EXEMPLO ILUSTRATIVO 1

A simulação da partida de um reator químico pode ser obtida através da resolução de equação diferencial ordinária (em forma adimensional): $\frac{dx(t)}{dt} = 1 - x(t) - \frac{5 \cdot x(t)}{12 + 4 \cdot x(t)}$ com $x(0)=0$.

Esta EDO é resolvida pelo método do ponto médio, resultando na forma discretizada:

$\bar{u}_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot \left[1 - \bar{u}_i - \frac{5 \cdot \bar{u}_i}{12 + 4 \cdot \bar{u}_i}\right]$ com $u_0=0$ para $i = 1, \cdots, N$, sendo: u_i o valor numérico de $x(t)$ em $t_i = i \cdot h$; $h = \frac{t_{\text{final}}}{N}$ e $\bar{u}_i = \frac{u_i + u_{i-1}}{2} \Rightarrow u_i = 2 \cdot \bar{u}_i - u_{i-1}$.

Com $t_{\text{final}} = 4$ obtêm-se os seguintes valores de $x(t)$ para diferentes valores de *N* e tais valores são tabelados abaixo:

	Valores numéricos de $x(t)$		
t	*N*=24	*N*=48	*N*=1000 (valores convergidos)
0	0,000000	0,000000	0,000000
1	0,546817	0,546023	0,545759
2	0,693506	0,693080	0,692938
3	0,734194	0,734018	0,733959
4	0,745570	0,745505	0,745483

(i) Mostre como foi obtida a forma discretizada da equação diferencial original;

O método do ponto médio quando aplicado no passo *i* da integração numérica da EDO: $\frac{dx(t)}{dt} = f\left[t, x(t)\right]$,

dá origem à equação discreta: $u_i = u_{i-1} + h \cdot f\left[t_{i-1} + \frac{h}{2}; \frac{u_i + u_{i-1}}{2}\right]$, definindo-se o *valor médio* por: $\bar{u}_i = \frac{u_i + u_{i-1}}{2}$,

ou seja: $u_i = 2 \cdot \bar{u}_i - u_{i-1}$, permitindo expressar o método na forma: $\bar{u}_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot f\left[t_{i-1} + \frac{h}{2}; \bar{u}_i\right]$. Identificando:

$f\left[t, x(t)\right] = 1 - x(t) - \frac{5 \cdot x(t)}{12 + 4 \cdot x(t)}$, resulta:

$\bar{u}_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot \left[1 - \bar{u}_i - \frac{5 \cdot \bar{u}_i}{12 + 4 \cdot \bar{u}_i}\right]$, ou ainda:

(ii) Baseado nos valores tabelados verifique que o método empregado é, essencialmente, de segunda ordem;

(iii) Com *N*=24, efetue os três primeiros passos de integração.

EXEMPLO ILUSTRATIVO 2

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 (em forma adimensional) pelo sistema de EDO's:

$$\frac{dx_1(t)}{dt} = -\frac{k_1}{k_2} \cdot x_1(t) + x_2(t) \quad \text{com } x_1(t)\Big|_{t=0} = 1 \text{ e}$$

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

Em que k_1/k_2=1000 e k_3/k_2 = 2. Tal sistema de EDO é resolvido numericamente pelo método do ponto médio resultando nos seguintes valores:

	tempo	0	0,001	0,002	0,003	0,004	0,005
Passo h=0,0010	x_1	1,000000	0,333555	0,111702	0,037849	0,013263	0,005077
	x_2	0,000000	0,665779	0,886080	0,958089	0,980737	0,986955
Passo h=0,0005	x_1	1,000000	0,360256	0,130193	0,047457	0,017703	0,007001
	x_2	0,000000	0,639025	0,867553	0,948462	0,976288	0,985026

(a) Mostre o procedimento recursivo resultante da aplicação do método do ponto médio ao sistema de EDO do problema;

(b) Sabendo-se que o método do ponto médio é um método de segunda ordem apresente valores refinados de x_1 e x_2 fundamentados nos valores tabelados.

