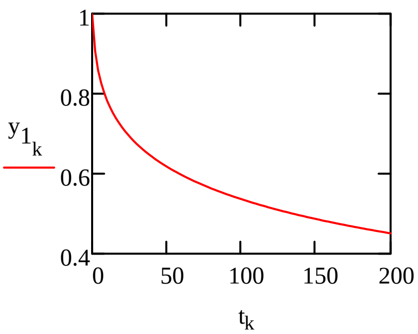


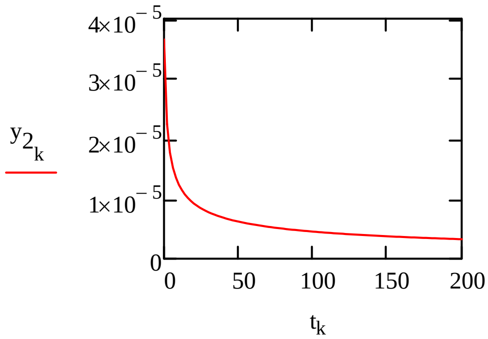


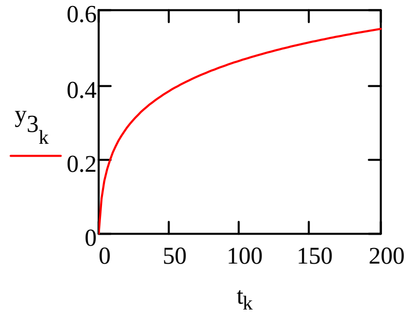


$t_{final} := 200 \qquad N := 100 \qquad Y := \mathrm{Rkadapt}(y, 0, t_{final}, N, d)$

$k := 0..N \qquad t_k := Y_{k,0} \qquad {y_1}_k := Y_{k,1} \qquad {y_3}_k := Y_{k,2} \qquad {y_2}_k := y_{2\_eq}({y_1}_k, {y_3}_k)$

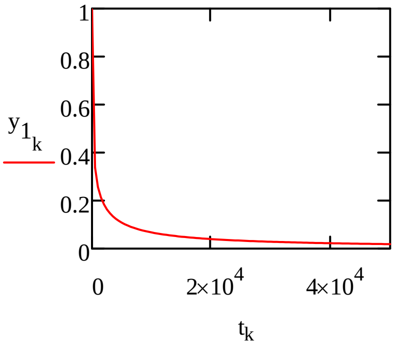




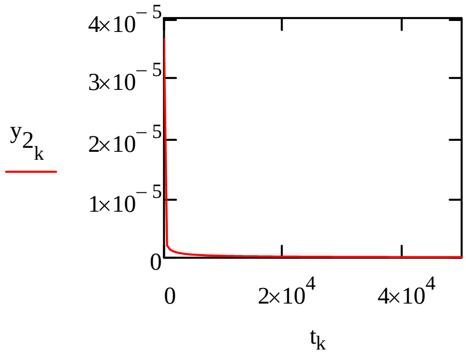


$t_{final} := 5\cdot 10^4 \qquad N := 100 \qquad Y := \mathrm{Rkadapt}(y, 0, t_{final}, N, d)$

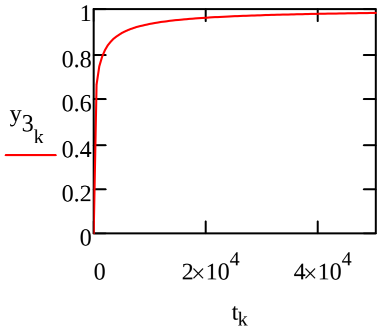
$k := 0..N \qquad t_k := Y_{k,0} \qquad {y_1}_k := Y_{k,1} \qquad {y_3}_k := Y_{k,2} \qquad {y_2}_k := y_{2\_eq}({y_1}_k, {y_3}_k)$



