

Capítulo 7

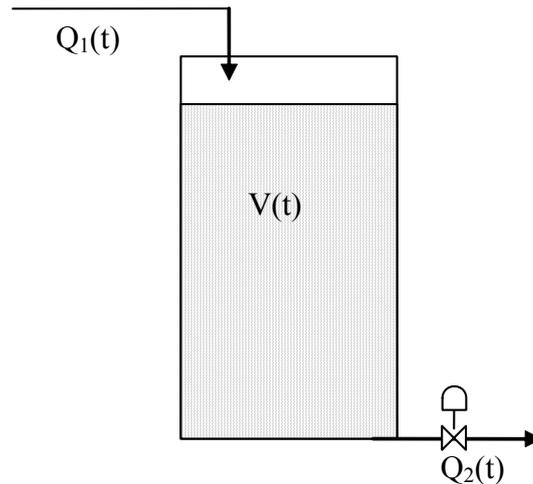
Problemas de Valor Inicial para Equações Diferenciais Ordinárias

Muitos problemas em modelagem de processos químicos são formulados em termos de equações diferenciais. Estas equações diferenciais descrevem a relação entre uma função desconhecida (variável dependente) e suas derivadas em relação a variáveis (variáveis independentes), quando há apenas uma variável independente a equação diferencial correspondente é ordinária e caso haja mais de uma variável independente a equação diferencial é parcial. Os problemas de equações diferenciais ordinárias (EDO) ou de sistemas de equações diferenciais ordinárias classificam-se em dois tipos:

- (a) Problema de Valor Inicial: quando todas as condições iniciais do problema são conhecidas no valor inicial da variável independente;
- (b) Problema de Valor de Contorno: quando algumas condições são conhecidas no valor inicial da variável independente e outras no valor final da variável independente.

A seguir, apresentam-se dois exemplos de cada um desses problemas:

- (1) Um tanque de armazenamento de água apresenta uma área de seção transversal de $3,0 \text{ m}^2$ em sua saída está instalada uma válvula cuja equação característica é: $q = 8 \cdot \sqrt{h}$ sendo q : vazão volumétrica em m^3/h e h : altura de água no tanque em metros. Sabe-se que a altura normal de operação do tanque é $4,0 \text{ m}$. Simule a partida da operação do tanque inicialmente vazio, isto é $h(0) = 0$ e vazão de alimentação do tanque: $Q_1 = 8 \cdot \sqrt{h_{\text{operação}}} = 16 \text{ m}^3/\text{h}$.



Resolução: A equação diferencial (não-linear) que devemos resolver é:

$$3 \frac{d[h(t)]}{dt} = 16 - 8 \cdot \sqrt{h(t)}, \text{ sujeita à condição inicial: } h(0) = 0.$$

Quando o tempo t tender ao infinito o tanque opera em um estado estacionário no qual:

$$\frac{d[h(t)]}{dt} = 0, \text{ assim: } 16 - 8 \cdot \sqrt{h_{ss}} \Rightarrow h_{ss} = 4,0 \text{ m, que é altura de operação final do tanque.}$$

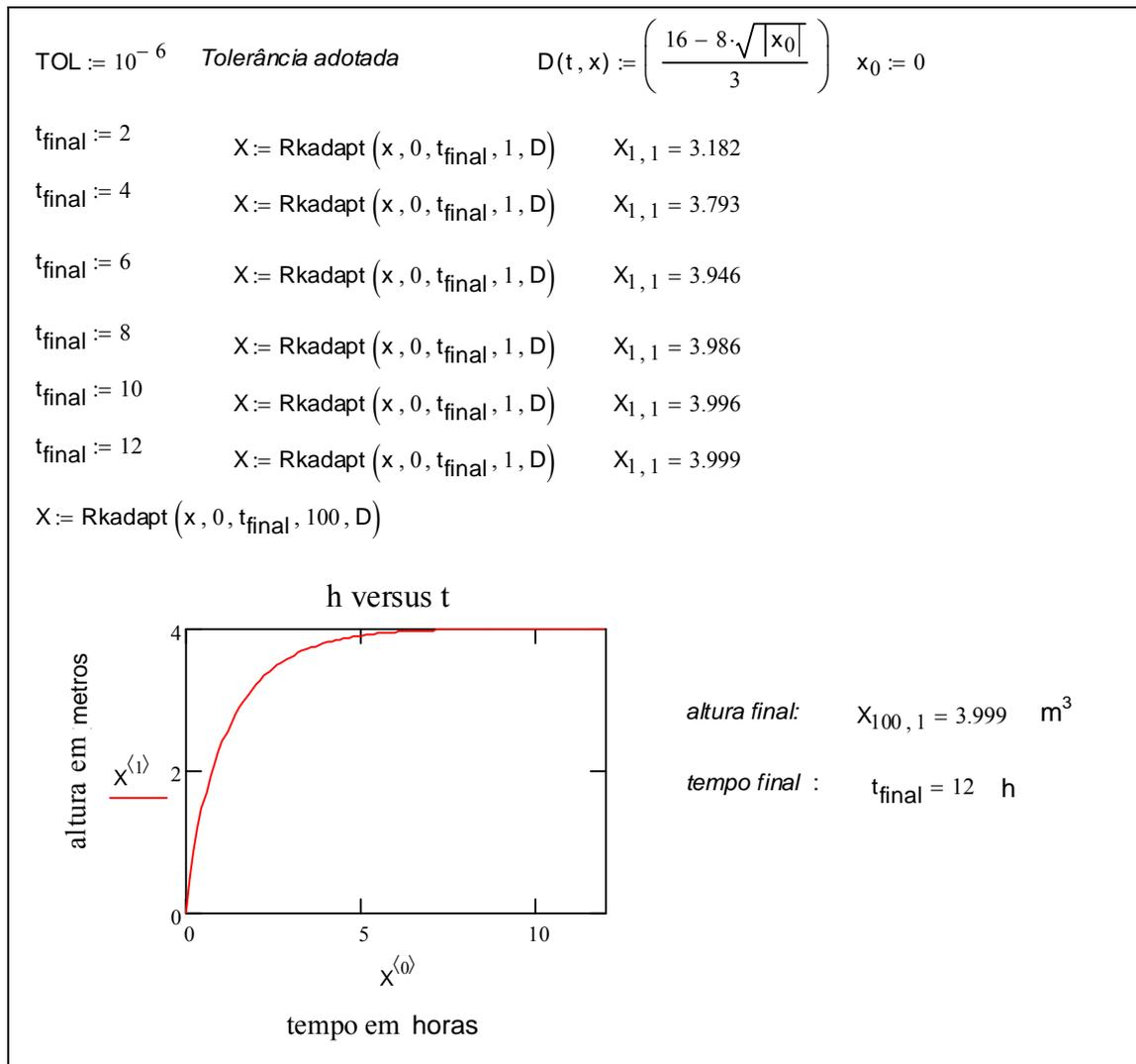
Para resolver este problema adotou-se um procedimento integrador do *MATCAD* chamado *Runge-Kutta adaptativo*. Esse procedimento seleciona automaticamente o passo de integração que satisfaz um critério de precisão em acordo com a *tolerância* pré-especificada.

Na EDO que devemos resolver a variável h é a variável dependente do problema e o tempo t é a variável independente. O pacote integrador necessita da especificação do valor inicial da variável dependente, isto é: $h(0)$ que no exemplo é igual a zero (*tanque vazio no início*), dos valores inicial e final da variável independente, isto é: valor inicial do tempo é zero e o valor final do tempo deve ser estimado. Para se ter uma idéia do tempo necessário para encher o tanque calcula-se inicialmente o tempo que levaria para o tanque encher se a válvula na saída estivesse fechada, este tempo seria:

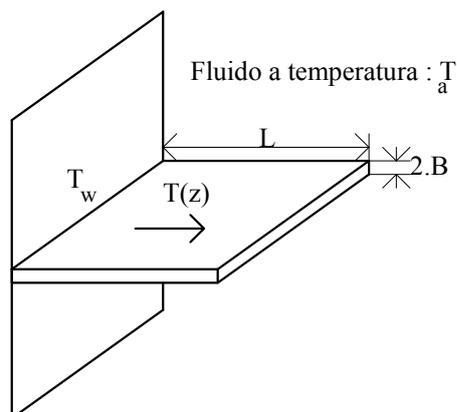
$$\frac{V_{cheio}}{Q_2} = \frac{4 \cdot 3}{16} = 0,75 \text{ h, sabe-se assim que o tempo real seria superior a este valor. Os seguintes}$$

valores são adotados para o tempo total de simulação: 2, 4, 6, 8, 10 e 12 horas.

Abaixo é mostrado o programa em *MATCAD* que aplica o procedimento.



(2) Deseja-se calcular a distribuição de temperatura em uma aleta fina de seção retangular, conforme mostrado na figura abaixo:



Considerando desprezível a transferência de calor através das áreas laterais da aleta e considerando também a transferência de calor na aleta apenas por condução, tem-se o balanço de energia:

$$\frac{d^2T(z)}{dz^2} = \frac{h}{k \cdot B} [T(z) - T_a] \text{ para } 0 < z < L.$$

Sujeita às condições de contorno:

CC1: condição de contorno na parede: $T(0) = T_w$;

CC2: condição de contorno no final da aleta: $\left. \frac{dT(z)}{dz} \right|_{z=L} = 0$.

Sendo B : a semi-espessura da aleta, h : o coeficiente convectivo de transferência de calor e k : a condutividade térmica do material da aleta.

Resolução: A equação diferencial e as condições de contorno do problema podem ser reescritas em termos das variáveis e parâmetro adimensionais:

$$x = \frac{z}{L}; \theta(x) = \frac{T(z) - T_a}{T_w - T_a} \text{ e } \alpha = \sqrt{\frac{h \cdot L^2}{k \cdot B}}, \text{ resultando em: } \frac{d^2\theta(x)}{dx^2} = \alpha^2 \cdot \theta(x), \text{ para } 0 < x < 1.$$

Sujeita às condições de contorno:

CC1: condição de contorno na parede: $\theta(0) = 1$;

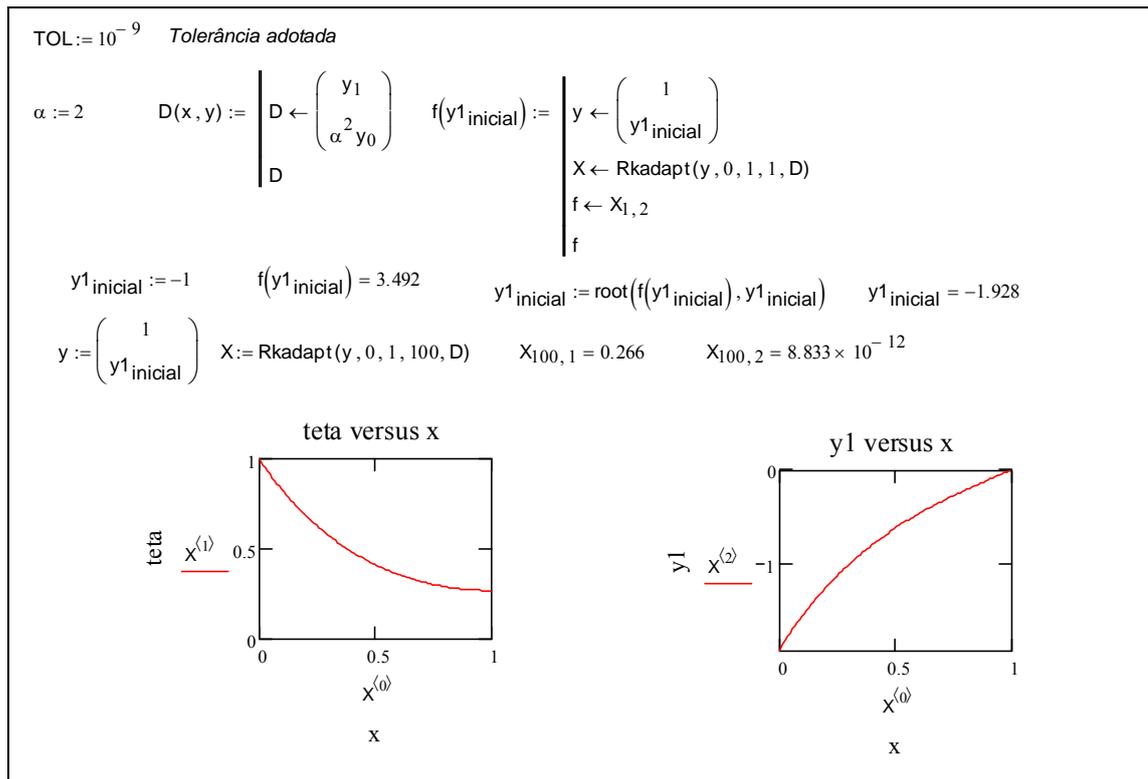
CC2: condição de contorno no final da aleta: $\left. \frac{d\theta(x)}{dx} \right|_{x=1} = 0$.

