

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \quad ; \text{ EDO: 1 var. indep. ; EDP: } > 1 \text{ var. indep.}$$

var. dep. | var. indep.

- PVI : quando todas as cond. inic. são especif. no ponto inic.
- PVI : quando algumas cond. são dadas no inicio e outras no final do interv.

Ex: reator CSTR, reação 1^a ordem :

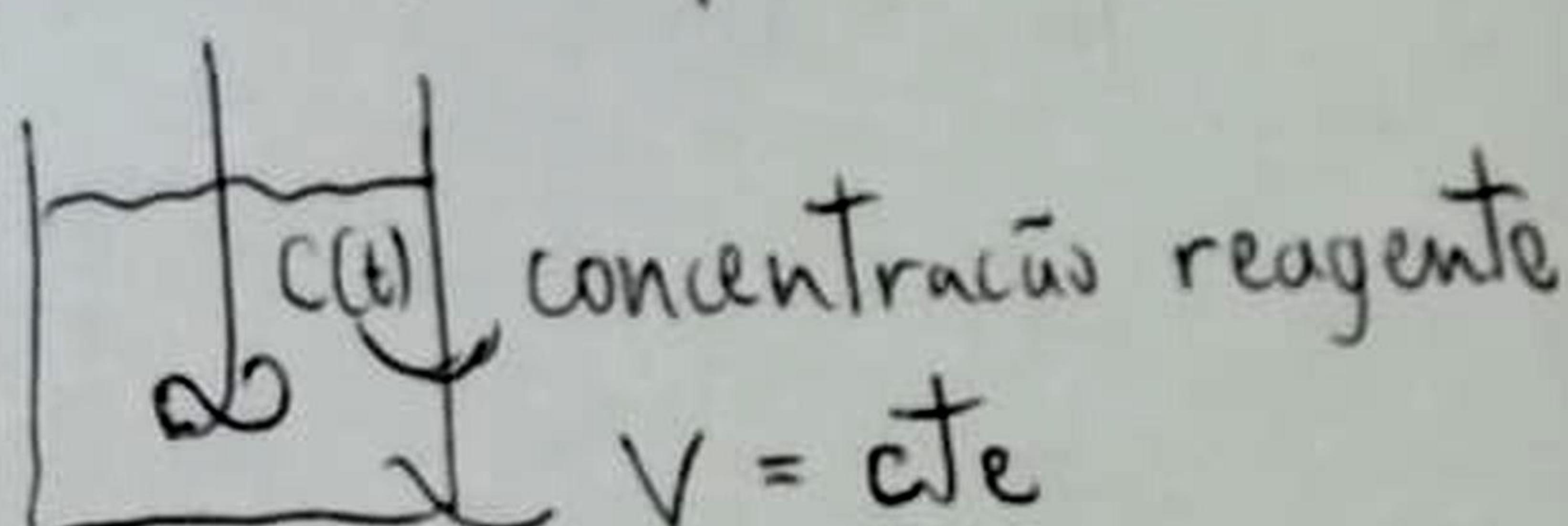
$$\frac{dx}{dt} = -Kx, \quad x(0) = x_0$$

Notação : $\frac{dx}{dt} = f[t, x(t)]$, $t > 0$ \rightarrow EDO 1^a ordem não-linear