1
0.8
0.6
y_{1_k}
0.4
0.2
0
0
2×10^4
4×10^4
t_k



4×10^{-5}
3×10^{-5}
y_{2_k}
2×10^{-5}
1×10^{-5}
0
0
2×10^4
4×10^4
t_k

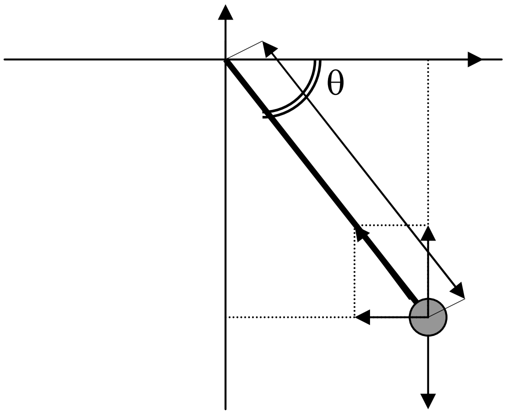


1
0.8
0.6
y_{3_k}
0.4
0.2
0
0
2×10^4
4×10^4
t_k

COQ 862- Métodos Numéricos em Modelagem e Simulação de Processos
Prof. Evaristo
3º Período de 2008

O PROBLEMA DO PÊNDULO SIMPLES

Primeira Forma das Equações:



Orientação do eixo vertical *para cima*.

No diagrama acima se tem: - L ≤ x ≤ +L ; -L ≤ y ≤ 0 e 0 ≤ θ ≤ π, assim:

$$\begin{cases} \cos\theta = \dfrac{x}{L} \\ \operatorname{sen}\theta = \dfrac{-y}{L} \end{cases} \text{, resultando em : } \begin{cases} T_x = T\cdot\cos\theta = T\cdot\dfrac{x}{L} \\ T_y = T\cdot\operatorname{sen}\theta = -T\cdot\dfrac{y}{L} \end{cases},$$

aplicando a Segunda Lei de Newton na duas direções:

$$\begin{cases} m\cdot\dfrac{d^2x(t)}{dt^2} = -T_x(t) = -T(t)\cdot\dfrac{x(t)}{L} \\ m\cdot\dfrac{d^2y(t)}{dt^2} = T_y(t) - mg = -T(t)\cdot\dfrac{y(t)}{L} - mg \end{cases}$$

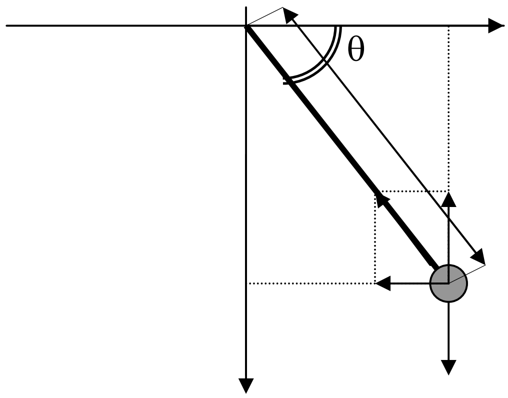
além destas, o pêndulo está submetido à restrição algébrica: $[x(t)]^2 + [y(t)]^2 = L^2$

Reformulando as equações em termos das variáveis adimensionais:

$$\mathit{x} = \frac{x}{L} \;;\; \mathit{y} = \frac{x}{L} \;;\lambda = \frac{T}{m\cdot g} \quad \text{e} \quad \mathit{t} = t\cdot\sqrt{\frac{g}{L}} \text{, resulta : } \begin{cases} \dfrac{d^2\mathit{x}(\mathit{t})}{d\mathit{t}^2} = -\lambda(\mathit{t})\cdot \mathit{x}(\mathit{t}) \\ \dfrac{d^2\mathit{y}(\mathit{t})}{d\mathit{t}^2} = -\lambda(\mathit{t})\cdot \mathit{y}(\mathit{t}) - 1 \\ [\mathit{x}(\mathit{t})]^2 + [\mathit{y}(\mathit{t})]^2 = 1 \end{cases}$$

Adotando nestas equações: $\mu(t) = -\lambda(t)$, resulta: $\begin{cases} \dfrac{d^2 x(t)}{dt^2} = \mu(t) \cdot x(t) \\ \dfrac{d^2 y(t)}{dt^2} = \mu(t) \cdot y(t) - 1 \\ [x(t)]^2 + [y(t)]^2 = 1 \end{cases}$

Segunda Forma das Equações:



Orientação do eixo vertical *para baixo*.