Para resolver numericamente este problema de valor de contorno, vamos transformar a equação diferencial de segunda ordem seja em duas EDO's de primeira ordem, definindo:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \theta \\ \frac{d\theta}{dx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{d\mathbf{y}}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{dy_0}{dx} \\ \frac{dy_1}{dx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \alpha^2 \cdot y_0 \end{pmatrix}, \text{ com } y_0(0) = 1 \text{ e } y_1(1) = 0.$$

Deve-se então *buscar* o valor de $y_1(0) < 0$ que *conduza* a $y_1(1) = 0$.

A seguir é mostrado o programa em *MATHCAD* que aplica o procedimento de busca de $y_1(0)$, considerando o parâmetro $\alpha = 2$.



Através de uma redefinição apropriada das variáveis dependentes do problema, é sempre possível representar uma equação diferencial ordinária de ordem n através de um sistema de n equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Seja uma EDO de ordem n da forma:

$$\frac{d^n x(t)}{dt^n} = f \left[t, x(t), \frac{dx(t)}{dt}, \frac{d^2 x(t)}{dt^2}, \dots, \frac{d^{n-1} x(t)}{dt^{n-1}} \right]$$

sujeita às condições iniciais: $\left\{ \begin{array}{l} x(0) = x_0 \\ \left. \frac{dx(t)}{dt} \right|_{t=0} = x'_0 \\ \vdots \\ \left. \frac{d^{n-1} x(t)}{dt^{n-1}} \right|_{t=0} = x_0^{(n-1)} \end{array} \right.$

Adotando as novas variáveis dependentes:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1(t) = x(t) \\ x_2(t) = \frac{dx(t)}{dt} \\ \vdots \\ x_i(t) = \frac{d^{i-1} x(t)}{dt^{i-1}} \\ \vdots \\ x_n(t) = \frac{d^{n-1} x(t)}{dt^{n-1}} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_1(t)}{dt} = \frac{dx(t)}{dt} = x_2(t) \\ \frac{dx_2(t)}{dt} = \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = x_3(t) \\ \vdots \\ \frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{d^i x(t)}{dt^i} = x_{i+1}(t) \\ \vdots \\ \frac{dx_n(t)}{dt} = \frac{d^n x(t)}{dt^n} = f[t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)] \end{array} \right.$$

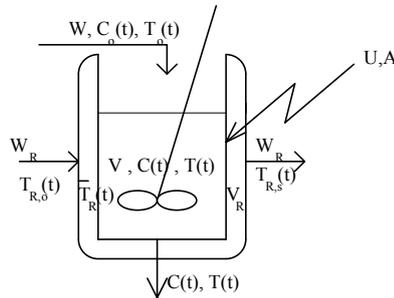
Este sistema de EDO's pode ser representado em termos matriciais na forma:

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{f}[t, \mathbf{x}(t)] \text{ sujeito à condição inicial: } \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$$

$$\text{onde: } \mathbf{x}(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{f}[t, \mathbf{x}(t)] = \begin{pmatrix} x_2(t) \\ x_3(t) \\ \vdots \\ f[t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)] \end{pmatrix}.$$

Em muitos exemplos de dinâmica de processos químicos esta representação matricial surge naturalmente ao aplicar as leis de conservação de massa, energia e quantidade de movimento, como no exemplo abaixo.

Exemplo: Dinâmica de um reator de mistura perfeita não-isotérmico.



Considerando que ocorre no interior do reator uma reação em fase líquida, exotérmica e irreversível de ordem m , tem-se os balanços:

$$\text{Balanço do reagente no interior do reator: } V \frac{dC(t)}{dt} = \frac{W}{\rho} [C_0(t) - C(t)] - k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T(t)}} \cdot [C(t)]^m$$

Balanço de energia no interior do reator:

$$V \rho c_P \frac{dT(t)}{dt} = W c_P [T_0(t) - T(t)] + k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T(t)}} \cdot [C(t)]^m [-\Delta H_{\text{reação}}] - UA [T(t) - \bar{T}_R(t)]$$

Balanço de energia no interior da camisa de refrigeração:

$$V_R \rho_R c_{P,R} \frac{d\bar{T}_R(t)}{dt} = W_R c_{P,R} [T_{R,o}(t) - T_{R,s}(t)] + UA [T(t) - \bar{T}_R(t)]$$

Considerando, por simplicidade, que o valor médio na temperatura no interior da camisa é a média aritmética entre a sua temperatura de entrada e a de saída, isto é:

$$\bar{T}_R = \frac{T_{R,o} - T_{R,s}}{2} \Rightarrow T_{R,o} - T_{R,s} = 2[\bar{T}_R], \text{ resultando assim em:}$$

$$V_R \rho_R c_{P,R} \frac{d\bar{T}_R(t)}{dt} = 2W_R c_{P,R} [T_{R,o}(t) - \bar{T}_R(t)] + UA [T(t) - \bar{T}_R(t)],$$

Ou, dispensando-se o sinal de valor médio:

$$V_R \rho_R c_{P,R} \frac{dT_R(t)}{dt} = 2W_R c_{P,R} [T_{R,o}(t) - T_R(t)] + UA [T(t) - T_R(t)]$$

Estas equações podem ser reescritas em termos das seguintes variáveis adimensionais:

$$\tau = \frac{t}{\rho V / W} ; x = \frac{C}{C_{ref}} ; y = \frac{T}{T_{ref}} ; y_R = \frac{T_R}{T_{ref}} ; x_o = \frac{C_o}{C_{ref}} ; y_o = \frac{T_o}{T_{ref}} ; y_{R,o} = \frac{T_{R,o}}{T_{ref}}$$

originando os seguintes parâmetros adimensionais:

$$Da = k_o [C_{ref}]^{m-1} \cdot e^{-\gamma} ; \gamma = \frac{E}{R \cdot T_{ref}} ; \beta = \frac{C_{ref} (-\Delta H)}{\rho V c_P T_{ref}} ; \lambda = \frac{UA}{W \cdot c_P} ; \lambda_R = \frac{UA}{2W_R \cdot c_{P,R}} e \quad \tau_R = \frac{(\rho_R V_R / 2W_R)}{(\rho V / W)},$$

resultando nas 3 equações diferenciais:

$$\text{Balanço do reagente no interior do reator: } \frac{dx(\tau)}{d\tau} = [x_0(\tau) - x(\tau)] - Da \cdot e^{-\gamma \left[\frac{1}{y(\tau)} - 1 \right]} \cdot [x(\tau)]^m$$

Balanço de energia no interior do reator:

$$\frac{dy(\tau)}{d\tau} = [y_0(\tau) - y(\tau)] + \beta \cdot Da \cdot e^{-\gamma \left[\frac{1}{y(\tau)} - 1 \right]} \cdot [x(\tau)]^m - \lambda [y(\tau) - y_R(\tau)]$$

Balanço de energia no interior da camisa de refrigeração:

$$\tau_R \frac{dy_R(\tau)}{d\tau} = [y_{R,0}(\tau) - y_R(\tau)] + \lambda_R [y(\tau) - y_R(\tau)]$$

Sem perda de generalidade, serão consideradas nestas notas equações diferenciais ordinárias escalares da forma:

$$\frac{dx(t)}{dt} = f[t, x(t)] \text{ para } t > t_0, \text{ sujeita à condição inicial: } x(t_0) = x_0 \quad (1)$$

Sendo o objetivo a determinação dos valores de $x(t)$ no intervalo $t_0 < t \leq t_{final}$.

Para esta equação apresentar solução e esta ser única é necessário que a função $f(t, x)$ seja analítica ou contínua segundo Lipschitz*. Nos exemplos a serem apresentados a existência e unicidade de solução serão sempre garantidas.

A solução *exata* da equação (1) é uma curva no plano (t, x) que passa por (t_0, x_0) e a solução numérica do problema é um conjunto de pontos $[(t_i, u_i)]_{i=0}^N$, com $u_0 = x_0$ e u_i para $i > 0$ é uma aproximação de $x(t_i)$. Note que a solução numérica do problema é apenas um conjunto discreto de pontos, e nada é dito sobre seus valores entre esses pontos.

Para distinguir da solução exata do problema (1) é também considerada uma terceira variável $y(t)$ que é a solução **exata** do problema no intervalo: $t_{i-1} < t \leq t_i$ a partir da condição no início do intervalo: $y(t_{i-1}) = u_{i-1}$, isto é, $y(t)$ é solução de:

$$\frac{dy(t)}{dt} = f[t, y(t)] \text{ para } t_{i-1} < t \leq t_i \text{ sujeita à condição inicial: } y(t_{i-1}) = u_{i-1} \quad (2)$$

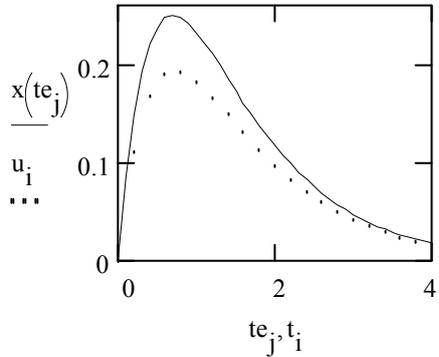
Desse modo, há dois erros da integração numérica de (1):

* $f(t, x)$ é contínua segundo Lipschitz se existir uma constante real $K > 0$ tal que para qualquer $x_1(t)$ e $x_2(t)$ tem-se $\|f(t, x_1) - f(t, x_2)\|_f \leq K \|x_1(t) - x_2(t)\|_x$.

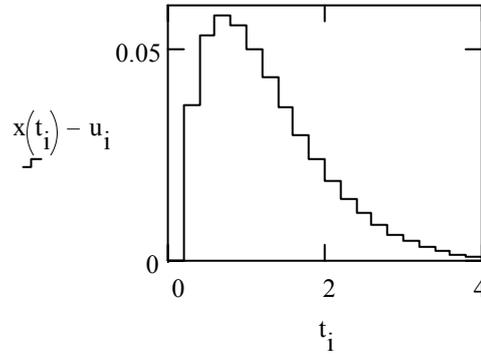
(a) Erro por passo: (ou erro local) é o erro da integração numérica de (2) no final do intervalo, isto é, $t = t_i$, assim: $e_{\text{passo}}(t_i) = y(t_i) - u_i$;

(b) Erro global: é o erro da integração numérica de (1) no final do intervalo, isto é, $t = t_i$, assim: $e_{\text{global}}(t_i) = x(t_i) - u_i$.

Nas figuras abaixo representam-se as soluções exatas e numéricas e o erro numérico:



Linha cheia: solução exata
Pontos: solução numérica



Erro Global da integração numérica
solução exata - solução numérica

Quando a função f da equação (1) não depende explicitamente de t diz-se que o sistema é invariante com o tempo, podendo-se sempre adotar $t_0 = 0$, o que equivale a considerar como variável independente o tempo transcorrido a partir de t_0 , isto é a nova variável independente é $(t - t_0)$.

Os métodos numéricos de integração de EDO's podem ser classificados de diferentes formas. Classificando-os quanto à dependência a valores anteriores da variável independente tem-se:

(i) Métodos de Passo Simples: quando o valor da variável dependente no final do intervalo depende apenas do valor no início do intervalo. Assim, se o método é de passo simples, tem-se: $u_i = g[t_i, (t_{i-1}, u_{i-1})]$;

(ii) Métodos de Passos Múltiplos: quando o valor da variável dependente não depende apenas do seu valor no início do intervalo, mas também de intervalos anteriores. Assim, se o método é de passos múltiplos, tem-se: $u_i = g[t_i, (t_{i-1}, u_{i-1}), (t_{i-2}, u_{i-2}), \dots, (t_{i-m}, u_{i-m})]$.

Esses métodos também podem ser classificados como explícitos ou implícitos caso o valor da variável dependente independa ou dependa, respectivamente, dela mesma. Então para:

- método de passo simples e explícito tem-se: $u_i = g[t_i, (t_{i-1}, u_{i-1})]$;

- método de passo simples e implícito: $u_i = g[(u_i, t_i), (t_{i-1}, u_{i-1})]$;

- método de passos múltiplos e explícito: $u_i = g[t_i, (t_{i-1}, u_{i-1}), (t_{i-2}, u_{i-2}), \dots, (t_{i-m}, u_{i-m})]$;

- método de passos múltiplos e implícito: $u_i = g[(t_i, u_i), (t_{i-1}, u_{i-1}), (t_{i-2}, u_{i-2}), \dots, (t_{i-m}, u_{i-m})]$.

Note que nos métodos implícitos deve se associar ao algoritmo de integração um algoritmo de resolução de equações não-lineares (geralmente o método de Newton-Raphson),

desse modo o processo de integração torna-se mais *lento* demandando a cada passo de integração o cômputo (analítico ou numérico) da matriz jacobiana do sistema, necessária à aplicação do método de Newton-Raphson.

Os métodos podem também ser classificados como de passo fixo quando $t_i = i \cdot h$, sendo h o intervalo de integração, e de passo variável quando $t_i = t_{i-1} + h_i$, isto é o intervalo de integração h varia com i . Os métodos de passos variável são, via de regra, mais eficientes e robustos, demandando entretanto que ao algoritmo de integração seja acoplado um algoritmo de seleção do tamanho de passo que é geralmente de natureza heurística. Nos métodos descritos a seguir, considerar-se-á, por simplicidade, o intervalo de integração como constante, havendo ao final do capítulo uma leve menção aos algoritmos de seleção de passo, assunto este que foge ao escopo do presente curso.