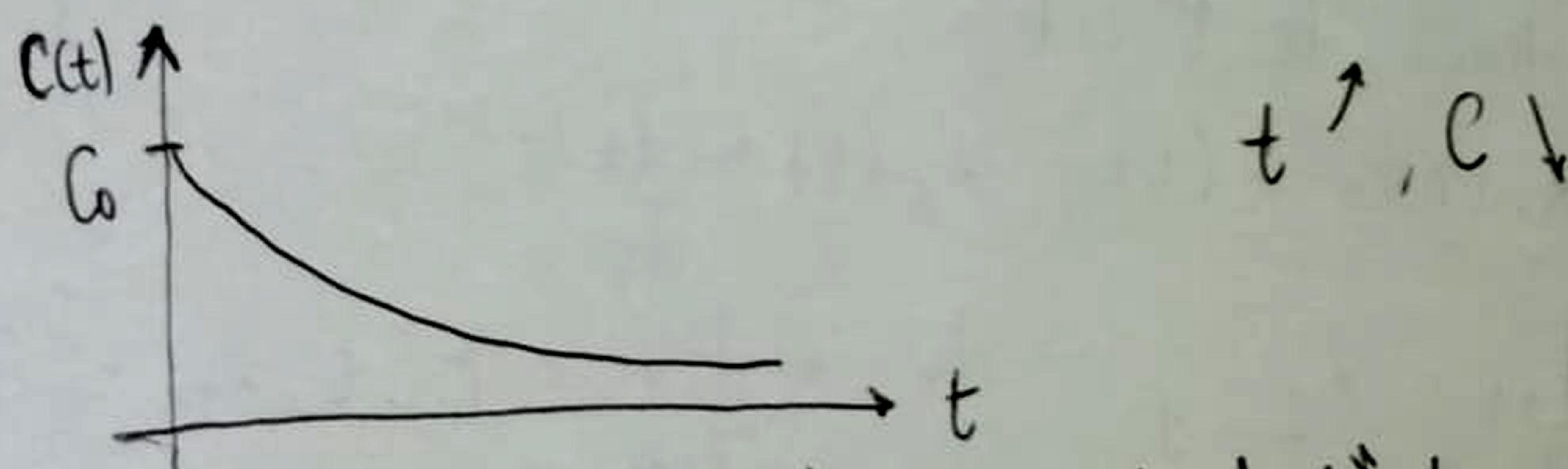
$t \rightarrow$ variável independente
 $x(t) \rightarrow$ variável dependente

$$t=0 : x(0) = x_0, \text{ conhecida}$$

Ex: Reação química \rightarrow conduzida em batelada



$t=0 : x(0) = x_0 : \text{concentração inicial}$
 $A \rightarrow B : \text{Reação irreversível}$



Balanço molar do reagente : "velocidade" de consumo do reagente = expressão cinética da reação

$$N(t) = V \cdot x(t)$$

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{d}{dt} [Vx(t)] = V \frac{dx(t)}{dt} = -r(x) \cdot V$$

\hookrightarrow taxa de consumo do reagente

\hookrightarrow velocidade específica da reação (cinética da reação)

reagente consumido : $\frac{\text{nº de moles consumido}}{\text{volume} \times \text{tempo}}$

Eliminando V nos 2 termos, resulta:

$$\frac{d}{dt} C(t) = -r [C(t)]$$

$$C(0) = C_0, \quad r [C(t)]$$

(condição inicial (C.I.))

\xrightarrow{KC} (1^a ordem)

$\xrightarrow{KC^m}$ (m^{a} última ordem)

$\xrightarrow{\frac{KC^m}{1+bC^P}}$ caso geral (cinética não-ideal)

* n EDOs de 1^a ordem:

n EDOs de 1^a ordem

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = F_1(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \frac{dx_2}{dt} = F_2(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ \frac{dx_n}{dt} = F_n(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \end{cases} \quad \begin{array}{l} t=0; \\ x_1(0) = x_1^0; \\ x_2(0) = x_2^0; \dots \\ x_n(0) = x_n^0 \end{array}$$

Notação vetorial:

$$\begin{cases} \frac{d\vec{x}(t)}{dt} = F[t, \vec{x}(t)] \\ \vec{x}(0) = \vec{x}_0 \end{cases}$$

* EDO de 2^a ordem: $\frac{d^2}{dt^2} \vec{x}(t) = F[t, \vec{x}(t), \frac{d\vec{x}(t)}{dt}]$

C.I.: $\vec{x}(0) = \vec{x}_0, \quad \left. \frac{d\vec{x}}{dt} \right|_{t=0} = \vec{v}_0^0$

→ Para reduzir a um sistema de 1^a ordem:

variáveis de estado: $x_1(t) = \vec{x}(t); \quad x_2(t) = \frac{d\vec{x}(t)}{dt}$

$$\frac{dx_1}{dt} = x_2 \quad ; \quad \frac{dx_2}{dt} = \frac{d^2}{dt^2} \vec{x} = F[t, x_1, x_2]$$

C.I.: $x_1(0) = x_0, \quad x_2(0) = \vec{v}_0$

* Sol. EDOs numericamente → PVI (problema de valor inicial)

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(t, \vec{x}(t)), \quad \vec{x}(0) = \vec{x}_0$$

Como muitas equações não têm sol. exata (analítica), usamos métodos numéricos para calcular aproximações da solução com o tempo.