No diagrama acima se tem: $-L \le x \le +L$; $0 \le y \le +L$ e $0 \le \theta \le \pi$, assim:

$$\begin{cases} \cos\theta = \dfrac{x}{L} \\ \mathrm{sen}\,\theta = \dfrac{y}{L} \end{cases}, \text{ resultando em : } \begin{cases} T_x = T \cdot \cos\theta = T \cdot \dfrac{x}{L} \\ T_y = -T \cdot \mathrm{sen}\,\theta = -T \cdot \dfrac{y}{L} \end{cases},$$

aplicando a Segunda Lei de Newton na duas direções:

$$\begin{cases} m \cdot \dfrac{d^2 x(t)}{dt^2} = -T_x(t) = -T(t) \cdot \dfrac{x(t)}{L} \\ m \cdot \dfrac{d^2 y(t)}{dt^2} = T_y(t) + mg = -T(t) \cdot \dfrac{y(t)}{L} + mg \end{cases}$$

além destas, o pêndulo está submetido à restrição algébrica: $[x(t)]^2 + [y(t)]^2 = L^2$

Reformulando as equações em termos das variáveis adimensionais:

$x = \frac{\mathrm{x}}{\mathrm{L}}$; $y = \frac{\mathrm{x}}{\mathrm{L}}$; $\lambda = \frac{\mathrm{T}}{\mathrm{m} \cdot \mathrm{g}}$ e $t = \mathrm{t} \cdot \sqrt{\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{L}}}$, resulta : $\begin{cases} \frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} = -\lambda(t) \cdot x(t) \\ \frac{\mathrm{d}^2 y(t)}{\mathrm{d}t^2} = 1 - \lambda(t) \cdot y(t) \\ [x(t)]^2 + [y(t)]^2 = 1 \end{cases}$

Adotando nestas equações: $\mu(t) = -\lambda(t)$, resulta: $\begin{cases} \frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} = \mu(t) \cdot x(t) \\ \frac{\mathrm{d}^2 y(t)}{\mathrm{d}t^2} = 1 + \mu(t) \cdot y(t) \\ [x(t)]^2 + [y(t)]^2 = 1 \end{cases}$

Simplificando a notação (considerando todas as variáveis adimensionais!) surgem as quatro formas alternativas de expressar as equações do pêndulo simples:

Equações do Pêndulo		Referências:
1	$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}^2 \mathrm{x(t)}}{\mathrm{dt}^2} = -\lambda(\mathrm{t}) \cdot \mathrm{x(t)} \\ \frac{\mathrm{d}^2 \mathrm{y(t)}}{\mathrm{dt}^2} = -\lambda(\mathrm{t}) \cdot \mathrm{y(t)} - 1 \\ [\mathrm{x(t)}]^2 + [\mathrm{y(t)}]^2 = 1 \end{cases}$ no domínio: $\begin{cases} -1 \le \mathrm{x} \le 1 \\ -1 \le \mathrm{y} \le 0 \\ \lambda \ge 0 \end{cases}$	**(1)**: páginas 151 e 154 **(2)**: página 484 **(3)**: página 12
2	$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}^2 \mathrm{x(t)}}{\mathrm{dt}^2} = \lambda(\mathrm{t}) \cdot \mathrm{x(t)} \\ \frac{\mathrm{d}^2 \mathrm{y(t)}}{\mathrm{dt}^2} = \lambda(\mathrm{t}) \cdot \mathrm{y(t)} - 1 \\ [\mathrm{x(t)}]^2 + [\mathrm{y(t)}]^2 = 1 \end{cases}$ no domínio: $\begin{cases} -1 \le \mathrm{x} \le 1 \\ -1 \le \mathrm{y} \le 0 \\ \lambda \le 0 \end{cases}$	**(1)**: páginas 5 e 142 **(4)**: página 10

3	$\begin{cases} \dfrac{d^2x(t)}{dt^2} = -\lambda(t)\cdot x(t) \\ \dfrac{d^2y(t)}{dt^2} = 1-\lambda(t)\cdot y(t) \\ [x(t)]^2+[y(t)]^2 = 1 \end{cases}$ no domínio: $\begin{cases} -1 \le x \le 1 \\ 0 \le y \le 1 \\ \lambda \ge 0 \end{cases}$	**(5)**: página 1.
4	$\begin{cases} \dfrac{d^2x(t)}{dt^2} = \lambda(t)\cdot x(t) \\ \dfrac{d^2y(t)}{dt^2} = 1+\lambda(t)\cdot y(t) \\ [x(t)]^2+[y(t)]^2 = 1 \end{cases}$ no domínio: $\begin{cases} -1 \le x \le 1 \\ 0 \le y \le 1 \\ \lambda \le 0 \end{cases}$	

(1): Brenan, K.E. , Campbell, S.L. & Petzold, L.R. : *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations* , Elsevier Science Pubblishing Co., Inc. . 1989.