7.1 Métodos de Euler

Este é o método mais simples e antigo utilizado na resolução numérica de EDO's, podendo ser interpretado de três formas distintas, na integração de (2).

(a) Diferenças Finitas: aproximando a derivada contínua na forma: $\frac{dy(t)}{dt} \cong \frac{u_i - u_{i-1}}{h}$ e considerando-a igual a seu valor no início do intervalo (método explícito) tem-se:

$\frac{dy(t)}{dt} \cong \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = f[t_{i-1}, u_{i-1}]$, resultando no procedimento recursivo:

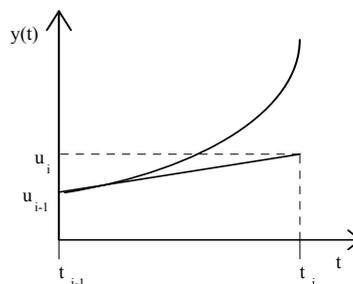
$$u_i = u_{i-1} + h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}] \text{ para } i = 1, 2, \dots, n = \frac{t_{\text{final}} - t_0}{h} \text{ com } u_0 = x_0$$

(b) Aproximação Linear de $x(t)$: neste caso em vista de no início do intervalo:

$y(t_{i-1}) = u_{i-1}$ e $\left. \frac{dy(t)}{dt} \right|_{t_{i-1}} = f[t_{i-1}, u_{i-1}]$, aproxima-se $y(t)$ no intervalo pela reta:

$y(t) \cong u_{i-1} + f[t_{i-1}, u_{i-1}] \cdot (t - t_{i-1})$ para $t_{i-1} < t < t_i = t_{i-1} + h$, assim em t_i tem-se:

$y(t_i) \cong u_i = u_{i-1} + f[t_{i-1}, u_{i-1}] \cdot h$, resultado análogo ao anterior e que pode ser interpretado graficamente na forma:



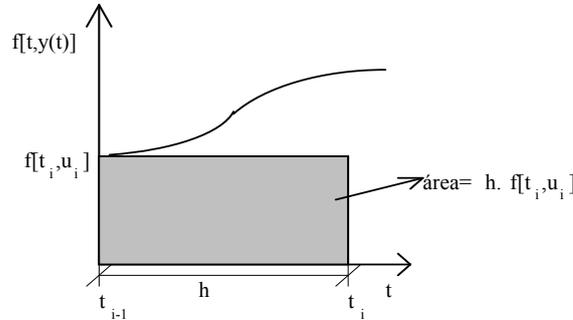
(c) Por Integração Retangular: a integração de membro a membro de (1) de t_{i-1} a t_i resulta em:

$$y(t_i) = u_{i-1} + \int_{t_{i-1}}^{t_i} f[t, y(t)] dt, \text{ considerando no integrando que:}$$

$$f[t, y(t)] \cong f[t_{i-1}, u_{i-1}] \Rightarrow \int_{t_{i-1}}^{t_i} f[t, y(t)] dt \cong h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}], \text{ resultando em:}$$

$$y(t_i) \cong u_i = u_{i-1} + h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}].$$

Este procedimento pode ser representado graficamente por:



Deste modo o **método explícito de Euler** pode ser expresso, independente de sua interpretação, pelo algoritmo recursivo:

$$u_i = u_{i-1} + h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}] \text{ para } i = 1, 2, \dots, n = \frac{t_{\text{final}} - t_0}{h} \text{ com } u_0 = x_0 \quad (3)$$

Exemplo Ilustrativo: Aplicando o método explícito de Euler a EDO de primeira ordem, linear e homogênea:

$$\frac{dx(t)}{dt} = -a \cdot x(t) \text{ onde } a > 0 \text{ e } x(0) = 1, \text{ cuja solução analítica é: } x(t) = e^{-a \cdot t}, \text{ identificando:}$$

$$f[t, x(t)] = -a \cdot x(t), \text{ tem-se de (3):}$$

$$u_i = u_{i-1} - h \cdot a \cdot u_{i-1} = [1 - a \cdot h] \cdot u_{i-1}, \text{ com } u_0 = 1.$$

como $[1 - a \cdot h]$ é constante, tem-se: $u_i = [1 - a \cdot h]^i$ para $i = 1, 2, \dots$, que é uma progressão geométrica de razão $[1 - a \cdot h]$ e primeiro termo = 1, deste modo este procedimento só será convergente se: $|1 - a \cdot h| < 1$, havendo pois 3 possibilidades:

$$1 - a \cdot h < -1 \Rightarrow h > \frac{2}{a} : \text{ não convergente e oscilatório;}$$

$$-1 < 1 - a \cdot h < 0 \Rightarrow \frac{1}{a} < h < \frac{2}{a} : \text{ convergente e oscilatório;}$$

$$0 < 1 - a \cdot h < 1 \Rightarrow h < \frac{1}{a} : \text{ convergente e não-oscilatório.}$$

Note que como $h > 0$ não é possível $1 - a \cdot h > 1 \Rightarrow a \cdot h < 0$, pois se considerou $a > 0$, isto só ocorreria se $a < 0$ quando a própria solução analítica aumentaria também monotonicamente com t .

Estas três possibilidades são ilustradas nas figuras abaixo:

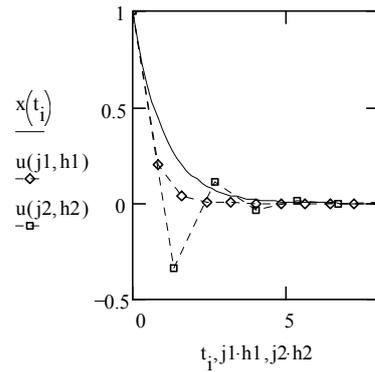


Fig:1- Curva cheia solução analítica

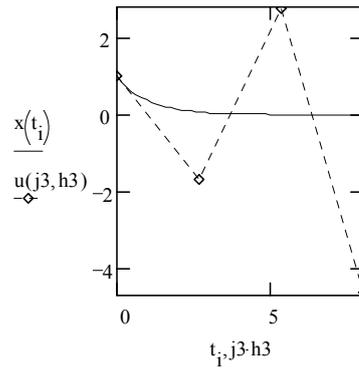
Losangos: $h < 1/a$ Quadrados: $1/a < h < 2/a$ 

Fig:2- Curva cheia solução analítica

Curva pontilhada $h > 2/a$

Caso no procedimento acima a derivada de $x(t)$, na interpretação do método por diferenças finitas, fosse computada no final do intervalo ter-se-ia:

$$\frac{dy(t)}{dt} \cong \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = f[t_i, u_i], \text{ resultando no procedimento recursivo implícito:}$$

$$u_i = u_{i-1} + h \cdot f[t_i, u_i] \text{ para } i = 1, 2, \dots, n = \frac{t_{\text{final}} - t_0}{h} \text{ com } u_0 = x_0 \quad (4)$$

este procedimento é o **método de Euler implícito** que demanda, em cada intervalo de integração, a utilização de um algoritmo de resolução de equação não-linear.

Exemplo Ilustrativo: Aplicando o método implícito de Euler a mesma EDO do exemplo anterior, tem-se:

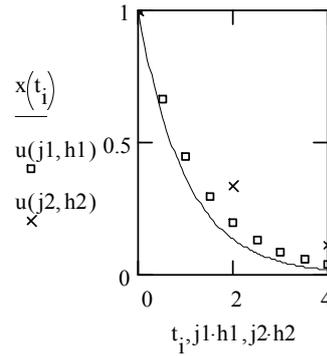
$$u_i = u_{i-1} - h \cdot a \cdot u_i, \text{ com } u_0 = 1.$$

devido à natureza linear do problema é possível, e apenas neste caso, explicitar o valor de u_i , na expressão acima resultando assim em:

$$u_i = \frac{u_{i-1}}{1 + h \cdot a}, \text{ com } u_0 = 1.$$

ou seja $u_i = \frac{1}{(1 + h \cdot a)^i} < 1$ para todo $i > 0$, deste modo este procedimento é sempre

convergente e não-oscilatório para qualquer valor positivo de h . Com isto caracteriza-se a *robustez* do método que é sempre estável. A seguir compara-se graficamente a solução analítica do problema com a solução numérica, pelo método de Euler implícito para dois valores de h .



Curva contínua: solução analítica

Quadrados: solução numérica com $h = 0,5/a$

x: solução numérica com $h = 2/a$

Para caracterizar a precisão do método assim procede-se:

(i) expandindo $y(t)$ em torno de t_{i-1} com $y(t_{i-1}) = u_{i-1}$, tem-se:

$$y(t) = u_{i-1} + \left. \frac{dy(t)}{dt} \right|_{t_{i-1}} \cdot (t - t_{i-1}) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 y(t)}{dt^2} \right|_{t_{i-1}} \cdot (t - t_{i-1})^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3 y(t)}{dt^3} \right|_{t_{i-1}} \cdot (t - t_{i-1})^3 + \dots$$

$$\text{mas } \frac{dy(t)}{dt} = f[t, y(t)] ; \quad \frac{d^2 y(t)}{dt^2} = \frac{\partial f[t, y(t)]}{\partial t} + f[t, y(t)] \cdot \frac{\partial f[t, y(t)]}{\partial y} ;$$

$$\begin{aligned} \frac{d^3 y(t)}{dt^3} &= \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial f[t, y(t)]}{\partial t} + f[t, y(t)] \cdot \frac{\partial f[t, y(t)]}{\partial y} \right] = \frac{\partial^2 f[t, y(t)]}{\partial t^2} + 2f[t, y(t)] \cdot \frac{\partial^2 f[t, y(t)]}{\partial t \partial y} + \\ &+ \{f[t, y(t)]\}^2 \cdot \frac{\partial^2 f[t, y(t)]}{\partial y^2} + \left[\frac{\partial f[t, y(t)]}{\partial t} + f[t, y(t)] \cdot \frac{\partial f[t, y(t)]}{\partial y} \right] \cdot \frac{\partial f[t, y(t)]}{\partial y} \end{aligned}$$

em vista de em $t = t_{i-1}$ ter-se $y(t) = u_{i-1}$, e adotando a notação simplificada:

$$f(t_{i-1}, u_{i-1}) = f_{i-1} ; \quad \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{t_{i-1}} = f_{t, i-1} ; \quad \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{t_{i-1}} = f_{y, i-1} ; \quad \left. \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right|_{t_{i-1}} = f_{tt, i-1} ; \quad \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial t} \right|_{t_{i-1}} = f_{yt, i-1} ;$$

$$\text{e } \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{t_{i-1}} = f_{yy, i-1}, \text{ tem-se:}$$

$$\left. \frac{dy(t)}{dt} \right|_{t_{i-1}} = f_{i-1} ; \quad \left. \frac{d^2 y(t)}{dt^2} \right|_{t_{i-1}} = f_{t, i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y, i-1} ;$$

$$\left. \frac{d^3 y(t)}{dt^3} \right|_{t_{i-1}} = f_{tt, i-1} + 2f_{i-1} \cdot f_{ty, i-1} + \{f_{i-1}\}^2 \cdot f_{yy, i-1} + [f_{t, i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y, i-1}] \cdot f_{y, i-1},$$

resultando finalmente para $t = t_i$:

$$y(t_i) = u_{i-1} + h \cdot f_{i-1} + \frac{h^2}{2} [f_{t,i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y,i-1}] + \frac{h^3}{6} \left\langle f_{tt,i-1} + 2f_{i-1} \cdot f_{ty,i-1} + \{f_{i-1}\}^2 \cdot f_{yy,i-1} + [f_{t,i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y,i-1}] \cdot f_{y,i-1} \right\rangle + \mathcal{O}[h^4] \quad (5)$$

onde $\mathcal{O}[h^4]$ designa termos de ordem igual e maior que h^4 .

(ii) Método de Euler explícito: $u_i = u_{i-1} + h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}]$, reproduz a expansão (5) apenas até o termo em h , isto é o erro local contém termos de ordem igual ou superior a h^2 , que pode ser representado pela notação: $\text{erro}_{\text{passo}}(t_i) = \mathcal{O}[h^2]$ ou $|\text{erro}_{\text{passo}}(t_i)| \leq C_i \cdot h^2$ com $C_i > 0$.

Método de Euler implícito: $u_i = u_{i-1} + h \cdot f[t_i, u_i]$, expandindo o termo $f[t_i, u_i]$ em série de Taylor em torno de $[t_{i-1}, u_{i-1}]$, tem-se:

$$f[t_i, u_i] \cong f[t_{i-1}, u_{i-1}] + \frac{\partial f(t, u)}{\partial t} \Big|_{i-1} \cdot (t_i - t_{i-1}) + \frac{\partial f(t, u)}{\partial u} \Big|_{i-1} \cdot (u_i - u_{i-1}), \text{ mas } t_i - t_{i-1} = h,$$

logo $f[t_i, u_i] \cong f_{i-1} + f_{t,i-1} \cdot h + f_{y,i-1} \cdot (u_i - u_{i-1})$, resultando finalmente em:

$$u_i \cong u_{i-1} + h \cdot f_{i-1} + f_{t,i-1} \cdot h^2 + f_{y,i-1} \cdot (u_i - u_{i-1}) \cdot h$$

a expansão de u_i em vista de com $h = 0 \rightarrow u_i = u_{i-1}$ é $u_i = u_{i-1} + a_1 \cdot h + a_2 \cdot h^2 + \dots$, assim:

$$u_{i-1} + a_1 \cdot h + a_2 \cdot h^2 + \dots \cong u_{i-1} + h \cdot f_{i-1} + f_{t,i-1} \cdot h^2 + f_{y,i-1} \cdot (a_1 \cdot h + a_2 \cdot h^2 + \dots) \cdot h =$$

$$= u_{i-1} + f_{i-1} \cdot h + [f_{t,i-1} + a_1 \cdot f_{y,i-1}] \cdot h^2 \Rightarrow a_1 = f_{i-1} ; a_2 = f_{t,i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y,i-1}$$

que reproduz a expansão (5) apenas até o termo em h , isto é o erro local contém termos de ordem igual ou superior a h^2 , que pode ser representado pela notação: $\text{erro}_{\text{passo}}(t_i) = \mathcal{O}[h^2]$.