Aproximação da solução em pontos discretos no tempo:

$$x(t_0), x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n); \quad x(t_{i-1}) = x_{i-1}$$

• Usualmente dividimos o tempo em passos iguais:

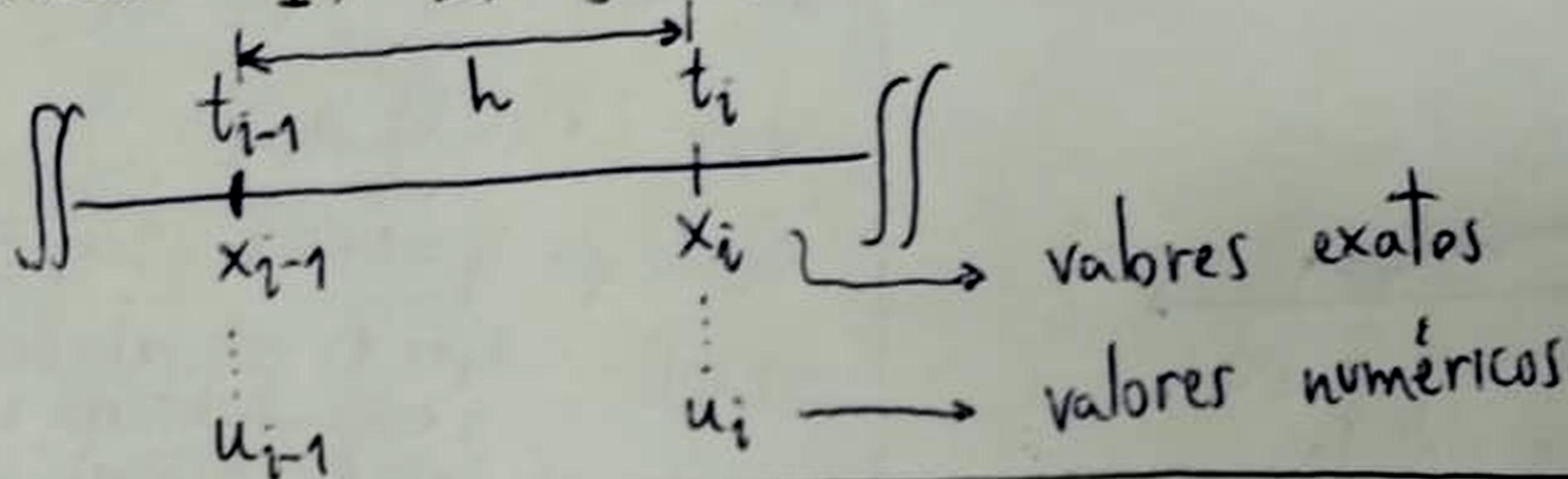
$$h = 0.1 \text{ seg}, 0.01 \text{ seg}, \dots \quad (\text{intervalo de tempo ou tamanho do passo})$$

$$\text{Definimos: } t_0 = 0, t_1 = h, t_2 = 2h, \dots, \boxed{t_i = i \cdot h}$$

Então, approximamos a sol. nesses pontos:

$$u_0 \approx x(t_0), u_1 \approx x(t_1), u_2 \approx x(t_2), \dots, u_i \approx x(t_i)$$