EXEMPLO ILUSTRATIVO 3

Considerando o modelo cinético de reação: $A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B$ conduzida em batelada em um reator de mistura, iniciando-se com o componente A puro. A variação da concentração de A e de B com o tempo, na forma adimensional, é descrita pelo sistema de EDO's:

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

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

Em que k_1 / k_2 = 4000 e k_3 / k_2 = 5. (a) Mostre qual método de integração, implícito ou explícito, é mais apropriado para este problema; (b) Qual o maior tamanho de passo possível para o método de Euler explícito para que a solução numérica seja estável e não-oscilatória? (c) Qual o valor final de τ necessário para acompanhar a dinâmica do reator? (d) Proponha um procedimento de cálculo de $x_1(\tau)$ e $x_2(\tau)$ aplicando o método de Euler implícito com intervalo de integração constante.

EXEMPLO ILUSTRATIVO 4

A partida de um reator, no qual há uma válvula instalada na saída, é descrito (em forma adimensional) pelas equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{cases} \dfrac{dh(t)}{dt} = 1 - \sqrt{h(t)} \\ \dfrac{dy(t)}{dt} = \dfrac{1-y(t)}{h(t)} - Da \cdot y^2(t) \end{cases}$$

Sendo: $h(t)$: altura (adimensional) da mistura reacional no tanque (cilíndrico); $y(t)$: concentração do reagente (em forma adimensional) e *Da*: parâmetro adimensional relacionado à velocidade específica da reação e às variáveis operacionais do reator. Estas equações diferenciais apresentam as condições iniciais: $h(0)=0$ e $y(0)=1$. A aparente singularidade em *t*=0 da segunda equação diferencial é evitada aplicando-se o método de L'Hospital ao termo: $\dfrac{1-y(t)}{h(t)}$, assim:

$\lim\limits_{t \to 0} \dfrac{1-y(t)}{h(t)} = -\dfrac{y'(0)}{h'(0)} = -y'(0)$, resultando em: $\left.\dfrac{dy(t)}{dt}\right|_{t=0} = -\dfrac{Da}{2}$.

Considerando $Da = 4$, resolva este sistema de equações diferenciais pelo método de Euler explícito, caracterizando de forma inequívoca um passo de integração que assegure uma solução numérica não oscilatória. Execute os três primeiros passos de integração. Quais os valores finais atingidos por $h(t)$ e $y(t)$?

EXEMPLO ILUSTRATIVO 5

As equações diferenciais abaixo descrevem o comportamento dinâmico da sobrevivência de duas espécies animais em um mesmo *habitat*. A variável N_1 representa o número de elementos da espécie "1 " que é um ser herbívoro para o qual há abundância de alimentos, a variável N_2 representa o número de elementos da espécie "2" que é o ser pedrador que alimenta-se da espécie "1 ". As equações diferenciais que descrevem esta dinâmica é:

$$\begin{cases} \dfrac{dN_1(t)}{dt} = \alpha \cdot N_1(t) - \beta \cdot N_1(t) \cdot N_2(t) \\ \dfrac{dN_2(t)}{dt} = -\gamma \cdot N_2(t) + \delta \cdot N_1(t) \cdot N_2(t) \end{cases}$$

sujeitas às condições iniciais: em t=0 (início da contagem do tempo) $N_1 = N_{1,0}$ e $N_2 = N_{2,0}$.

Com os valores de α= 0.3 ; β = 1/90 ; γ=0.2106 e δ = 0.0002632 e as condições iniciais: $N_{1,0}$ =60 e $N_{2,0}$=10, deseja-se simular o comportamento temporal das espécies até t=20 anos.

Nas Tabelas abaixo, a variação com o tempo do número de espécies 1 e 2 resultante da integração numérica das duas equações diferenciais através de um método de Runge-Kutta de quarta ordem utilizando um passo de integração:

(i) h_1= 2 anos

Tempo (anos)	0	4	8	12	16	20
N_1	60	145.86	413.59	1231.75	3317.84	1061.02
N_2	10	4.76	2.68	2.54	10.63	104.75

(ii) h_2= 1ano

Tempo (anos)	0	4	8	12	16	20
N_1	60	145.89	413.85	1233.03	3316.56	1056.68
N_2	10	4.76	2.68	2.54	10.67	104.06

1-)Baseado nestes valores e no fato do método de integração ser de quarta ordem, construa uma nova Tabela de valores de N_1 e N_2 que sejam mais precisos.

Tempo (anos)	0	10	20	30	40	50
N_1						
N_2						

Justifique claramente o procedimento adotado.