(2) Hairer E. & Wanner G. :*Solving Ordinary Differential Equations II . Stiff and Differential-Algebraic Problems*, Springer Series Computational Mathematics, Vol 14, 1991

(3) Ascher, U.M. & Petzold L.R. : *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebric Equations* SIAM, Society for Industrial ans Applied Mathematcis, 1998.

(4) Ferreira da Costa Jr. , E . : *Resolução Automática de Equações Algébrico-Diferenciais de Índice Superior*, Tese de Doutorado, PEQ/COPPE/UFRJ, 2003.

(5) Queipo, C. : *Problema do Pêndulo,* Trabalho para disciplina COQ-862, 200

Resolução do Problema em Forma Explícita

Primeira Forma das Equações: [com as duas definições de $\lambda(t)$]

Em vista de: $\begin{cases} \cos\theta = x \\ \operatorname{sen}\theta = -y \end{cases}$ [$\underline{x}$ e $\underline{y}$ já na forma adimensional!], tem-se: $\begin{cases} x(t) = \cos[\theta(t)] \\ y(t) = -\operatorname{sen}[\theta(t)] \end{cases}$

para $0 \le \theta(t) \le \pi$, e

$$\begin{cases} \dfrac{dx(t)}{dt} = v_x(t) = -\text{sen}[\theta(t)] \cdot \dfrac{d\theta(t)}{dt} \\ \dfrac{dy(t)}{dt} = v_y(t) = -\cos[\theta(t)] \cdot \dfrac{d\theta(t)}{dt} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{d^2x(t)}{dt^2} = -\text{sen}[\theta(t)] \cdot \dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} - \cos[\theta(t)] \cdot \left[\dfrac{d\theta(t)}{dt}\right]^2 \\ \dfrac{d^2y(t)}{dt^2} = -\cos[\theta(t)] \cdot \dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} + \text{sen}[\theta(t)] \cdot \left[\dfrac{d\theta(t)}{dt}\right]^2 \end{cases}$$

mas em vista de: $\begin{cases} \dfrac{d^2x(t)}{dt^2} = -\lambda(t) \cdot x(t) = -\lambda(t) \cdot \cos[\theta(t)] \\ \dfrac{d^2y(t)}{dt^2} = -\lambda(t) \cdot y(t) - 1 = \lambda(t) \cdot \text{sen}[\theta(t)] - 1 \end{cases}$, resultando finalmente no sistema de equações: $\begin{cases} \text{sen}[\theta(t)] \cdot \dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} - \cos[\theta(t)] \cdot \left\{\lambda(t) - \left[\dfrac{d\theta(t)}{dt}\right]^2\right\} = 0 \rightarrow \times \text{sen}[\theta(t)] \\ \cos[\theta(t)] \cdot \dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} + \text{sen}[\theta(t)] \cdot \left\{\lambda(t) - \left[\dfrac{d\theta(t)}{dt}\right]^2\right\} = 1 \rightarrow \times \cos[\theta(t)] \end{cases}$

efetuando os produtos indicados e somando as equações resultantes, chega-se a:

$$\boxed{\dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} = \cos[\theta(t)]} \text{ para } 0 \leq \theta(t) \leq \pi$$

adotando na equação acima: $\phi(t) = \dfrac{\pi}{2} - \theta(t) \rightarrow \theta(t) = \dfrac{\pi}{2} - \phi(t)$ para $-\dfrac{\pi}{2} \leq \phi(t) \leq \dfrac{\pi}{2}$

