



## MODELAGEM MATEMÁTICA DE PROBLEMAS AMBIENTAIS

*José Antonio Salvador*

e

*Selma Helena de Vasconcelos Arenales*



## APRESENTAÇÃO

*A Terra produz o bastante para a necessidade de todos, mas não suportará a voracidade de poucos. (Gandhi 1869 – 1948)*

Neste texto abordaremos alguns modelos matemáticos simples de problemas ambientais mas que podem fornecer subsídios para a modelagem de problemas reais mais complexos.

Os estudos de problemas relativos as questões ambientais têm se evidenciado nos últimos anos e, dentre eles, destacamos aqueles que podem ser representados por modelos matemáticos. Num modelo matemático geralmente estamos interessados em prever o valor de uma ou mais variáveis em algum tempo futuro, como por exemplo, medir a quantidade de poluentes em um rio num determinado tempo a partir de alguns dados e algumas hipóteses.

Estudos podem contribuir para identificar e quantificar, por exemplo, os limites da sustentabilidade de uma população, da exploração dos recursos naturais terrestres que não deveriam ser transgredidos, prever a quantidade de poluentes da água, solo ou ar, avaliar os impactos ambientais e planejar o gerenciamento dos recursos naturais para que as atividades humanas não continuem causando mudanças ambientais tão lesivas e irreversíveis.

No estudo dos problemas ambientais, geralmente, levamos em conta que todo ser vivo necessita de matéria e energia para sobreviver, e explorar matematicamente o balanço de tais quantidades é de extrema importância para elaboração de modelos e análise dos resultados que almejamos.

A existência de vida num planeta depende muito das condições ambientais. O nível da qualidade de vida no nosso planeta Terra, situado a uma distância conveniente de cerca de 150 milhões de quilômetros do Sol, depende principalmente do equilíbrio ou balanço da terna constituída dos recursos naturais, das populações e da poluição gerada por ela. Assim, a qualidade da água, do ar e do solo é de suma importância para a subsistência humana e de todas as outras espécies de animais e vegetais.

Centenas de sistemas planetários já foram descobertos no universo e, provavelmente, alguns deles em condições favoráveis à existência de algum tipo de vida e com muitos recursos naturais. E mesmo assim, ao esgotarmos nossos recursos levaríamos décadas ou centenas de anos para chegarmos noutro planeta devido às distâncias astronômicas e às tecnologias ainda não disponíveis,

o que nos leva a refletir seriamente sobre a sustentabilidade. Felizmente temos sido privilegiados neste sentido com as condições ambientais existentes na Terra. Todavia, é importante a nossa contribuição contínua para preservar a vida sustentável no nosso planeta.

Na investigação de um problema ambiental utilizaremos o nosso conhecimento e ferramentas matemáticas para auxiliar no entendimento, na identificação das constantes, dos parâmetros e variáveis para elaboração de modelos e, verificar a sua validação e fazer previsões.

Ressaltamos que para a compreensão e resolução dos modelos que estudaremos posteriormente, é extremamente importante o conhecimento de disciplinas básicas como cálculo diferencial e integral, geometria analítica, álgebra linear, equações diferenciais, computação básica e cálculo numérico.

Trataremos de problemas ambientais cujos modelos matemáticos são estabelecidos por leis, relações, funções, matrizes, sistemas de equações algébricas, inequações, problemas de otimização linear, sistemas de equações discretas, sistemas de equações diferenciais ordinárias e equações diferenciais parciais. As soluções destes modelos matemáticos podem ser analíticas ou aproximadas obtidas por métodos numéricos e computacionais.

Destacaremos ainda que a modelagem matemática é uma reprodução idealizada de algumas ou de todas as características físicas de um processo natural em escala adequada, representando-o numa linguagem de fácil acesso e uso, integrando teoria e prática na busca de respostas para diferentes estímulos visando compreender a realidade e de meios para agir e transformá-la com a tomada de decisões acertadas.

Podemos afirmar ainda que um modelo matemático é uma representação do comportamento de um dado sistema levando em consideração as mesmas características da realidade, ou seja, representando as variáveis essenciais do fenômeno e estabelecendo suas relações por meio de hipóteses ou baseadas em dados experimentais.