Desta forma, os dois métodos de Euler apresentados (implícito e explícito) apresentam o erro local de mesma ordem, ambos são de segunda ordem por passo.

Para avaliar o erro global assim procede-se:

Primeiro passo: o primeiro passo é o único passo de integração no qual o valor inicial utilizado é o exato, assim neste passo, e apenas neste, $y(t) = x(t)$ resultando em:

$$|e_{\text{passo}}(t_1)| = |y(t_1) - u_1| = |x(t_1) - u_1| \leq C_1 \cdot h^2$$

$$\text{Segundo passo: } |e_{\text{passo}}(t_2)| = |y(t_2) - u_2| \leq C_2 \cdot h^2$$

.....

$$i^{\text{ésimo}} \text{ passo: } |e_{\text{passo}}(t_i)| = |y(t_i) - u_i| \leq C_i \cdot h^2$$

.....

$$n^{\text{ésimo}} \text{ passo: } |e_{\text{passo}}(t_n)| = |y(t_n) - u_n| \leq C_n \cdot h^2$$

Desta forma, o erro acumulado após n passos de integração (erro global) é:

$$|e_{\text{global}}(t_n)| = \sum_{i=1}^n |e_{\text{passo}}(t_i)| \leq h^2 \cdot \sum_{i=1}^n C_i, \text{ mas } t_n = t_{\text{final}} \text{ e } h = \frac{t_{\text{final}} - t_0}{n}, \text{ considerando } C_M$$

o maior dos valores de C_i , tem-se: $\sum_{i=1}^n C_i \leq n \cdot C_M$, resultando em:

$$|e_{\text{global}}(t_{\text{final}})| \leq h^2 \cdot n \cdot C_M = (t_{\text{final}} - t_0) \cdot C_M \cdot h = C^{\text{te}} \cdot h, \text{ isto é o erro global do procedimento numérica é da ordem de } h, \mathcal{O}[h], \text{ portanto uma ordem inferior ao erro local.}$$

Nos métodos numéricos de integração que serão aqui apresentados tem-se como regra: *se o erro de integração por passo é de ordem $(m+1)$ o erro acumulado após n passos é sempre de ordem m* . Os métodos de integração de EDO's podem também ser classificados segundo sua ordem de precisão que é a ordem do erro acumulado após n [>1] passos de integração, deste modo o método de Euler é um método de primeira ordem.

O conhecimento da ordem do método pode também ser útil ao desenvolvimento de método uma ordem superior através do procedimento conhecido como **método de extrapolação de Richardson**, assim se o método é de ordem m tem-se:

$$e_{\text{global}}(t_{\text{final}}) = x(t_{\text{final}}) - u_n = C \cdot h^m \text{ em que } : h = \frac{t_{\text{final}} - t_0}{n}$$

Utilizando um passo de integração h_1 tem-se o valor integrado de x em $t_n = u_{n_1}^{(1)}$ e utilizando um passo de integração h_2 tem-se o valor integrado de x em $t_n = u_{n_2}^{(2)}$, permitindo construir:

Número de Passos	Intervalo de Integração	Valor integrado	Erro acumulado (aproximado)
n_1	$h_1 = \frac{t_{\text{final}} - t_0}{n_1}$	$u_{n_1}^{(1)}$	$x(t_{\text{final}}) - u_{n_1}^{(1)} = C \cdot h_1^m$
$n_2 > n_1$	$h_2 = \frac{t_{\text{final}} - t_0}{n_2}$	$u_{n_2}^{(2)}$	$x(t_{\text{final}}) - u_{n_2}^{(2)} = C \cdot h_2^m$

Explicitando o valor de C nas expressões do erro acumulado, tem-se:

$$C = \frac{x(t_{\text{final}}) - u_{n_1}^{(1)}}{h_1^m} = \frac{x(t_{\text{final}}) - u_{n_2}^{(2)}}{h_2^m}, \text{ permitindo calcular:}$$

$$x(t_{\text{final}}) = u_{n_2}^{(2)} + \frac{u_{n_2}^{(2)} - u_{n_1}^{(1)}}{(h_1/h_2)^m - 1} = u_{n_2}^{(2)} + \frac{u_{n_2}^{(2)} - u_{n_1}^{(1)}}{(n_2/n_1)^m - 1}.$$

Entretanto, este é ainda um valor aproximado de $x(t_{\text{final}})$ sendo denominado de $u_{\text{final, melhorado}}$, ou seja:

$$u_{\text{final, melhorado}} = u_{n_2}^{(2)} + \frac{u_{n_2}^{(2)} - u_{n_1}^{(1)}}{(n_2/n_1)^m - 1} \quad (6)$$

O valor de $|u_{n_2}^{(2)} - u_{n_1}^{(1)}|$ pode também ser utilizado como uma avaliação do erro de integração e, em muitos códigos numéricos, é um critério utilizado para a seleção automática do passo de integração.

Geralmente utiliza-se $n_2 = 2 n_1$, assim, neste caso, tem-se: $u_{final, melhorado} = u_{n_2}^{(2)} + \frac{u_{n_2}^{(2)} - u_{n_1}^{(1)}}{2^m - 1}$ (7)

Aplicando este procedimento ao método explícito de Euler, tem-se:

$u_i^{(1)} = u_{i-1} + h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}]$, com intervalo de integração igual a h ;

$$\begin{cases} u_{i-1/2}^{(2)} = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}] \\ u_i^{(2)} = u_{i-1/2}^{(2)} + \frac{h}{2} \cdot f[t_{i-1} + \frac{h}{2}, u_{i-1/2}^{(2)}] \end{cases} \text{ com intervalo de integração igual a } h/2.$$

Assim: $u_{i, melhorado} = u_i^{(2)} + \frac{u_i^{(2)} - u_i^{(1)}}{2-1} = 2 \cdot u_i^{(2)} - u_i^{(1)}$

Uma forma mais adequada para implementar este procedimento numérico é definindo:

$$\begin{cases} g_1 = h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}] \\ g_2 = h \cdot f[t_{i-1} + \frac{h}{2}, u_{i-1} + \frac{g_1}{2}] \end{cases} \Rightarrow u_i = u_{i-1} + g_2 \quad (8)$$

Este algoritmo traduz o **método de Euler modificado** que é um método com dois estágios/passo e de 2ª ordem. Uma outra modificação do método de Euler é também encontrada na literatura e é expressa pelo algoritmo:

$$\begin{cases} g_1 = h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}] \\ g_2 = h \cdot f[t_{i-1} + h, u_{i-1} + g_1] \end{cases} \Rightarrow u_i = u_{i-1} + \frac{g_1 + g_2}{2} \quad (9)$$

Este procedimento é chamado de **método de Euler melhorado** que é também um método com dois estágios/passo e também de 2ª ordem.

Os dois últimos procedimentos podem ser expressos na forma geral:

$$\begin{cases} g_1 = h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}] \\ g_2 = h \cdot f[t_{i-1} + c \cdot h, u_{i-1} + c \cdot g_1] \end{cases} \Rightarrow u_i = u_{i-1} + w_1 \cdot g_1 + w_2 \cdot g_2 \quad (10)$$

Os coeficientes c , w_1 e w_2 são determinados de modo a reproduzir a expansão em série de Taylor, Eq. (5), até o termo de h^2 . Isto pode ser feito expandindo o lado direito de g_2 em série de Taylor em torno de $[t_{i-1}, u_{i-1}]$, assim:

$$g_2 = h \cdot f[t_{i-1} + c \cdot h, u_{i-1} + c \cdot g_1] \cong h \left\{ f[t_{i-1}, u_{i-1}] + c \cdot [h \cdot f_{t,i-1} + f_{y,i-1} \cdot g_1] \right\}$$

Mas g_1 é, pela notação introduzida na expansão (5): $h \cdot f_{i-1}$, assim:

$$\begin{cases} g_1 = h \cdot f_{i-1} \\ g_2 \cong h \cdot f_{i-1} + c \cdot h^2 [f_{t,i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y,i-1}] \end{cases}, \text{ logo:}$$

$$u_i = u_{i-1} + w_1 \cdot g_1 + w_2 \cdot g_2 \cong u_{i-1} + (w_1 + w_2) \cdot h \cdot f_{i-1} + w_2 \cdot c \cdot h^2 [f_{t,i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y,i-1}],$$

Comparando com os termos em h e em h^2 de (5), tem-se: $\begin{cases} w_1 + w_2 = 1 \\ w_2 \cdot c = \frac{1}{2} \end{cases}$

Estas são as chamadas **equações de ordem** do método e qualquer valor de w_1 , w_2 e c que as satisfaçam garantem que o erro local é de ordem de h^3 o que resulta em um erro acumulado, após n [>1] passos de integração, de ordem de h^2 .

Note que este sistema de equações contém mais incógnitas do que equações permitindo, assim, que uma das constantes seja arbitrada, a única restrição que se impõe é que a variável t permaneça no intervalo $(t_{i-1}, t_i]$, o que implica em $0 < c \leq 1$.

No método modificado de Euler se utiliza $c=1/2$ o que implica em $w_2 = 1$ e $w_1 = 0$ e no método melhorado de Euler se utiliza $c = 1$ implicando em $w_2 = 1/2$ e em $w_1 = 1/2$.

Exemplo Ilustrativo: Aplicando os métodos de Euler aprimorados à EDO de primeira ordem,

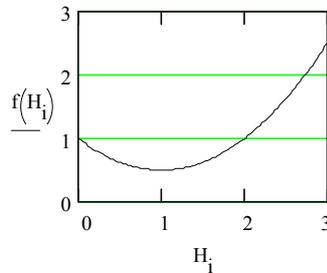
linear e homogênea: $\frac{dx(t)}{dt} = -a \cdot x(t)$, em que $a > 0$ e $x(0) = 1$, cuja solução analítica é $x(t) = e^{-at}$, identificando: $f[t, x(t)] = -a \cdot x(t)$, tem-se de (10):

$$\begin{cases} g_1 = -h \cdot a \cdot u_{i-1} \\ g_2 = -h \cdot a \cdot [u_{i-1} - c \cdot h \cdot a \cdot u_{i-1}] = -h \cdot a \cdot u_{i-1} + c \cdot h^2 \cdot a^2 \cdot u_{i-1} \end{cases}$$

$$u_i = u_{i-1} + w_1 \cdot g_1 + w_2 \cdot g_2 = \left[1 - (w_1 + w_2) a \cdot h + w_2 \cdot c \cdot a^2 \cdot h^2 \right] u_{i-1},$$

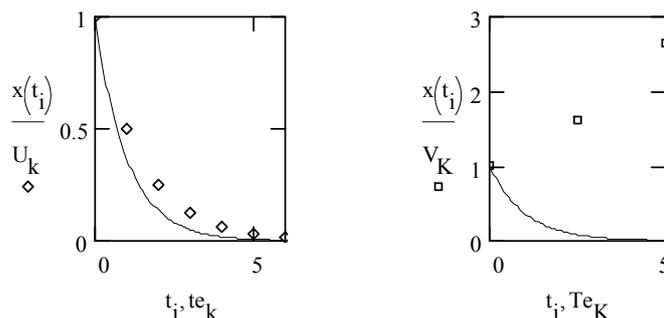
Com as equações de ordem tem-se: $u_i = \left[1 - a \cdot h + \frac{a^2 \cdot h^2}{2} \right] u_{i-1} \Rightarrow u_i = \left[1 - a \cdot h + \frac{a^2 \cdot h^2}{2} \right]^i$

Que será convergente se: $\left| 1 - a \cdot h + \frac{a^2 \cdot h^2}{2} \right| < 1 \Rightarrow a \cdot h < 2$ ou seja: $0 < h < \frac{2}{a}$, não havendo, neste caso, a possibilidade do procedimento ser oscilatório, o que pode ser visualizado no gráfico de $1 - a \cdot h + \frac{a^2 \cdot h^2}{2}$ versus $a \cdot h = H$:



Eixo horizontal: $a \cdot h$ - Eixo vertical: $1 - a \cdot h + \frac{a^2 \cdot h^2}{2}$

Nas figuras abaixo se mostram duas integrações numéricas da equação diferencial em questão, a primeira com $h < 2/a$ [convergente] e a segunda com $h > 2/a$ [não convergente]:



Uma outra modificação do método de Euler é o método de **Crank-Nicolson** (ou **trapézios**), que é um método implícito com erro local de ordem de h^3 e tem a forma:

$$u_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot \{f[t_i, u_i] + f[t_{i-1}, u_{i-1}]\}$$

Que pode ser prontamente verificada pela expansão de $y(t)$ e $f[t, y(t)]$ em séries de Taylor em torno de $t_{i-1/2} = t_i - h/2$, e então subtraindo $y(t_{i-1})$ de $y(t_i)$ e adicionado $f[t_{i-1}, y(t_{i-1})]$ a $f[t_i, y(t_i)]$ para eliminar $f[t_{i-1/2}, y(t_{i-1/2})]$ da expansão de $y(t)$.