$\cos[\theta(t)] = \text{sen}[\phi(t)]$ e $\dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} = -\dfrac{d^2\phi(t)}{dt^2}$, logo:

$$\boxed{\dfrac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -\text{sen}[\phi(t)]}$$ para $-\pi/2 \leq \phi(t) \leq \pi/2$ [Ref. **(3)**: Eq. 1.2 –pág.5],

onde : $x(t) = \text{sen}[\phi(t)]$ e $y(t) = -\cos[\phi(t)]$

Alternativamente, adotando na equação:

$\phi(t) = \dfrac{\pi}{2} + \theta(t) \rightarrow \theta(t) = \phi(t) - \dfrac{\pi}{2}$ para $\dfrac{\pi}{2} \leq \phi(t) \leq \dfrac{3 \cdot \pi}{2}$, logo

$\cos[\theta(t)] = \text{sen}[\phi(t)]$ e $\dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} = \dfrac{d^2\phi(t)}{dt^2}$, logo:

$\boxed{\dfrac{d^2\phi(t)}{dt^2} = \text{sen}[\phi(t)]}$ para $\dfrac{\pi}{2} \leq \phi(t) \leq \dfrac{3 \cdot \pi}{2}$, onde : $x(t) = \text{sen}[\phi(t)]$ e $y(t) = \cos[\phi(t)]$

Segunda Forma das Equações: [com as duas definições de $\lambda(t)$]

Em vista de: $\begin{cases}\cos\theta = x \\ \operatorname{sen}\theta = y\end{cases}$ [x e y já na forma adimensional!], tem-se: $\begin{cases}x(t) = \cos[\theta(t)] \\ y(t) = \operatorname{sen}[\theta(t)]\end{cases}$ para $0 \leq \theta(t) \leq \pi$, e

$$\begin{cases}\dfrac{dx(t)}{dt} = v_x(t) = -\operatorname{sen}[\theta(t)]\cdot\dfrac{d\theta(t)}{dt} \\ \dfrac{dy(t)}{dt} = v_y(t) = \cos[\theta(t)]\cdot\dfrac{d\theta(t)}{dt}\end{cases} \Rightarrow \begin{cases}\dfrac{d^2x(t)}{dt^2} = -\operatorname{sen}[\theta(t)]\cdot\dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} - \cos[\theta(t)]\cdot\left[\dfrac{d\theta(t)}{dt}\right]^2 \\ \dfrac{d^2y(t)}{dt^2} = \cos[\theta(t)]\cdot\dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} - \operatorname{sen}[\theta(t)]\cdot\left[\dfrac{d\theta(t)}{dt}\right]^2\end{cases}$$

mas em vista de: $\begin{cases}\dfrac{d^2x(t)}{dt^2} = -\lambda(t)\cdot x(t) = -\lambda(t)\cdot\cos[\theta(t)] \\ \dfrac{d^2y(t)}{dt^2} = -\lambda(t)\cdot y(t) - 1 = 1 - \lambda(t)\cdot\operatorname{sen}[\theta(t)]\end{cases}$, resultando finalmente no

sistema de equações: $\begin{cases}\operatorname{sen}[\theta(t)]\cdot\dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} - \cos[\theta(t)]\cdot\left\{\lambda(t) - \left[\dfrac{d\theta(t)}{dt}\right]^2\right\} = 0 \\ \cos[\theta(t)]\cdot\dfrac{d^2\theta(t)}{dt^2} + \operatorname{sen}[\theta(t)]\cdot\left\{\lambda(t) - \left[\dfrac{d\theta(t)}{dt}\right]^2\right\} = 1\end{cases}$

sistema análogo ao obtido na Primeira Forma, desta forma apresentará a mesma solução!

Dando origem assim a:

$$\boxed{\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} = \cos[\theta(t)]} \text{ para } 0 \leq \theta(t) \leq \pi \text{ onde: } \begin{cases}x(t) = \cos[\theta(t)] \\ y(t) = \operatorname{sen}[\theta(t)]\end{cases}$$

Com: $\phi(t) = \dfrac{\pi}{2} - \theta(t) \to \theta(t) = \dfrac{\pi}{2} - \phi(t)$ para $-\dfrac{\pi}{2} \leq \phi(t) \leq \dfrac{\pi}{2}$, tem-se:

$$\boxed{\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -\operatorname{sen}[\phi(t)]} \text{ para } -\pi/2 \leq \phi(t) \leq \pi/2 \text{ , onde : } x(t) = \operatorname{sen}[\phi(t)] \text{ e } y(t) = \cos[\phi(t)]$$