Aos amantes da natureza, estudantes de várias áreas como Ecologia, Matemática, Engenharia, especialmente de Engenharia Ambiental esperamos que a familiarização com os modelos apresentados neste texto introdutório possa abrir as portas da imaginação para a criação de outros mais realistas que visem o bem estar de todos.

São Carlos, 2011 ano internacional das Florestas! ☺

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução a modelagem matemática</b>	<b>3</b>
1.1	Introdução a Modelagem Matemática Ambiental . . . . .	5
1.2	Descrição de modelos matemáticos . . . . .	8
1.3	Passivos Ambientais . . . . .	15
1.4	Mapas conceituais na exploração de problemas ambientais . . . . .	19
1.5	Problemas propostos . . . . .	21
<b>2</b>	<b>Matemática Básica para Problemas Ambientais</b>	<b>23</b>
2.1	Introdução . . . . .	25
2.2	Sequências em problemas ambientais . . . . .	25
2.3	Funções e taxas de variação em problemas ambientais . . . . .	28
2.4	Interpolação polinomial . . . . .	36
2.5	Polinômio interpolador de Lagrange . . . . .	37
2.5.1	Erro cometido . . . . .	40
2.6	Método dos mínimos quadrados . . . . .	42
2.6.1	Ajuste de dados por uma função linear . . . . .	42
2.7	Ajustes não-lineares . . . . .	46
2.7.1	Ajuste exponencial . . . . .	46
2.7.2	Ajuste geométrico . . . . .	53
2.7.3	Ajuste hiperbólico . . . . .	56
2.7.4	Ajuste Michaelis-Menten . . . . .	58
2.7.5	Ajuste Logístico . . . . .	60
2.7.6	Ajuste trigonométrico . . . . .	63
2.8	Problemas propostos . . . . .	68

<b>3</b>	<b>Modelos com Equações Discretas</b>	<b>71</b>
3.1	Introdução . . . . .	73
3.2	Modelo discreto de poluição de uma represa . . . . .	75
3.3	Simulação de poluição numa represa . . . . .	76
3.4	Equações discretas . . . . .	80
3.5	Métodos de resolução de equações discretas lineares . . . . .	83
3.6	Crescimento geométrico de uma população . . . . .	91
3.7	Equações discretas não autônomas . . . . .	95
3.8	Equações discretas lineares com coeficientes constantes . . . . .	96
3.9	Equações discretas lineares não homogêneas . . . . .	105
3.10	Equações de diferenças . . . . .	110
3.11	Modelo de poluição de rios . . . . .	111
3.12	Poluição num compartimento do rio . . . . .	112
3.13	Emissão periódica de poluentes . . . . .	113
3.14	Crescimento logístico discreto . . . . .	114
3.15	Sistemas de equações discretas . . . . .	119
3.16	Modelos matriciais discretos de crescimento populacional . . . . .	121
3.17	Adimensionalização . . . . .	125
3.18	Problemas propostos . . . . .	127
<b>4</b>	<b>Modelos com EDO</b>	<b>133</b>
4.1	Introdução às Equações Diferenciais Ordinárias . . . . .	135
4.2	Equação de balanço . . . . .	136
4.3	Modelos de crescimento populacional . . . . .	136
4.3.1	Lei de Malthus e o crescimento livre . . . . .	136
4.3.2	Crescimento logístico de uma população . . . . .	140
4.3.3	Taxa de crescimento intrínseca de uma população . . . . .	145
4.3.4	Modelos de dinâmica populacional mais gerais . . . . .	146
4.3.5	Modelo com limiar . . . . .	146
4.3.6	Modelo de Gompertz . . . . .	147
4.3.7	Modelo de Montroll, Maitra e Goel . . . . .	149
4.3.8	Mais generalizações da equação logística . . . . .	149