→ Calcularemos u_1, u_2, u_3 numericamente



Exemplo teste: $\frac{dx}{dt} = -\lambda x(t)$

$$x(0) = x_0$$

$$\boxed{x(t) = x_0 e^{-\lambda t}} \rightarrow \text{sol. analítica}$$

ex.: $\frac{dx}{dt} = -2x, x(0) = 1$

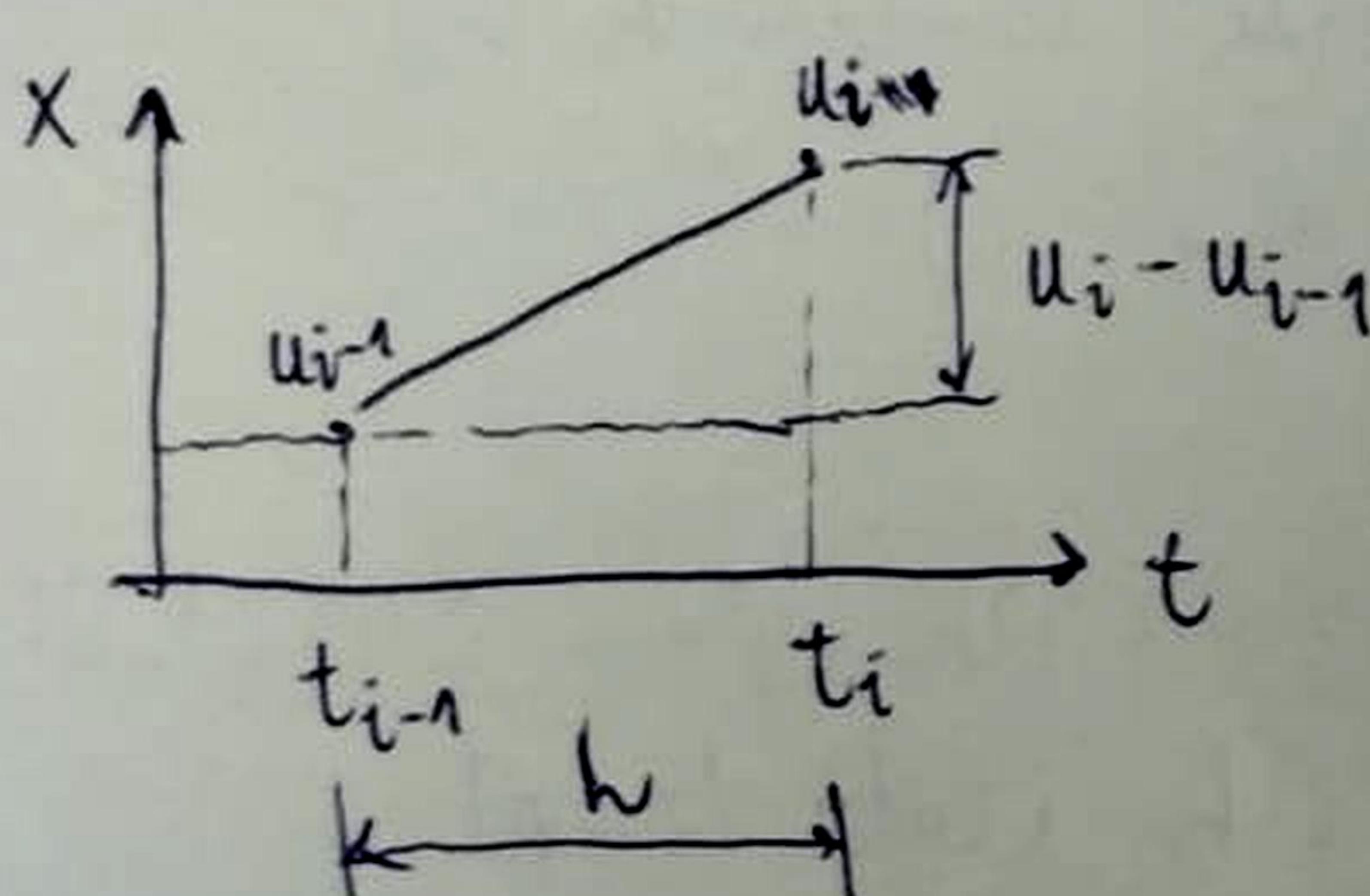
$$\boxed{x(t) = e^{-2t}}$$

* Método Euler Explícito:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x(t)), \quad x(0) = x_0, \quad t_i = i \cdot h$$

1^a ordem
erro global
 $\propto h^1$

Assumindo ~~convergência~~ ^{aproxim.}: $u_{i-1} \approx x(t_{i-1})$



$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{h} \quad (\text{diferenças finitas})$$