Alternativamente, adotando na equação:

$\phi(t) = \dfrac{\pi}{2} + \theta(t) \to \theta(t) = \phi(t) - \dfrac{\pi}{2}$ para $\dfrac{\pi}{2} \leq \phi(t) \leq \dfrac{3\cdot\pi}{2}$, logo:

$$\boxed{\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = \operatorname{sen}[\phi(t)]} \text{ para } \frac{\pi}{2} \leq \phi(t) \leq \frac{3\cdot\pi}{2}$$ [Ref. **(1)**: Eq. 6.2.5–pág.151],

onde : $x(t) = \operatorname{sen}[\phi(t)]$ e $y(t) = -\cos[\phi(t)]$

Formulação do Problema do Pêndulo (adimensionado)

Equações Diferenciais Ordinárias

$$\frac{dx}{d\tau} = u$$

$$\frac{dy}{d\tau} = v$$

$$\frac{du}{d\tau} = -F \cdot x$$

$$\frac{dv}{d\tau} = -F \cdot y + 1$$

Restrições Algébricas.

$$x^2 + y^2 - 1 = 0$$

Sistema Diferencial Estendido

Diferenciando a restrição algébrica uma vez:

$$x \cdot \frac{dx}{d\tau} + y \cdot \frac{dy}{d\tau} = 0 \qquad \text{ou} \qquad x \cdot u + y \cdot v = 0$$

mais uma vez:

Obtém-se o Sistema Diferencial Estendido:

$$\frac{dx}{d\tau} = u$$

$$\frac{dy}{d\tau} = v$$

$$\frac{du}{d\tau} = -F \cdot x$$

$$\frac{dv}{d\tau} = -F \cdot y + 1$$

$$\frac{dF}{d\tau} = 3 \cdot v$$

onde as variáveis devem atender as seguintes restrições algébricas:

$$x^2 + y^2 - 1 = 0$$

$$x \cdot u + y \cdot v = 0$$

$$u^2 + v^2 + y - F = 0$$

Das 5 variáveis, apenas 2 podem ser fixadas arbitrariamente: as 3 restantes ficam determinadas pelas restrições algébricas. Entretanto, não é qualquer a combinação de variáveis que pode ser escolhida.

Solução do Problema

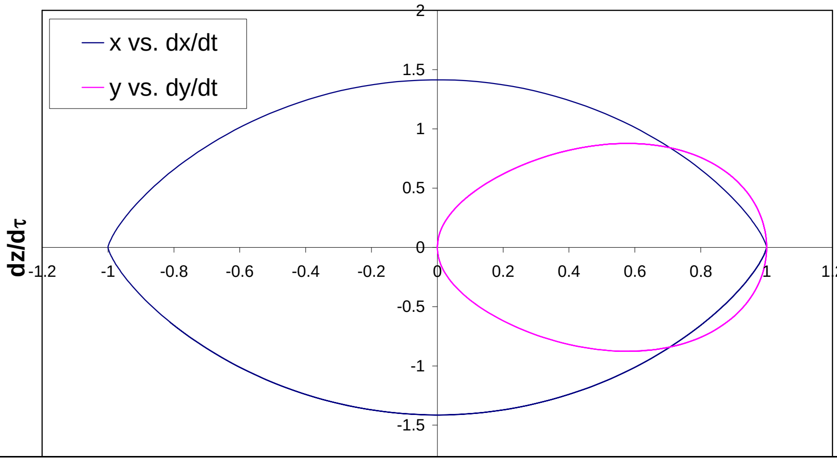
O pacote DASSL resolve sistema de índice 1, que não é o caso do problema do pêndulo. Porém, existem outros pacotes (PSIDE, por exemplo), que podem integrar sistemas de índice superior (até 3 no caso do PSIDE). Para isto, deve-se conhecer o índice de cada variável; no caso do pêndulo, x, y, u, v são de índice 1, entanto F é de índice 3.