4.4	Modelos de evolução de recursos naturais . . . . .	150
4.4.1	Recursos naturais com exploração . . . . .	151
4.5	Aspectos gerais de poluição numa represa . . . . .	154
4.5.1	Poluição numa represa: um problema de valor inicial . . . . .	155
4.5.2	Poluição continuada numa represa . . . . .	158
4.5.3	Poluição contínua e decrescente . . . . .	162
4.5.4	Poluição oscilatória . . . . .	165
4.6	Adimensionalização de um pvi . . . . .	167
4.7	Outros modelos . . . . .	169
4.7.1	Modelo de Bertalanffy . . . . .	169
4.7.2	Modelos de reações químicas de primeira ordem . . . . .	170
4.7.3	Modelos de reações químicas de segunda ordem . . . . .	171
4.7.4	Modelo de misturas de substâncias . . . . .	173
4.7.5	Modelo de Michaelis-Mentem . . . . .	173
4.7.6	Modelo de Newton para difusão do calor . . . . .	174
4.8	Modelos de evolução de um ecossistema . . . . .	175
4.9	Métodos numéricos para solução de EDO . . . . .	184
4.9.1	Método baseado nas Séries de Taylor . . . . .	184
4.9.2	Método de Euler . . . . .	186
4.10	Problemas propostos . . . . .	191

## 5 Modelos com EDP 197

5.1	Introdução . . . . .	199
5.2	Equações da termodinâmica dos meios contínuos . . . . .	199
5.3	Lei de balanço de massa . . . . .	202
5.4	Poluição de um rio sob a ação de bactérias . . . . .	203
5.5	Lei de balanço de momento linear . . . . .	208
5.6	Lei de balanço de momento angular . . . . .	209
5.7	Lei de balanço de energia . . . . .	209
5.8	Modelos matriciais contínuos de população . . . . .	210
5.9	Equação da difusão a partir da equação da energia . . . . .	213
5.10	Equação da difusão de poluentes . . . . .	215

5.11	Classificação das equações diferenciais parciais . . . . .	218
5.12	Problema de difusão unidimensional . . . . .	222
5.13	Adimensionalização de edp . . . . .	229
5.14	Um modelo de poluição do ar . . . . .	232
5.15	Solução numérica de equações diferenciais parciais . . . . .	234
5.16	Problemas propostos . . . . .	239
<b>6</b>	<b>Modelos com Otimização Linear</b>	<b>243</b>
6.1	Introdução . . . . .	245
6.2	Modelo de um Problema de Otimização Linear . . . . .	245
6.3	Alguns problemas ambientais de Otimização Linear . . . . .	248
6.3.1	Um modelo para o transporte de lixo contaminado . . . . .	249
6.3.2	Um modelo para a composição de areias para filtro . . . . .	250
6.4	Solução gráfica de um POL . . . . .	252
6.5	Sistemas de equações lineares . . . . .	255
6.6	Teoria básica de Otimização Linear . . . . .	258
6.7	Método Simplex . . . . .	260
6.8	Casos especiais . . . . .	266
6.9	Fase I e Fase II do Método Simplex . . . . .	273
6.10	Problemas propostos . . . . .	279
<b>7</b>	<b>Ferramentas computacionais</b>	<b>281</b>
7.1	Introdução as ferramentas computacionais . . . . .	283
7.2	Cálculos aritméticos e gráficos . . . . .	284
7.3	Sequências, funções e gráficos . . . . .	286
7.4	Solução de equações discretas . . . . .	294
7.5	Resolução de equações diferenciais ordinárias . . . . .	296
7.6	Resolução de equações diferenciais parciais . . . . .	298
7.7	Resolução de um POL . . . . .	300
	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>303</b>
	<b>SOBRE OS AUTORES</b>	<b>307</b>





# UNIDADE 1

## Introdução a modelagem matemática



## 1.1 Introdução a Modelagem Matemática Ambiental

*Entre para o mundo da vida saudável,  
prefira sempre alimentos orgânicos!  
[www.agricultura.gov.br](http://www.agricultura.gov.br)*

A modelagem matemática de um problema real consiste essencialmente no trabalho de escrevê-lo numa linguagem matemática e posteriormente resolvê-lo, interpretando sua solução numa linguagem compatível com a do mundo real (BARROS E BASSANEZI, 2006). É uma ferramenta de fundamental importância para entender e analisar a natureza de sistemas complexos reais.

A abordagem de um fenômeno real passa pelo processo de entendimento, pela definição do mesmo da forma mais precisa possível com a escolha das informações necessárias. A transposição deste para um problema numa linguagem matemática adequada contribui para a compreensão, equacionamento, simulação e resolução do mesmo.