$$\boxed{u_i = u_{i-1} + h \cdot f(t_{i-1}, u_{i-1})}$$

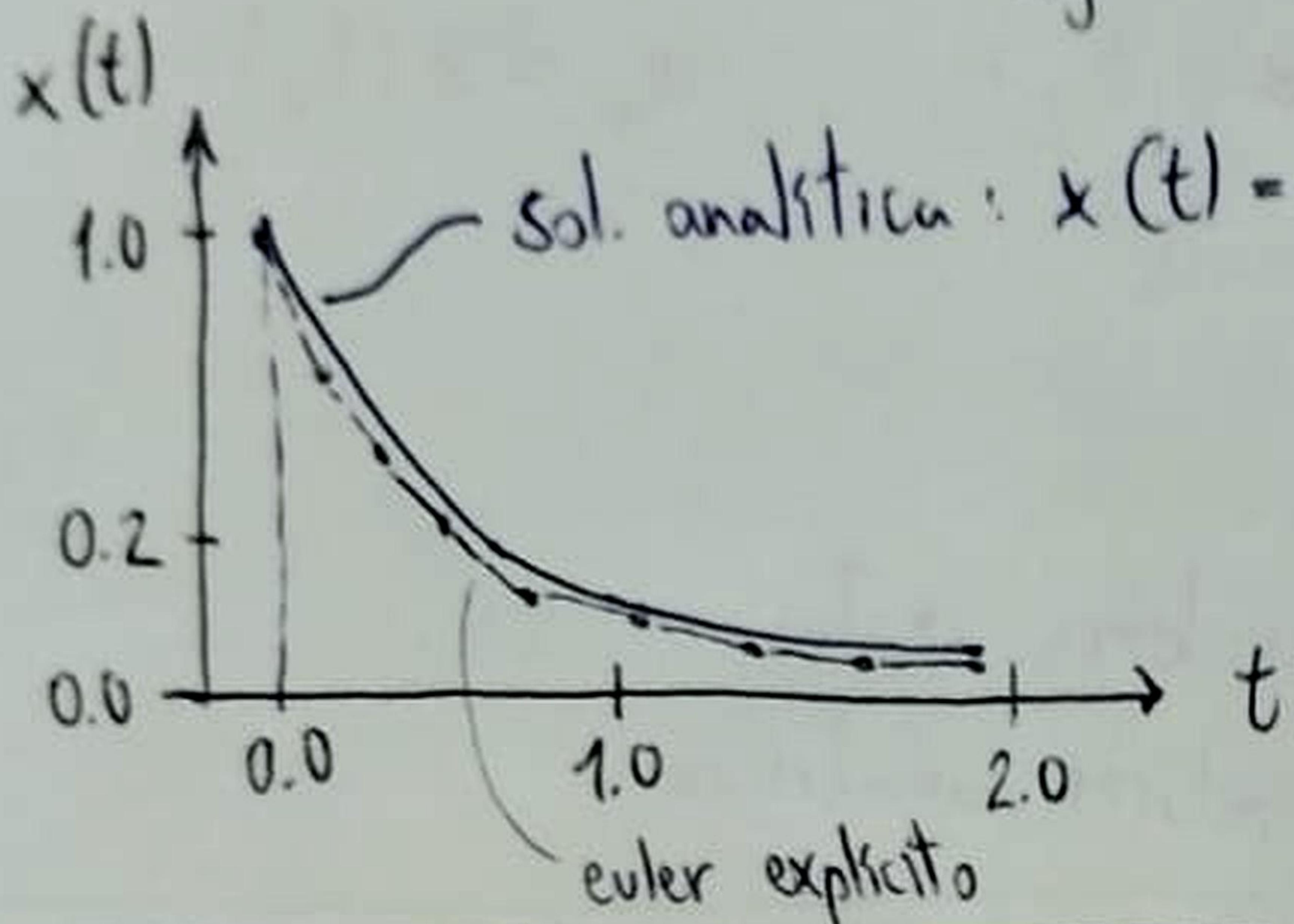
$$\left. \begin{array}{l} i = 1, 2, \dots, n \\ u_0 = x_0 \end{array} \right\}$$

derivada no
início do
intervalo

Euler aproxima a curva real com uma linha reta a cada intervalo.