7.2 Métodos de Runge-Kutta

As duas formas aprimoradas do método de Euler apresentadas no item anterior puderam ser representadas de uma forma geral por:

$$\begin{cases} g_1 = h \cdot f[t_{i-1}, u_{i-1}] \\ g_2 = h \cdot f[t_{i-1} + c \cdot h, u_{i-1} + c \cdot g_1] \end{cases} \Rightarrow u_i = u_{i-1} + w_1 \cdot g_1 + w_2 \cdot g_2 \quad (10)$$

com: $\begin{cases} w_1 + w_2 = 1 \\ w_2 \cdot c = \frac{1}{2} \end{cases}$, este procedimento é também conhecido como **método de Runge-Kutta**

explícito, de segunda ordem e dois estágios. Podendo ser generalizado por:

$$\begin{cases} g_k = h \cdot f \left[t_{i-1} + c_k \cdot h, u_{i-1} + \sum_{j=1}^v (a_{kj} \cdot g_j) \right] \text{ para } k=1, 2, \dots, v \\ u_i = u_{i-1} + \sum_{j=1}^v (w_j \cdot g_j) \end{cases} \quad (11)$$

Sendo v o número de estágios por passo e os coeficientes $c_1, c_2, \dots, c_v, a_{11}, a_{12}, \dots, a_{vv}, w_1, w_2, \dots, w_v$ são determinados de modo a satisfazer as equações de ordem do método. Tais coeficientes são apresentados em um arranjo proposto por Butcher:

c_1	a_{11}	a_{12}	...	a_{1v}
c_2	a_{21}	a_{22}	...	a_{2v}
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
c_v	a_{v1}	a_{v2}	...	a_{vv}
	w_1	w_2	...	w_v

Caso $a_{ij} = 0$ para $j \geq i$ (não há termos não nulos da matriz A na diagonal e sobre a diagonal) o método é chamado de **explícito**, caso $a_{ij} = 0$ para $j > i$ (não há termos não nulos da matriz A sobre a diagonal) o método é chamado de **semi-implícito** e caso exista algum termos não nulo sobre a diagonal de A o método é chamado de **implícito**.

A seguir apresentam-se alguns dos métodos de Runge-Kutta mais conhecidos:

Método de Euler Explícito ou Método de Runge-Kutta de Primeira Ordem:

0	0
1	1

Método de Euler Melhorado ou Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem:

0	0	0
1	1	0
	1/2	1/2

Método de Euler Modificado ou Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem:

0	0	0
1/2	1/2	0
	0	1

Método de Runge-Kutta de Terceira Ordem:

0	0	0	0
1/2	1/2	0	0
1	-1	2	0
	1/6	2/3	1/6

Método de Runge-Kutta de Quarta-Ordem (Forma Padrão):

0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0
1/2	0	1/2	0	0
1	0	0	1	0
	1/6	1/3	1/3	1/6

Método de Runge-Kutta-Gill de Quarta-Ordem:

0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0
1/2	1/√2 - 1/2	1 - 1/√2	0	0
1	0	-1/√2	1 + 1/√2	0
	1/6	1/3[1 - 1/√2]	1/3[1 + 1/√2]	1/6

Método de Runge-Kutta de Quinta Ordem de Butcher:

0	0	0	0	0	0	0
1/4	1/4	0	0	0	0	0
1/4	1/8	1/8	0	0	0	0
1/2	0	-1/2	1	0	0	0
3/4	3/16	0	0	9/16	0	0
1	-3/7	2/7	12/7	-12/7	8/7	0
	7/90	0	32/90	12/90	32/90	7/90

Método de Euler Implícito ou Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem:

$$\begin{array}{c|c} 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Este último método pode ser deduzido considerando-se a forma geral do método de Euler implícito: $g_1 = h \cdot f[t_{i-1} + c \cdot h, u_{i-1} + c \cdot g_1]$ e $u_i = u_{i-1} + w_1 \cdot g_1$.

Expandindo $f[t_{i-1} + c \cdot h, u_{i-1} + c \cdot g_1]$ em série de Taylor em torno de $[t_{i-1}, u_{i-1}]$, tem-se: $g_1 = f_{i-1} \cdot h + [f_{t,i-1} \cdot h + f_{y,i-1} \cdot g_1] \cdot c \cdot h + \dots$ mas, em vista de $g_1 = 0$ com $h = 0$, tem-se também: $g_1 = a_1 \cdot h + a_2 \cdot h^2 + \dots$ que é substituído em ambos os membros da expansão anterior, resultando em: $a_1 \cdot h + a_2 \cdot h^2 + \dots = [f_{i-1}] \cdot h + [f_{t,i-1} + a_1 \cdot f_{y,i-1}] \cdot c \cdot h^2 + \dots$, igualando os termos equipotentes de h em ambos os membros, têm-se:

$$a_1 = f_{i-1}$$

$$a_2 = [f_{t,i-1} + a_1 \cdot f_{y,i-1}] \cdot c = [f_{t,i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y,i-1}] \cdot c$$

Assim: $g_1 = f_{i-1} \cdot h + [f_{t,i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y,i-1}] \cdot c \cdot h^2$ e $u_i = u_{i-1} + w_1 \cdot f_{i-1} \cdot h + [f_{t,i-1} + f_{i-1} \cdot f_{y,i-1}] \cdot w_1 \cdot c \cdot h^2 + \dots$

Que, para reproduzir a expansão (5) até o termo em h^2 , deve-se ter: $w_1 = 1$ e $w_1 \cdot c = 1/2 \rightarrow c = 1/2$, deste modo o algoritmo de integração:

$g_1 = h \cdot f\left[t_{i-1} + \frac{h}{2}, u_{i-1} + \frac{g_1}{2}\right]$ e $u_i = u_{i-1} + g_1$, apresenta um erro local da ordem de h^3 e um erro acumulado após n [$n > 1$] passos de integração da ordem de h^2 .

O método de Euler semi-implícito de segunda ordem é também chamado de *método do ponto médio*.

Tendo em vista que $g_1 = u_i - u_{i-1} \rightarrow u_{i-1} + \frac{g_1}{2} = u_{i-1} + \frac{u_i - u_{i-1}}{2} = \frac{u_{i-1} + u_i}{2}$, o método pode também ser representado pela expressão: $u_i = u_{i-1} + h \cdot f\left[t_{i-1} + \frac{h}{2}, \frac{u_{i-1} + u_i}{2}\right]$

Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem-Implicito (dois estágios):

$1/2-\sqrt{3}/6$	$1/4$	$1/4-\sqrt{3}/6$
$1/2+\sqrt{3}/6$	$1/4+\sqrt{3}/6$	$1/4$
	$1/2$	$1/2$

Para ilustrar esta notação, tomando o método de Runge-Kutta explícito de quarta ordem na forma padrão, temos então:

$$\begin{aligned}
 g_1 &= h f[t_{i-1}, u_{i-1}] \\
 g_2 &= h f\left[t_{i-1} + \frac{h}{2}, u_{i-1} + \frac{1}{2}g_1\right] \\
 g_3 &= h f\left[t_{i-1} + \frac{h}{2}, u_{i-1} + \frac{1}{2}g_2\right] \\
 g_4 &= h f[t_{i-1} + h, u_{i-1} + g_3] \\
 u_i &= u_{i-1} + \frac{1}{6}(g_1 + 2g_2 + 2g_3 + g_4)
 \end{aligned}$$

7.3 Métodos de múltiplos passos

Um método de passo múltiplo aplicado à integração numérica da EDO (2):

$$\frac{dy(t)}{dt} = f[t, y(t)] \text{ para } t_{i-1} < t \leq t_i, \text{ sujeita à condição inicial: } y(t_{i-1}) = u_{i-1} \quad (2)$$

Pode ser interpretado de uma forma geral através da integração de ambos os membros de (2)

de t_{i-1} a t_i : $y(t_i) = u_{i-1} + \int_{t_{i-1}}^{t_i} f[t, y(t)] \cdot dt$, ou mudando a variável de integração de t para

$$z = \frac{t - t_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} = \frac{t - t_{i-1}}{h} \Rightarrow dt = h \cdot dz \text{ e } \begin{cases} t = t_{i-1} \rightarrow z = 0 \\ t = t_i \rightarrow z = 1 \end{cases}, \text{ assim: } y(t_i) = u_{i-1} + h \left[\int_{z=0}^{z=1} f[z, y(z)] \cdot dz \right].$$

Adotando o conhecimento do valor da função $f[t, y(t)]$ em m passos de integração anteriores (considerando o tamanho do passo constante e igual a h), isto é:

t	$f[t, y(t)]$	$z = \frac{t - t_{i-1}}{h}$
t_{i-1}	f_{i-1}	0
t_{i-2}	f_{i-2}	-1
t_{i-3}	f_{i-3}	-2
\vdots	\vdots	\vdots
t_{i-m}	f_{i-m}	$-(m-1)$

Aproximando a função f por um polinômio de grau $(m-1)$ em z , na forma:

$$f[z, y(z)] \cong \sum_{j=1}^m \ell_j(z) \cdot f_{i-j} \quad \text{em que } \ell_j(z) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^m \frac{z+(k-1)}{k-j}, \text{ resultando em:}$$

$$\int_{z=0}^{z=1} f[z, y(z)] \cdot dz \cong \sum_{j=1}^m \left\{ \int_{z=0}^{z=1} \ell_j(z) \cdot dz \right\} \cdot f_{i-j} = \sum_{j=1}^m \beta_{m,j} \cdot f_{i-j}$$

Sendo $\beta_{m,j} = \int_{z=0}^{z=1} \ell_j(z) \cdot dz$. Substituindo esta integral na expressão de $y(t_i)$ tem-se:

$$y(t_i) \cong u_i = u_{i-1} + h \cdot \sum_{j=1}^m \beta_{m,j} \cdot f_{i-j} \quad (12)$$

Este método é chamado de **Método de Adams-Bashforth** estando os valores dos coeficientes $\beta_{m,j}$ tabelados para diferentes m .

Como ilustração seja $m = 3$, assim:

$$f[z, y(z)] \cong \frac{(z+1)(z+2)}{2} \cdot f_{i-1} - z(z+2) \cdot f_{i-2} + \frac{z(z+1)}{2} \cdot f_{i-3}, \text{ logo:}$$

$$\beta_{3,1} = \int_0^1 \frac{(z+1) \cdot (z+2)}{2} \cdot dz = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{3} + \frac{3}{2} + 2 \right] = \frac{23}{12},$$

$$\beta_{3,2} = - \int_0^1 z \cdot (z+2) \cdot dz = - \left[\frac{1}{3} + 1 \right] = -\frac{4}{3} = -\frac{16}{12} \quad \text{e}$$

$$\beta_{3,3} = \int_0^1 \frac{z \cdot (z+1)}{2} \cdot dz = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{2} \right] = \frac{5}{12}$$

j	1	2	3	4	5	6	Erro acumulado
$\beta_{1,j}$	1						$\mathcal{O}[h]$
$2\beta_{2,j}$	3	-1					$\mathcal{O}[h^2]$
$12\beta_{3,i}$	23	-16	5				$\mathcal{O}[h^3]$
$24\beta_{4,i}$	55	-59	37	-9			$\mathcal{O}[h^4]$
$720\beta_{5,i}$	1901	-2774	2616	-1274	251		$\mathcal{O}[h^5]$
$1440\beta_{6,i}$	4277	-7923	9982	-7298	2877	-475	$\mathcal{O}[h^6]$

Devido à natureza explícita do método de Adams-Bashforth o mesmo apresenta baixa estabilidade, para superar este problema há uma modificação do método que inclui na integral de $f[t, y(t)]$ o valor de f no final do intervalo, f_i , resultando no algoritmo implícito:

$$y(t_i) \cong u_i = u_{i-1} + h \cdot \sum_{j=0}^{m-1} \hat{\beta}_{m,j} \cdot f_{i-j} \quad (13)$$

Este método é chamado de **Método de Adams-Moulton** estando os valores dos coeficientes $\hat{\beta}_{m,j}$ tabelados para diferentes valores de m .

j	0	1	2	3	4	5	Erro acumulado
$\hat{\beta}_{1,j}$	1						$\mathcal{O}[h]$
$2\hat{\beta}_{2,j}$	1	1					$\mathcal{O}[h^2]$
$12\hat{\beta}_{3,i}$	5	8	-1				$\mathcal{O}[h^3]$
$24\hat{\beta}_{4,i}$	9	19	-5	1			$\mathcal{O}[h^4]$
$720\hat{\beta}_{5,i}$	251	646	-264	106	-19		$\mathcal{O}[h^5]$
$1440\hat{\beta}_{6,i}$	475	1427	-798	482	-173	27	$\mathcal{O}[h^6]$

Geralmente a implementação numérica destes algoritmos é feita em duas etapas:

(1) **Etapa de Predição:** método de Adams-Bashforth $u_i^{(0)} = u_{i-1} + h \cdot \sum_{j=1}^m \beta_{m,j} \cdot f_{i-j}$

(2) **Etapa de Correção:** método de Adams-Moulton

$$u_i^{(k+1)} = u_{i-1} + h \cdot \sum_{j=1}^{m-1} \hat{\beta}_{m,j} \cdot f_{i-j} + h \cdot \hat{\beta}_{m,0} \cdot f[t_i, u_i^{(k)}] \quad \text{para } k=0, 1, \dots$$

Procedimentos deste tipo chamam-se de **métodos preditor-corretor** e são de largo emprego em códigos computacionais.