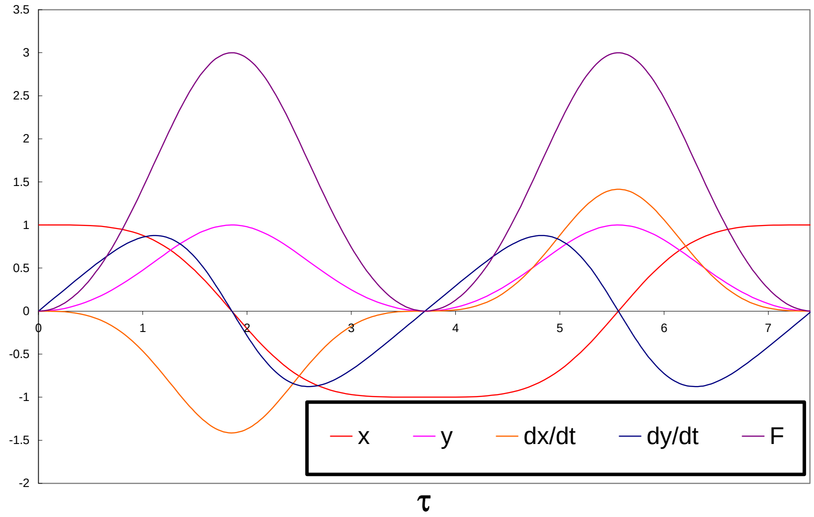
Condições Iniciais:

$x_0 = 1$ (da primeira restrição: $y_0 = 0$, e da segunda $u_0 = 0$)

$v_0 = 0$ (da terceira restrição: $F = 0$)

Os resultados (obtidos com o PSIDE) se mostram abaixo; a resolução seguindo ambos enfoques (diferencial estendido, e EAD) conduz a resultados praticamente idênticos.





3.5
3
2.5
2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-2
0
1
2
3
4
5
6
7
x
y
dx/dt
dy/dt
F
τ

Rotina do Sistema Diferencial Estendido

```
PROGRAM TEST

        IMPLICIT        REAL*8(A-H,O-Z)
        EXTERNAL        GEVAL,MEVAL,JEVAL
        PARAMETER       (NEQN=5,JNUM=.TRUE.,NLJ=NEQN,NUJ=NEQN,&
                                MNUM=.TRUE.,NLM=NEQN,NUM=NEQN,&
                                LRWORK=20+27*NEQN+6*NEQN**2,LIWORK=20+4*NEQN)
        DIMENSION       Y(NEQN),DY(NEQN),RWORK(LRWORK),IWORK(LIWORK),&
                                IND(NEQN),G(NEQN)

        !Inicialização
        Y(1)=1.D0
        Y(2)=0.D0
        Y(3)=0.D0
        Y(4)=0.D0
        Y(5)=0.D0

        DY(1)=Y(3)
        DY(2)=Y(4)
        DY(3)=-Y(5)*Y(1)
        DY(4)=-Y(5)*Y(2)+1.D0

        !Parâmetros do PSIDE
        ATOL=1.D-8
        RTOL=1.D-6
        NSTP=100
        T=0.D0
        DT=1.D-1
        IND=1

        OPEN(1,FILE="TESTE.DAT",STATUS='UNKNOWN')
        10 FORMAT(<1+2*NEQN>F12.8)
        WRITE(1,10) T,Y,DY

        DO N=1,NSTP
                TEND=T+DT
                WRITE(*,*) 'INICIATING STEP...',N
            CALL PSIDE(NEQN,Y,DY,GEVAL,JNUM,NLJ,NUJ,&
                        JEVAL,MNUM,NLM,NUM,MEVAL,T,TEND,RTOL,ATOL,IND,&
                        LRWORK,RWORK,LIWORK,IWORK,RPAR,IPAR,IDID)
                IF (IDID.LE.-1) THEN
                        WRITE(*,*) 'ERROR, IDID...',IDID
                        EXIT
                ENDIF
                WRITE(1,10) T,Y,DY
                T=TEND
        ENDDO

        CLOSE(1)

STOP
END PROGRAM
```