É de grande importância compreender quais aspectos de um problema são mais relevantes para serem considerados num modelo matemático, bem como saber as suas limitações decorrentes das simplificações, já que alguns aspectos serão omitidos durante o processo de modelagem.

Podemos considerar um modelo matemático adequado e eficiente quando ele for capaz de produzir soluções geradas em tempos computacionais aceitáveis e suficientemente próximas de valores reais para situações conhecidas ou estimadas.

Considerando uma população de bactérias, por exemplo, quando submetidas a algumas condições ambientais, como temperatura, umidade, alimento etc. e, o seu tamanho é medido em determinados momentos e analisado. Estabelecido um modelo matemático envolvendo alguns parâmetros essenciais se os valores reais observados coincidirem ou se aproximarem dos valores obtidos pelo modelo, dizemos que o modelo representa bem o problema e este poderá ser útil na previsão da evolução da população.

Quando na resolução de um problema real, ocorre que a formulação matemática correspondente não conduz a um resultado aceitável, ou uma situação em que não se consegue obter uma solução compatível com a situação real do problema, devemos aperfeiçoá-lo, enriquecê-lo gradualmente se necessário, re-

vendo e fazendo ajustes como o incremento de hipóteses, parâmetros ou restrições adequadas, de modo a não invalidá-lo ou mesmo, se necessário, abordar o problema com um novo modelo matemático.

Em engenharia ambiental, a modelagem matemática é uma ferramenta de grande interesse cujo objetivo fundamental é explorar um dado problema, coletando dados, estipulando variáveis, parâmetros e estabelecendo hipóteses, impondo ou relaxando restrições para simular e prever eventos com interesses subjacentes e a partir de alguns dados importantes considerar a compatibilidade com os interesses da sociedade.

Neste texto exploramos algumas ideias de como podemos representar matematicamente alguns problemas ambientais para que possamos simular a evolução de sistemas ambientais partindo de alguns dados e hipóteses.

Dentre os problemas ambientais, sabemos que a poluição é uma alteração nas características da água, do ar ou do solo que produz prejuízos à nossa sobrevivência ou à sobrevivência das espécies de animais ou vegetais. Quando a água, o ar ou o solo de uma região são agredidos com uma contaminação, por exemplo, por meio de vazamentos, fumaças, lixo, aterros, materiais radioativos, agrotóxicos etc., não somente as espécies mas os alimentos desta região também ficam contaminados e a subsistência da população fica comprometida.

Problemas ambientais relativos à poluição estão sendo causados pelo aumento significativo da população humana e da industrialização, principalmente nas grandes cidades, pelo lançamento de efluentes diretamente nos rios que nos abastecem, uso indiscriminado de agrotóxicos no solo, transportes movidos com combustíveis fósseis, etc. Ultimamente, a poluição e o uso inadequado dos recursos hídricos vêm prejudicando a qualidade das nossas reservas de águas e tornando cada vez mais cara a sua exploração. De fato, alguns dos aquíferos se encontram em regiões profundas que impõem limites técnicos que impedem que toda água subterrânea seja retirada. O custo de extração torna o aproveitamento desses aquíferos impraticável, o que nos leva a concentrar os estudos em águas superficiais do planeta e exigindo da sociedade um comprometimento maior para preservá-las límpidas.

A quantidade (massa) de água na Terra é estimada em  $0.136 \times 10^{19}$  ton (toneladas), ou seja, mais de um quintilhão de toneladas. Entretanto, somente 3% dela é superficial e corresponde à água em trânsito que se renova cerca de 30 vezes por ano. Desses 3%, somente 0.8% correspondem à água doce. Os 97%

da água restante se encontra na forma de água subterrânea cujo tempo de armazenamento varia de duas semanas a 10 000 anos, dependendo das condições do aquífero considerado e da exploração (WENDELANDER, 2003).

Embora a água esteja distribuída de modo irregular pelos cinco continentes terrestres, o nosso continente americano ocupa uma posição razoável com mais de 10% de água potável da Terra.

As cidades metropolitanas exigem grande quantidade de água. Elas são abastecidas por cerca de 20% dos nossos rios o que leva a necessidade de recuperação e de manutenção das suas matas ciliares, além de preservá-los livres da poluição.