De uma forma geral os métodos de passos múltiplos podem ser descritos pela fórmula geral:

$$u_i = \sum_{j=1}^{k_1} a_{i,j} \cdot u_{i-j} + h_i \sum_{j=0}^{k_2} b_{i,j} \cdot f[t_{i-j}, u_{i-j}] \quad (14)$$

Admitindo-se na fórmula acima a variação do passo de integração com i .

Métodos de retro-diferenciação (**Backward Differentiation Formula: BDF**) são os métodos de passos múltiplos em que $b_{i,j} = 0$ para $j > 0$, isto é:

$$u_i = \sum_{j=1}^{k_i} a_{i,j} \cdot u_{i-j} + h_i \cdot b_{i,0} \cdot f[t_i, u_i] \quad (15)$$

Aplicando o método de Newton-Raphson para a determinação de u_i , tem-se o procedimento iterativo:

$$\left[1 - h_i \cdot b_{i,0} \cdot \left. \frac{\partial f(t_i, u)}{\partial u} \right|_{u_i^{(k)}} \right] \cdot (u_i^{(k+1)} - u_i^{(k)}) = h_i \cdot b_{i,0} \cdot f[t_i, u_i^{(k)}] - u_i^{(k)} + \sum_{j=1}^{k_i} a_{i,j} \cdot u_{i-j} \quad \text{para } k = 0, 1, 2, \dots$$

Uma das dificuldades de implementação de métodos de passos múltiplos é a necessidade do conhecimento de valores de u no início do passo em questão e em m passos anteriores, no início do processo integração ($i=1$) o valor de u é apenas conhecido no início do passo obrigando assim ao método de passos múltiplos ser o de menor ordem (método de Euler). Para superar este problema duas estratégias são adotadas: (i) começar os m primeiros passos de integração adotando um método de passo simples (métodos de Runge-Kutta, por exemplo); (ii) começar o processo com um método de passo simples (Euler), no segundo passo adotar um método de dois passos ($m=2$) e assim sucessivamente até atingir o número de passos desejado. A segunda estratégia é a mais utilizada em códigos computacionais correntes no mercado e a mesma é adotada com uma técnica adequada de seleção do tamanho de passo (que é variável ao longo do processo de integração).

7.4 Conceito de rigidez

A estabilidade dos métodos explícitos está garantida se o passo de integração for limitado por:

$$h \leq \frac{p}{|\Re(\lambda_{\max})|}$$

onde p é uma constante que depende do método e λ_{\max} é o valor de característico do sistema que apresenta a parte real de maior valor em módulo.

Por exemplo: usando o método de Euler explícito ($p = 2$) para resolver o seguinte problema:

$$\frac{dy_1}{dt} = -y_1 \quad , \quad y_1(0) = 1,5$$

$$y_1(t) = 1,5 e^{-t} \quad \rightarrow \quad \lambda = -1$$

$$h \leq \frac{2}{1} = 2$$

$$t_f = 10 \quad \Rightarrow \quad 5 \text{ passos}$$

e o problema:

$$\frac{dy_2}{dt} = -1000 y_2 \quad , \quad y_2(0) = 0,5$$

$$y_2(t) = 0,5 e^{-1000t} \quad \rightarrow \quad \lambda = -1000$$

$$h \leq \frac{2}{1000} = 0,002$$

$$t_f = 10 \Rightarrow 5000 \text{ passos}$$

quando estes sistemas estão acoplados:

$$\frac{dy}{dt} = \begin{bmatrix} -500,5 & 499,5 \\ 499,5 & -500,5 \end{bmatrix} y, \quad y(0) = [2 \quad 1]^T$$

a solução analítica é dada por:

$$\begin{aligned} y_1 &= 1,5e^{-t} + 0,5e^{-1000t} \\ y_2 &= 1,5e^{-t} - 0,5e^{-1000t} \end{aligned} \rightarrow \lambda = \begin{bmatrix} -1 \\ -1000 \end{bmatrix}$$

$$h \leq \frac{2}{1000} = 0,002$$

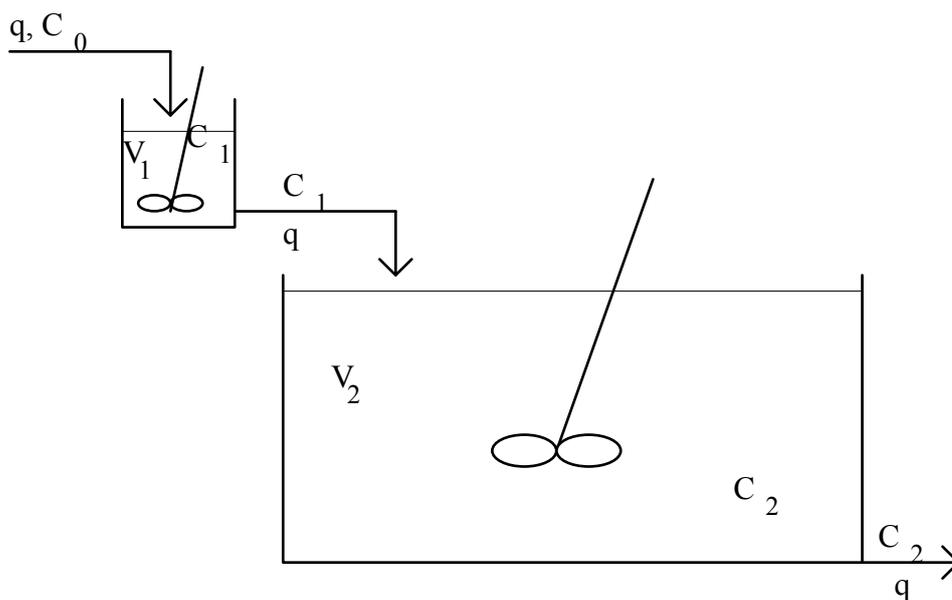
portanto, o passo é limitado pela dinâmica mais rápida do sistema. Uma forma de medir esta limitação é através da razão de rigidez, definida por:

$$SR = \frac{\max_i |\Re(\lambda_i)|}{\min_i |\Re(\lambda_i)|}$$

$$\text{onde para } SR \begin{cases} < 20 & \text{não rígido} \\ \approx 10^3 & \text{rígido} \\ \approx 10^6 & \text{muito rígido} \end{cases},$$

sendo os métodos explícitos mais adequados para sistemas não rígidos e os métodos implícitos mais adequados para sistemas rígidos.

Para ilustrar esta discussão o seguinte exemplo será considerado: sejam dois reatores químicos em série, onde é conduzida isotermicamente uma reação de primeira ordem, irreversível em fase líquida:



os balanços de massa do reagente em cada um dos reatores é dada por:

$$1^{\circ} \text{ Reator: } V_1 \frac{dC_1(t)}{dt} = q[C_0(t) - C_1(t)] - k \cdot C_1(t) \cdot V_1$$

$$2^{\circ} \text{ Reator: } V_2 \frac{dC_2(t)}{dt} = q[C_1(t) - C_2(t)] - k \cdot C_2(t) \cdot V_2$$

Considerando que no início da contagem do tempo não ocorra reação alguma no interior dos reatores, isto é: $C_1(0)=C_2(0)=0$ e que exatamente em $t=0$ o primeiro reator é alimentado por uma solução com uma concentração constante: C_0 . Assim adotando as variáveis

adimensionais: $\tau = \frac{q \cdot t}{V_1}$; $y_1 = \frac{C_1}{C_0}$; $y_2 = \frac{C_2}{C_0}$; $r = \frac{V_2}{V_1}$; $Da = k \cdot \frac{V_1}{q}$, tem-se:

$$1^{\circ} \text{ Reator: } \frac{dy_1(\tau)}{d\tau} = [1 - y_1(\tau)] - Da \cdot y_1(\tau) \text{ com } y_1(0) = 0$$

$$2^{\circ} \text{ Reator: } r \cdot \frac{dy_2(\tau)}{d\tau} = [y_1(\tau) - y_2(\tau)] - r \cdot Da \cdot y_2(\tau) \text{ com } y_2(0) = 0$$

Considerando: $Da = 0,01$ e $r = 100$ (o segundo reator tem um volume 100 vezes maior que o primeiro) tem-se assim:

$$1^{\circ} \text{ Reator: } \frac{dy_1(\tau)}{d\tau} = 1 - 1,01 \cdot y_1(\tau) \text{ com } y_1(0) = 0$$

$$2^{\circ} \text{ Reator: } 100 \cdot \frac{dy_2(\tau)}{d\tau} = [y_1(\tau) - 2 \cdot y_2(\tau)] \text{ com } y_2(0) = 0$$

no estado estacionário, $\frac{dy_1(\tau)}{d\tau} = 0$ e $\frac{dy_2(\tau)}{d\tau} = 0$, temos:

$$1 - 1,01 \cdot y_{1,ss} = 0 \Rightarrow y_{1,ss} = \frac{1}{1,01} \text{ e } y_{1,ss} - 2 \cdot y_{2,ss} = 0 \Rightarrow y_{2,ss} = \frac{1}{2,02}$$

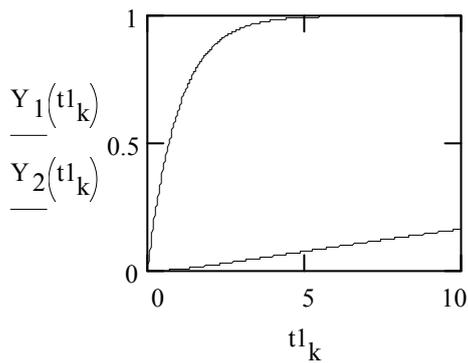
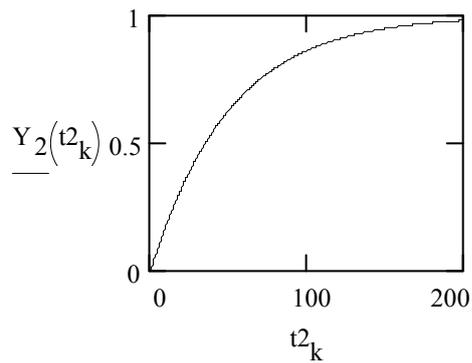
A solução analítica deste sistema de EDO's é dada por:

$$y_1(\tau) = \frac{1 - e^{-1,01\tau}}{1,01} \text{ e } y_2(\tau) = \frac{1 - e^{-0,02\tau}}{2,02} + \frac{e^{-1,01\tau} - e^{-0,02\tau}}{99,99}$$

ou adotando: $Y_1(\tau) = \frac{y_1(\tau)}{y_{1,ss}} = 1,01 \cdot y_1(\tau)$ e $Y_2(\tau) = \frac{y_2(\tau)}{y_{2,ss}} = 2,02 \cdot y_2(\tau)$, tem-se:

$$Y_1(\tau) = 1 - e^{-1,01\tau} \text{ e } Y_2(\tau) = 1 - e^{-0,02\tau} + \frac{e^{-1,01\tau} - e^{-0,02\tau}}{49,5}$$

As figuras abaixo mostram as variações de Y_1 e Y_2 com τ :

Curva superior Y_1 , curva inferior Y_2 Escala de τ de 0 a 10 Y_2 versus τ Escala de τ de 0 a 200

Note que a concentração de saída do primeiro reator varia, como era previsível, muito mais rápido do que a concentração de saída do segundo reator e, após o valor de $\tau = 5$, a concentração de saída do primeiro reator mantém-se praticamente constante e igual a seu valor estacionário final. Já a concentração de saída do segundo reator atinge o estado estacionário após $\tau = 200$. Esta diferença acentuada da *velocidade* de resposta das duas variáveis do problema caracteriza a **rigidez** do sistema (o sistema de EDO's é dito **rígido**). Para este exemplo tem-se: $SR = 1,01/0,02 = 50,5 > 20$. Se o sistema é não-linear a razão de rigidez é calculada sobre os valores característicos da matriz jacobiana do sistema.