Rotina do Sistema Diferencial Estendido (cont.)

```
SUBROUTINE GEVAL(NEQN,T,Z,DZ,G,IERR,RPAR,IPAR)

       IMPLICIT       REAL*8(A-H,O-Z)
       DIMENSION      Z(NEQN),DZ(NEQN),G(NEQN)

       X=Z(1)
       Y=Z(2)
       U=Z(3)
       V=Z(4)
       F=Z(5)

       DX=DZ(1)
       DY=DZ(2)
       DU=DZ(3)
       DV=DZ(4)
       DF=DZ(5)

       !Sistema EAD
       G(1)=DX-U
       G(2)=DY-V
       G(3)=DU+F*X
       G(4)=DV+F*Y-1.D0
       G(5)=DF-3.D0*V

RETURN
END


SUBROUTINE JEVAL(LDJ,NEQN,NLJ,NUJ,T,Y,DY,DGDY,RPAR,IPAR)
RETURN
END


SUBROUTINE MEVAL(LDM,NEQN,NLM,NUM,T,Y,DY,DGDDY,RPAR,IPAR)
RETURN
END
```

Rotina do Sistema Algébrico - Diferencial

```
PROGRAM TEST

       IMPLICIT       REAL*8(A-H,O-Z)
       EXTERNAL       GEVAL,MEVAL,JEVAL
       PARAMETER      (NEQN=5,JNUM=.TRUE.,NLJ=NEQN,NUJ=NEQN,&
                      MNUM=.TRUE.,NLM=NEQN,NUM=NEQN,&
                      LRWORK=20+27*NEQN+6*NEQN**2,LIWORK=20+4*NEQN)
       DIMENSION      Y(NEQN),DY(NEQN),RWORK(LRWORK),IWORK(LIWORK),&
                      IND(NEQN),G(NEQN)

       !Inicialização
       Y(1)=1.D0
       Y(2)=0.D0
       Y(3)=0.D0
       Y(4)=0.D0
       Y(5)=0.D0

       DY(1)=Y(3)
       DY(2)=Y(4)
       DY(3)=-Y(5)*Y(1)
       DY(4)=-Y(5)*Y(2)+1.D0

       !Parâmetros do PSIDE
       ATOL=1.D-8
       RTOL=1.D-6
       NSTP=100
       T=0.D0
       DT=1.D-1
       !Habilita vetor dos índices
       IWORK(2)=1
       !X,Y,U,V são de índice 1
       IND(1:4)=1
       !F é de índice 3
       IND(5)=3

       OPEN(1,FILE="TESTE.DAT",STATUS='UNKNOWN')
       10 FORMAT(<1+2*NEQN>F12.8)
       WRITE(1,10) T,Y,DY

       DO N=1,NSTP
              TEND=T+DT
              WRITE(*,*) 'INICIATING STEP...',N
           CALL PSIDE(NEQN,Y,DY,GEVAL,JNUM,NLJ,NUJ,&
                      JEVAL,MNUM,NLM,NUM,MEVAL,T,TEND,RTOL,ATOL,IND,&
                      LRWORK,RWORK,LIWORK,IWORK,RPAR,IPAR,IDID)
              IF (IDID.LE.-1) THEN
                      WRITE(*,*) 'ERROR, IDID...',IDID
                      EXIT
              ENDIF
              WRITE(1,10) T,Y,DY
              T=TEND
       ENDDO

       CLOSE(1)

STOP
END PROGRAM
```

Rotina do Sistema Algébrico – Diferencial (cont.)

```
SUBROUTINE GEVAL(NEQN,T,Z,DZ,G,IERR,RPAR,IPAR)

       IMPLICIT       REAL*8(A-H,O-Z)
       DIMENSION      Z(NEQN),DZ(NEQN),G(NEQN)

       X=Z(1)
       Y=Z(2)
       U=Z(3)
       V=Z(4)
       F=Z(5)

       DX=DZ(1)
       DY=DZ(2)
       DU=DZ(3)
       DV=DZ(4)

       !Sistema EAD
       G(1)=DX-U
       G(2)=DY-V
       G(3)=DU+F*X
       G(4)=DV+F*Y-1.D0
       G(5)=X**2.D0+Y**2.D0-1.D0

RETURN
END


SUBROUTINE JEVAL(LDJ,NEQN,NLJ,NUJ,T,Y,DY,DGDY,RPAR,IPAR)
RETURN
END


SUBROUTINE MEVAL(LDM,NEQN,NLM,NUM,T,Y,DY,DGDDY,RPAR,IPAR)
RETURN
END
```