- Voltando do ex.: $\frac{dx}{dt} = -2x$, $x(0) = 1$

Com $h = 0.1$, temos: $u_0 = 1$,
 $u_1 = u_0 + h(-2u_0) = 1 + 0.1(-2 \cdot 1) = 1 - 0.2 = 0.8$
 $u_2 = 0.8 + 0.1(-2 \cdot 0.8) = 0.8 - 0.16 = 0.64$
 $u_3 = \dots \downarrow$ decresce no tempo, como esperado



Gen.: $\frac{dx}{dt} = -\lambda x$

$u_i = u_{i-1} + h \cdot f(t_{i-1}, u_{i-1}) = u_{i-1} - h\lambda u_{i-1}$

$u_i = (1 - h\lambda) \cdot u_{i-1}$

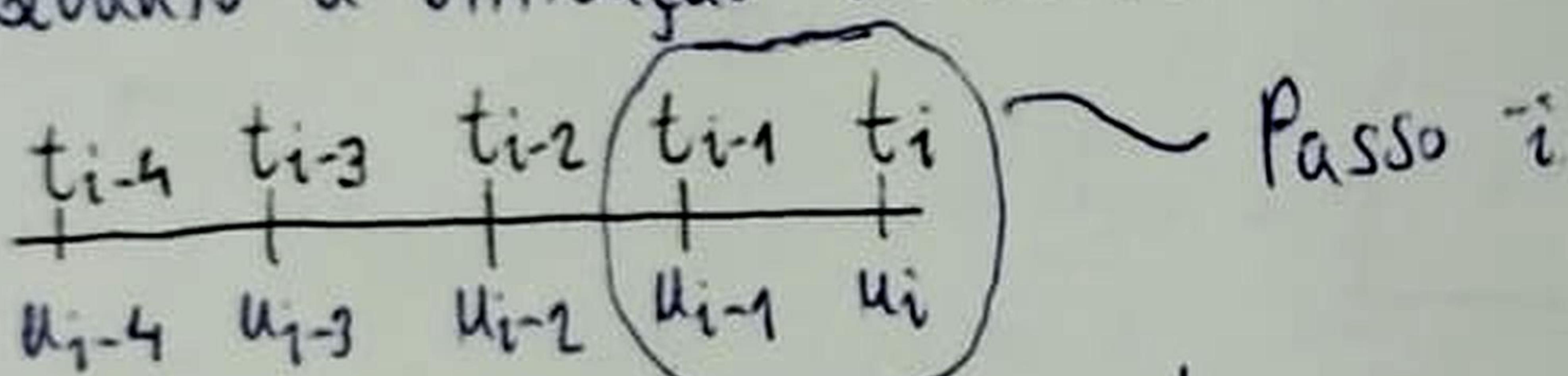
Razão q : $q = 1 - h\lambda$, $u_i = q \cdot u_{i-1}$

Estabil.: $|q| < 1$: estável (decresc., não-osc.)
 $q < 0$: oscilatória e decresc.
 $|q| > 1$: instável (osc. e cresc.)

↓
requer
h pequeno

- Classificação dos métodos numéricos de resolução de EDOs:

- 1) Quanto à utilização de valores anteriores da sol. numérica:



- Só utiliza valores do início do passo: Método de passo simples

Ex: Métodos Euler, tipos Runge-Kutta

- Utiliza valores do início do passo e valores de passo anteriores: Métodos de passos múltiplos. Ex.: tipo ADAMS, tipo BDF

- 2) Quanto à estrutura das eq. discretizadas:

- Métodos explícitos \rightarrow Cálculo de u_i só depende de valores anteriores de u

$$\hookrightarrow u_i = F(u_{i-1}, u_{i-2}, \dots)$$

- Métodos implícitos \rightarrow Cálculo de u_i "depende" também de u_i

$$\hookrightarrow u_i = F(u_i, u_{i-1}, \dots)$$

- 3) Quanto à ordem da precisão do método:

$$|x_i - u_i| \approx C h^n \quad \text{Ex: MATLAB} \rightarrow \text{ODE45}, \text{Python} \rightarrow \text{RK23, RK45}$$

- 4) Quanto ao passo:
 - Passo fixo: $t_i = i \cdot h$ (todos do cap.)