Sob o ponto de vista numérico a rigidez do sistema pode ser problemática, pois o passo de integração dos métodos explícitos deve satisfazer um critério relacionado ao módulo da parte real do maior valor característico do sistema, assim:

$$h < \frac{C^{te}}{|\Re(\lambda_{max})|}, \text{ onde } \lambda_{max}: \text{ é o valor de característico que apresenta a parte real de maior}$$

valor em módulo. O tempo total de integração necessário para *acompanhar* toda a resposta dinâmica do sistema é, entretanto, escolhido de modo a satisfazer um critério relacionado ao módulo da parte real do menor valor característico do sistema:

$$t_{total} = n_{total} \cdot h \geq \frac{5}{|\Re(\lambda_{min})|} \Rightarrow n_{total} > \frac{5}{C^{te}} \cdot \frac{|\Re(\lambda_{max})|}{|\Re(\lambda_{min})|} = \frac{5}{C^{te}} \cdot SR.$$

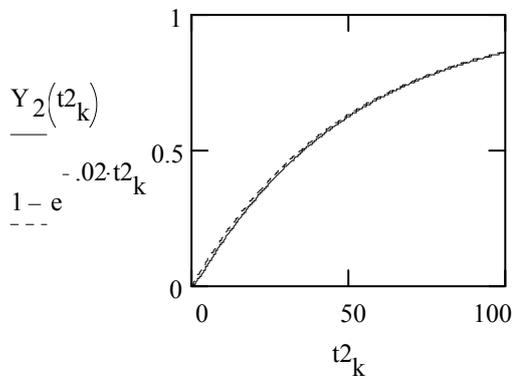
Podendo-se assim depreender que quanto maior for a razão de rigidez (**SR**) maior o número de passos de integração serão necessários e, em conseqüência, consumindo um grande tempo de computação. A alternativa para resolver problemas rígidos é utilizar algoritmos numéricos de integração que sejam implícitos, pois estes métodos são geralmente sempre estáveis não havendo restrições imposta à seleção do tamanho do passo de integração.

Uma maneira às vezes utilizada para contornar a rigidez do sistema é considerar a parte do sistema que tem a resposta mais rápida como se atingisse *instantaneamente* o estado estacionário final, esta simplificação é chamada de suposição de estado quase-estacionário (QSSA: *quasi steady-state assumption*) e é largamente empregada em Engenharia Química.

No exemplo em questão isto equivaleria em considerar: $y_1(\tau) = y_{1,ss} = \frac{1}{1,01}$ para $\tau > 0$,

resultando em:

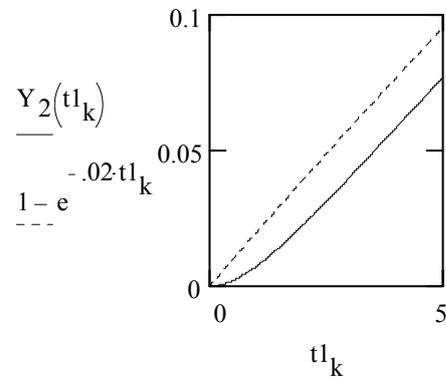
$y_2(\tau) = \frac{1 - e^{-0,02\tau}}{2,02}$ e $Y_2(\tau) = \frac{y_2(\tau)}{y_{2,ss}} = 1 - e^{-0,02\tau}$. Abaixo representam-se as curvas de concentração de saída do sistema *versus* τ do modelo *completo* e do modelo adotando a QSSA para a concentração de saída do primeiro tanque.



Y_2 versus τ

Escala de τ de 0 a 100

Escala vertical de 0 a 1,0



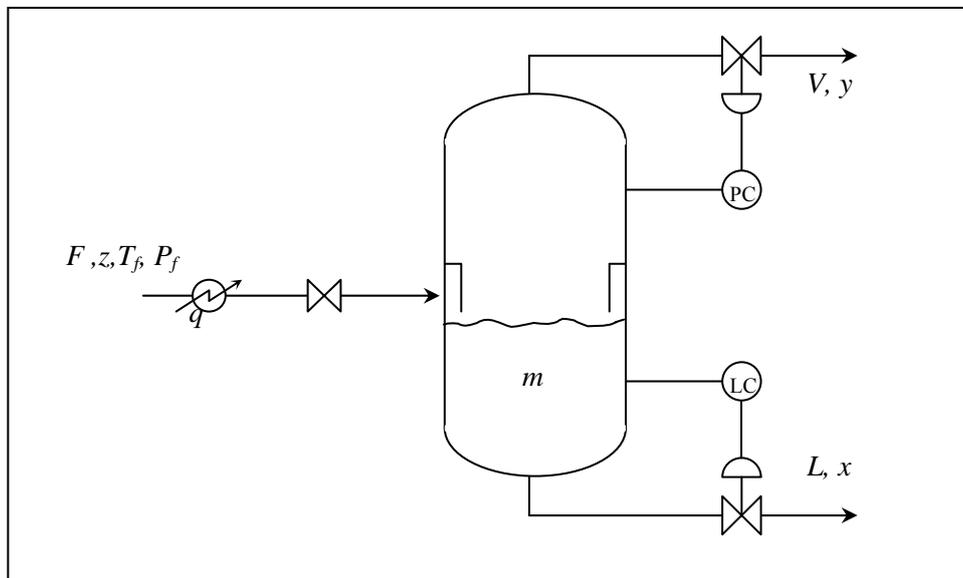
Y_2 versus τ

Escala de τ de 0 a 5

Escala vertical de 0 a 0,1

7.5 Restrições algébricas e conceito de índice diferencial

Para ilustrar o conceito de restrições algébricas em equações diferenciais, considere um vaso de flash multicomponente:



Adotando as seguintes hipóteses para a construção do modelo matemático:

- mistura perfeita nas fases
- dinâmica da fase vapor desprezada
- entalpia do líquido: $h = C_p(T - T_{ref})$ - C_p cte.
- entalpia do vapor: $H = h + \lambda(T, P, y, x)$

Balço de massa global: $\frac{dm}{dt} = F - V - L$

Balço de massa por componente: $\frac{d(mx_i)}{dt} = m \frac{dx_i}{dt} + x_i \frac{dm}{dt} = Fz_i - Vy_i - Lx_i$

$$m \frac{dx_i}{dt} = F(z_i - x_i) - V(y_i - x_i)$$

Balço de energia: $\frac{d(mh)}{dt} = m \frac{dh}{dt} + h \frac{dm}{dt} = Fh_f - VH - Lh + q$

$$mC_p \frac{dT}{dt} = FC_p(T_f - T) - V\lambda + q$$

Equilíbrio termodinâmico: $y_i = K_i x_i$ frações: $\sum x_i = \sum y_i$

$$K_i = f(T, P, x, y)$$

Resultando no sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dm}{dt} = F - V - L \\ m \frac{dx_i}{dt} = Fz_i - [F + V(K_i - 1)]x_i \\ mC_p \frac{dT}{dt} = FC_p(T_f - T) - V\lambda + q \\ \sum_{i=1}^c x_i(1 - K_i) = 0 \end{array} \right. \Rightarrow T, P, m, x$$

$$\begin{array}{l} x(t_0) = x_0 \\ T(t_0) = T_0 \\ m(t_0) = m_0 \end{array} \quad \text{onde} \quad \left\{ \begin{array}{l} V = f(P); L = f(m) \\ K_i = f(T, P, x, y) \\ \lambda = f(T, P, x, y) \\ y_i = K_i x_i \end{array} \right.$$

Que é composto por um subconjunto de equações diferenciais é um subconjunto de equações algébricas, ou seja, um **sistema de equações algébrico-diferenciais (EAD)**. Que pode ser escrito na forma:

$$F(t, v, v', w, u) = 0$$

onde v é o vetor das variáveis diferenciais $[T, m, x]$ e w é o vetor das variáveis algébricas $[P]$. Ou na forma:

$$F(t, v, v', u) = 0$$

onde todas as variáveis dependentes compõem o vetor v , isto é, $[T, m, x, P]$. Em ambos os casos u representa o vetor das variáveis de entrada (externas): $[F, z, T_f, q]$.

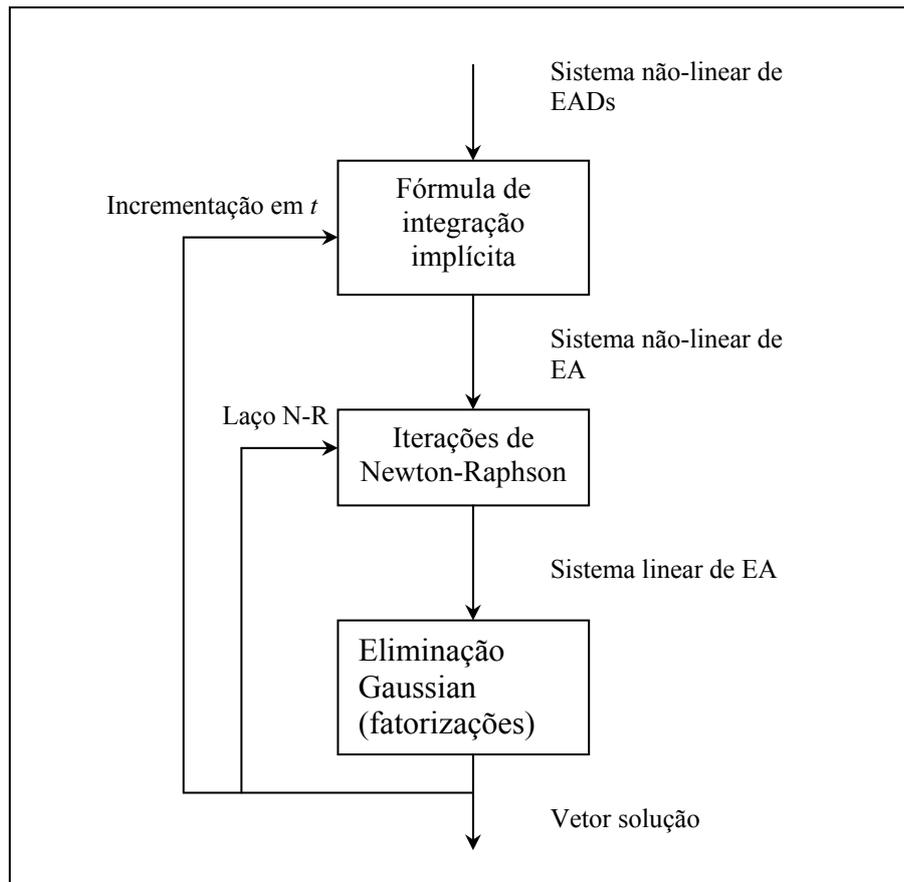
Frequentemente as equações algébricas são resolvidas em um processo iterativo interno à integração. Entretanto, este tipo de procedimento é, em geral, muito mais demorado para resolver do que quando as equações algébricas são resolvidas juntamente com as equações diferenciais, apesar do sistema resultante ser maior neste segundo caso. O cuidado adicional que se deve ter para este tipo de problema é a inicialização consistente, pois as restrições algébricas devem ser satisfeitas em $t = t_0$.

Métodos numéricos: Transformam o problema de EADs em um sistema de equações algébricas pela substituição de $y'(t)$ (BDF, passos múltiplos) ou $y(t)$ (RK, passo único) por uma fórmula de aproximação:

$$y'(t) \approx A(y(t)) \quad \text{ou} \quad y(t) \approx B(y'(t))$$

tem-se assim:
$$\begin{cases} F(t, y, A(y), u) = 0, & \text{ou} \\ F(t, B(y'), y', u) = 0 \end{cases}$$

que é usualmente resolvido pela aplicação do método de Newton-Raphson ou suas modificações:



Procedimento de solução de EADs.

Exemplo: Fórmulas de integração tipo BDF (Backward Differentiation Formula)

1ª ordem (Euler):
$$\dot{y}(t_{n+1}) \approx A(y(t_{n+1})) = \frac{y(t_{n+1}) - y(t_n)}{h_{n+1}}$$

2ª ordem (trapézios):
$$A(y(t_{n+1})) = \frac{2y(t_{n+1}) - y(t_n) - y^{(0)}(t_{n+1})}{h_{n+1}}$$

onde $y^{(0)}(t_{n+1}) = y(t_n) + h_{n+1}y'(t_n) \Rightarrow$ predição de Euler para $y(t_{n+1})$

ordem m:
$$A(y(t_{n+1})) = \frac{\alpha_0 y_{n+1} + \alpha_1 y_n + \dots + \alpha_n y_{n-m+1}}{h_{n+1}}$$

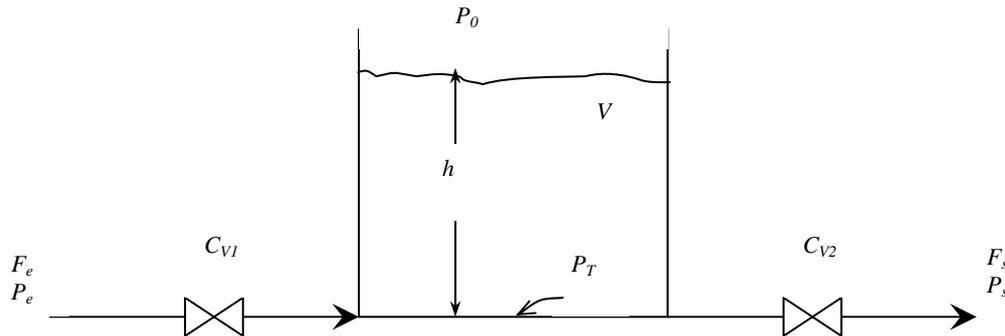
em geral: $y'(t_{n+1}) \approx \alpha y_{n+1} + \beta$ onde $\alpha = \frac{\alpha_0}{h_{n+1}}$; $\beta = \frac{1}{h_{n+1}} \sum_{j=1}^m \alpha_j y_{n+1-j}$

α e β dependem da ordem BDF e do passo de integração.

$$\Rightarrow f(y) = F(t, y, \alpha y + \beta, u) = 0$$

Problemas de Índice

Exemplo: Tanque de armazenamento com válvulas na entrada e saída, onde se deseja analisar a variação de nível do tanque frente a variação na pressão e vazão da alimentação (P_e e F_e).



Considerações:

- massa específica e área da seção transversal constantes
- isotérmico
- mistura perfeita
- $F = C_V \sqrt{\Delta P}$, onde ΔP é a queda de pressão através da válvula e C_V é a constante da válvula.

Modelo:

Balanco de massa: $A \frac{dh}{dt} = F_e - F_s$

Vazões: $F_e = C_{V1} \sqrt{P_e - P_T}$

$$F_s = C_{V2} \sqrt{P_T - P_s}$$

Pressão: $P_T = P_0 + \rho g h$

variáveis a determinar: P_s, F_s, h, P_T

Condição inicial: $h(t_0)$

No estado estacionário temos:

$$0 = F_e - F_s \quad \Rightarrow \quad F_s$$

$$F_e = C_{V1} \sqrt{P_e - P_T} \quad \Rightarrow \quad P_T$$

$$F_s = C_{V2} \sqrt{P_T - P_s} \quad \Rightarrow \quad P_s$$

$$P_T = P_0 + \rho g h \quad \Rightarrow \quad h$$

Aplicando o método de Euler explícito para o regime transiente, resolvendo primeiro as equações algébricas em cada passo:

$$P_T = P_0 + \rho g h \text{ e } h(t_0) = h_0 \quad \Rightarrow \quad P_T(t_0)$$

Porém, com este valor de $P_T(t_0)$, a equação $F_e = C_{V_1} \sqrt{P_e - P_T}$ não tem variáveis desconhecidas para ser determinada, causando uma singularidade estrutural no sistema. Neste caso, isto implica em não ser possível fornecer uma condição inicial para $h(t_0)$, pois o seu valor deve ser calculado pela equação $P_T = P_0 + \rho g h$ com $P_T(t_0)$ sendo obtido a partir da equação $F_e = C_{V_1} \sqrt{P_e - P_T}$. Este efeito é conhecido como **problema de índice em sistema de equações algébrico-diferenciais**. Neste exemplo também surge o conceito de **condição inicial consistente**, pois h_0 não é arbitrário e deve satisfazer a equação $P_T(t_0) = P_0 + \rho g h(t_0)$.

Para calcularmos P_s e F_s , usamos a equação diferencial para F_s :

$$F_s = F_e - A \frac{dh}{dt} \quad \Rightarrow \quad F_s$$

onde $\frac{dh}{dt} = \frac{1}{\rho g} \frac{dP_T}{dt}$ e $\frac{dP_T}{dt} = \frac{dP_e}{dt} - \frac{2F_e}{C_{V_1}^2} \frac{dF_e}{dt}$, e depois a equação:

$$F_s = C_{V_2} \sqrt{P_T - P_s} \quad \Rightarrow \quad P_s$$

Esta necessidade de diferenciação do sistema original dá origem ao conceito de **índice diferencial** de um sistema de EADs.

Definição: (Índice diferencial, ν) Seja a seguinte forma geral de EADs:

$$F(t, y, y', u) = 0$$

onde $u \in \mathcal{R}^r$ é o vetor de entradas, e $y, y' \in \mathcal{R}^n$ são os vetores das variáveis de estado e suas derivadas em t , respectivamente, do sistema acima de dimensão n , considerado ser suficientemente diferenciável. Então, o índice diferencial, ν , deste sistema é o número mínimo de vezes que todo ou parte do sistema deve ser diferenciado com respeito a t de modo a determinar y' como uma função contínua de y e t .

Para o exemplo acima, é necessário diferenciar mais uma vez o sistema para expressar $\frac{dF_s}{dt}$ como função das variáveis dependentes, ou seja:

$$\frac{dF_s}{dt} = \frac{dF_e}{dt} - A \frac{d^2h}{dt^2}$$

mas $\frac{d^2h}{dt^2} = \frac{1}{\rho g} \frac{d^2P_T}{dt^2}$ e $\frac{d^2P_T}{dt^2} = \frac{d^2P_e}{dt^2} - \frac{2}{C_{V_1}^2} \left[F_e \frac{d^2F_e}{dt^2} + \left(\frac{dF_e}{dt} \right)^2 \right]$, ou seja:

$$\frac{dF_s}{dt} = \frac{dF_e}{dt} - \frac{A}{\rho g} \left\{ \frac{d^2P_e}{dt^2} - \frac{2}{C_{V_1}^2} \left[F_e \frac{d^2F_e}{dt^2} + \left(\frac{dF_e}{dt} \right)^2 \right] \right\}$$

que junto com as equações:

$$A \frac{dh}{dt} = F_e - F_s$$

$$\frac{dP_T}{dt} = \frac{dP_e}{dt} - \frac{2 F_e}{C_{V_1}^2} \frac{dF_e}{dt}$$

$$\frac{dP_s}{dt} = \frac{dP_e}{dt} - \frac{2 F_e}{C_{V_1}^2} \frac{dF_e}{dt} - \frac{2 F_s}{C_{V_2}^2} \left\{ \frac{dF_e}{dt} - \frac{A}{\rho g} \left[\frac{d^2 P_e}{dt^2} - \frac{2}{C_{V_1}^2} \left[F_e \frac{d^2 F_e}{dt^2} + \left(\frac{dF_e}{dt} \right)^2 \right] \right] \right\}$$

Observe que as derivadas que aparecem no lado direito destas equações são somente das variáveis de entrada, cuja forma funcional é conhecida e, conseqüentemente, suas derivadas, formando assim um sistema de EDOs. Portanto, o índice diferencial do sistema de EADs original é 2.

Lista de exercícios

1) Considere o exemplo da destilação em batelada de uma mistura binária, que dá origem a:

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

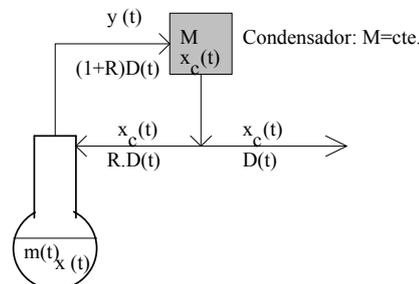
Procedendo-se a integração de $\tau=0$ a $\tau=1$, sendo o resultado buscado o valor de x_1 em $\tau=1$.

Se $\alpha = \frac{m_0}{m_0 - m_{final}} > 1$, considerando 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 75 moles de n-heptano e 25 moles de n-octano [$m_0=100$ 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: $y_1 = f(x_1) = \frac{2,16 \cdot x_1}{1 + 1,16 \cdot x_1}$.

Determine $x_{1,final}$ e represente a variação de x_1 ao longo da destilação.

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



As composições indicadas na figura se referem ao n-heptano.

Os balanços molares do sistema são dados por:

(a) Balanço do n-heptano no condensador: $M \cdot \frac{dx_c(t)}{dt} = (1+R) \cdot D(t) \cdot [y(t) - x_c(t)]$ com $x_c(0) = x_{c,0}$

(b) Balanço molar global no balão: $\frac{dm(t)}{dt} = -D(t)$ com $m(0)=m_0$

(c) Balanço do n-heptano no balão:

$$m(t) \cdot \frac{dx(t)}{dt} = -D(t) \cdot [x_c(t) - x(t)] - (1+R) \cdot D(t) \cdot [y(t) - x_c(t)] \quad \text{com } x(0) = x_0$$

Adotando a mesma variável adimensional τ do problema anterior:

$$\tau = \frac{m_0 - m}{m_0 - m_{final}} \quad \text{e a mesma relação de equilíbrio do exemplo anterior: } y = \frac{2,16 \cdot x}{1 + 1,16 \cdot x}$$

reescreva as equações do problema e mostre que nesta nova variável o sistema é descrito por apenas 2 EDO's.

Utilizando: $x(0)=0,75$; $x_c(0) = y_{eq}[x(0)] = 0,866$; $m(0)=100$ moles; $M=10$ moles e $m_{final}=10$ moles represente a variação de x e x_c com τ [$0 < \tau \leq 1$].

3) Considere o modelo cinético da reação reversível: $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} B$ 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 descrita pela EDO:

$$\frac{dC_A(t)}{dt} = -k_1 \cdot C_A(t) + k_2 \cdot C_B(t)$$

Com $C_B = C_{A,0} - C_A$, sendo $C_{A,0}$ a concentração de A em $t=0$.

Mostre que reescrevendo a equação em termos das variáveis adimensionais:

$\tau = k_2 \cdot t$ e $x(\tau) = \frac{C_A(t) - C_{A,eq}}{C_{A,0} - C_{A,eq}}$ sendo $C_{A,eq} = \lim_{t \rightarrow \infty} [C_A(t)] = \frac{k_2}{k_1 + k_2} C_{A,0}$, a equação original se transforma em: $\frac{dx(\tau)}{d\tau} = -\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \cdot x(\tau)$ com $x(\tau)|_{\tau=0} = 1$.

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.

4) Considere o modelo cinético de reação: $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} B \xrightarrow{k_3} C$ 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:

$$\frac{dC_A(t)}{dt} = -k_1 \cdot C_A(t) + k_2 \cdot C_B(t) \quad \text{e} \quad \frac{dC_B(t)}{dt} = k_1 \cdot C_A(t) - (k_2 + k_3) \cdot C_B(t) \quad \text{com } C_A(0) = C_{A,0} \quad \text{e} \quad C_B(0) = 0$$

Mostre que reescrevendo a equação em termos das variáveis adimensionais:

$\tau = k_2 \cdot t$; $x_1(\tau) = \frac{C_A(t)}{C_{A,0}}$ e $x_2(\tau) = \frac{C_B(t)}{C_{A,0}}$, transforma-se em:

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

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

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.

5) 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]:

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

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

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

$$\theta(x) = 1 + \beta[1 - y(x)] \Rightarrow 1 - \frac{1}{\theta(x)} = \frac{\beta[1 - y(x)]}{1 + \beta[1 - y(x)]}. \quad \text{Assim, o perfil de concentração pode ser}$$

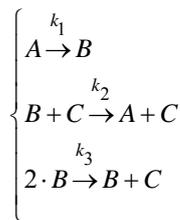
$$\text{descrito apenas por uma EDO: } \frac{dy(x)}{dx} = -Da \cdot y(x) \cdot \exp\left\{\frac{\gamma \cdot \beta[1 - y(x)]}{1 + \beta[1 - y(x)]}\right\} \rightarrow y(0)=1$$

As variáveis e parâmetros adimensionais do problema são:

$$x = \frac{z}{L}; \quad y = \frac{C}{C_{alim}}; \quad \theta = \frac{T}{T_{alim}}; \quad Da = \frac{k_0 \cdot L}{v_z}; \quad \gamma = \frac{E}{R_{gas} \cdot T_{alim}} \quad e \quad \beta = \frac{C_{alim}[-\Delta H]}{\rho \cdot c_p \cdot T_{alim}}$$

Utilizando os dados: $L = 2$ m; $R = 0,1$ m (raio do reator); $C_{alim} = 0,03$ kmol/m³; $T_{alim} = 700$ K; $(-\Delta H) = 10^4$ kJ/kmol; $c_p = 1$ kJ/(kg.K); $E = 100$ kJ/kmol; $\rho = 1,2$ kg/m³ e $k_0 = 5$ s⁻¹, obtenha a variação de y e θ com x .

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



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

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

Sendo: $y_1 = C_A/C_{A0}$; $y_2 = C_B/C_{A0}$ e $y_3 = C_C/C_{A0}$. Calcule a variação de y_1 , y_2 e y_3 com t utilizando os seguintes valores das constantes cinéticas: $k_1 = 0,08$ 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 t tem-se: $y_1 + y_2 + y_3 = 1$).

7) A figura abaixo ilustra um pêndulo com haste de comprimento fixo e massa desprezível. O sistema de EADs resultante da modelagem do movimento do pêndulo em coordenadas cartesianas é dado por:

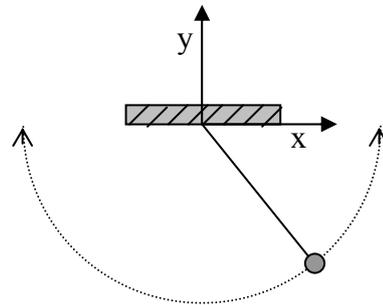
$$x' - v_x = 0$$

$$y' - v_y = 0$$

$$v'_x + T x = 0$$

$$v'_y + T y + g = 0$$

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



onde x e y são as posições horizontal e vertical do pêndulo, v_x e v_y são os componentes da velocidade nestas direções, T é a tensão na haste do pêndulo de comprimento L e g é a aceleração da gravidade. Determine o índice diferencial deste sistema de EADs.