- Passo variável: $t_i = t_{i-1} + h_i$ (h varia com i) \rightarrow + robusto

* Método de Euler Implícito:

mesma ideia de antes: $\frac{dx(t)}{dt} = f(t, x(t))$, $x(0) = x_0$

discretiza o tempo: $t_i = i \cdot h$

aproxim.: $x(t_i) \approx u_i$

$1^{\text{a}} \text{ ordem}$:
erro global $\propto h^1$

Euler Implícito $\xrightarrow{\text{usa}}$ derivada no final do intervalo:

$$u_i = u_{i-1} + h \cdot f(t_i, u_i)$$

→ método mais estável, esp. p/ probl. rígidos
 ↳ mas precisa resolver uma eq. não-linear
 a cada passo ($u_i = \dots f(u_i)$)
 ↳ ex. Newton-Raphson

• Voltando ao ex. gen.: $\frac{dx}{dt} = -\lambda x$, $x(0) = x_0$

$$u_i = u_{i-1} + h \cdot (-\lambda \cdot u_i)$$

pode usar h
 ↑ grande

$$u_i + h\lambda u_i = u_{i-1}$$

$$u_i = q \cdot u_{i-1}$$

estável
 ↑

$$u_i (1 + h\lambda) = u_{i-1}$$

$$u_i = \frac{1}{1 + h\lambda} \cdot u_{i-1}$$

$$\text{razão: } q = \frac{1}{1 + h\lambda}$$

sempre $0 < q < 1$

(decrescente e não-oscil.)

* Método de Euler Trapezoidal, (Implícito e 2^{a} ordem):

usa a média do início e fim intervalo:

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

Newton-Raphson
 ↑

↳ implícito: sol. eq. não-linear p/ u_i

$$\text{Ex teste: } \frac{dx}{dt} = -\lambda x : u_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} [-\lambda u_{i-1} - \lambda u_i]$$

$$u_i = u_{i-1} - \frac{h\lambda}{2} (u_{i-1} + u_i)$$

2^{a} ordem:

erro global $\propto h^2$
 - mais preciso

$$u_i + \frac{h\lambda}{2} u_i = u_{i-1} \left(1 - \frac{h\lambda}{2}\right)$$

$$u_i \left(1 + \frac{h\lambda}{2}\right) = u_{i-1} \left(1 - \frac{h\lambda}{2}\right)$$

$$u_i = q \cdot u_{i-1}$$

$$\Rightarrow u_i = \left(\frac{1 - h\lambda/2}{1 + h\lambda/2}\right) \cdot u_{i-1}$$

sempre
 estável

$$\text{razão: } q = \frac{1 - h\lambda/2}{1 + h\lambda/2}$$

: Estab. $-|q| < 1$, p/ $h > 0$ e $\lambda > 0$ (estável)

- $q < 0$, p/ $h\lambda > 2$ (osc. e decresc.)

* Método de Euler Aperfeiçoado (Método de Heun)

ou método Euler preditor - corretor

2^o ordem
erro global
 $\propto h^2$

- É um método de Euler explícito com 2 passos:

(1^o) Predição (Euler simples) (início do intervalo):

$$u_i^* = u_{i-1} + h \cdot f(t_{i-1}, u_{i-1})$$

(2^o) Correção (média da curva aprox. anterior e no final do intervalo):

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

- Voltando ao ex: $\frac{du}{dt} = -\lambda u$; $f(t, u) = -\lambda u$:

$$(1^o): u_i^* = u_{i-1} - h\lambda u_{i-1} = u_{i-1} (1-h\lambda)$$

$$(2^o): u_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} [-\lambda u_{i-1} + (-\lambda u_i^*)]$$

$$u_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot [-\lambda u_{i-1} - \lambda (1-h\lambda) u_{i-1}]$$

$$u_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot (-\lambda u_{i-1} - \lambda u_{i-1} (1-h\lambda))$$

$$u_i = u_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot [-\lambda u_{i-1} (2-h\lambda)]$$

$$u_i = u_{i-1} \left[1 - h\lambda + \frac{h^2 \lambda^2}{2} \right]$$

Razão q : $q = \frac{u_i}{u_{i-1}}$ $\Rightarrow q = 1 - h\lambda + \frac{h^2 \lambda^2}{2}$

Estabil.: p/ método ser estável: $|q| < 1$:

$$\text{subst. } z = h\lambda \quad q(z) = 1 - z + \frac{z^2}{2}$$

$$\text{região estabil. } |q(z)| < 1 : 1 - z + \frac{z^2}{2} < 1 : 0 < z < 2$$

Logo, estável: quando $0 < h\lambda < 2$,

- $q(z) \geq 0$ p/ todos z . (nunca vai ser oscilatório)

- $q > 1$ p/ $h\lambda > 2$ ou $h\lambda < 0$ (instável, sem oscilações)