Considerando o aumento das emissões de substâncias gasosas nocivas que vem gerando cada vez mais problemas atmosféricos, um problema de grande impacto global gerado é a emissão do cloro flúor carbono (CFC) e outros elementos que reagem com a camada de ozônio e a destroem.

O ar que respiramos está cada vez mais comprometido, principalmente nas grandes cidades, onde a concentração de gases e de partículas sólidas suspensas são notadamente nocivas, como o monóxido de carbono emitido pela crescente frota de veículos movidos a combustíveis fósseis ou a emissão procedente das indústrias poluidoras que tem sido muito maior nos últimos tempos.

Uma vez gerada a poluição, esta se propaga pelo mundo afora de uma forma ou de outra, mesmo quando se dispersa, o processo de despoluição natural é difícil e muitíssimo lento.

Além do ar, da água e do solo cada vez mais contaminados pelas diversas formas de poluição que influenciam na qualidade do ar que respiramos, da água que bebemos e dos alimentos que comemos, temos ainda o lixo eletrônico que vem aumentando substancialmente nos últimos anos, inclusive o lixo espacial no ambiente aéreo que circunda o nosso planeta e o perigo das radiações atômicas.

Portanto, é imprescindível abordar os problemas ambientais em todos os níveis, principalmente com os recursos da modelagem matemática com a qual poderemos entendê-los melhor e propor ou indicar soluções para amenizar as consequências da má utilização do nosso planeta.

## 1.2 Descrição de modelos matemáticos

A busca contínua para desvendar e entender o mundo por meio de teorias e experimentos para melhorar a qualidade de vida no planeta é uma atividade natural do homem, porém, independentemente da vontade e de cada ação que fizermos o meio ambiente é dinâmico e continuará existindo e se transformando.

Deste modo, um recurso que pode contribuir para a busca da melhoria da qualidade de vida é a modelagem matemática, que pode ser entendida de várias maneiras como citada em BASSANEZI (2002), TUCCI (1998) e outros.

- A modelagem matemática é uma reprodução idealizada de algumas ou de todas as características físicas de um processo natural em escala adequada representando-o numa linguagem ou forma de fácil acesso e uso, unindo teoria e prática na busca de respostas para diferentes estímulos visando compreender a realidade e, de meios para agir e transformá-la com a tomada de decisões acertadas;
- Em engenharia ambiental, a modelagem matemática é uma ferramenta de grande interesse cujo objetivo fundamental é explorar um dado problema, observando, coletando dados, estipulando alguns parâmetros e hipóteses, impondo ou relaxando restrições para simular e prever eventos com interesses subjacentes, a partir de alguns dados considerados importantes ou mesmo assumindo compromissos com interesses do cliente e da sociedade.

Muitos problemas relativos ao ambiente em que vivemos podem ser modelados matematicamente, tais como os impactos do crescimento de uma população; da urbanização de uma bacia hidrográfica; da alteração do leito de um rio; da ocorrência de acontecimentos extremos como lançamento de poluentes em rios, represas, lagoas ou ar, etc. Essa modelagem pode ser feita para que medidas preventivas possam ser tomadas de modo a reduzir os impactos lesivos a população local e mundial etc.

Simplificadamente, podemos afirmar que um modelo é uma representação do comportamento de um dado sistema complexo levando em consideração as mesmas características da realidade, ou seja, representando as variáveis essenciais do fenômeno e estabelecendo suas relações por meio de hipóteses ou baseadas em dados experimentais.

Os experimentos podem gerar um conjunto de dados adequado para mostrar as suas propriedades usando-se tabelas e/ou gráficos, descrição esta conhecida como **modelo gráfico**. Muitas vezes os dados precisam ser interpolados ou ajustados para serem utilizados num modelo matemático contínuo, conforme veremos na Unidade 2.

Em geral, classificamos os modelos em físicos, analógicos e matemáticos.

Num **modelo físico** representamos um sistema real por um protótipo, numa escala muito menor, utilizando o conceito de semelhança para estabelecer o modelo (WENDELANDER, 2003) conforme abordaremos na seção 3.3 da unidade 3 para simulação da poluição numa represa com recipientes de água.

Um **modelo analógico** é baseado na analogia entre diferentes processos físicos. Utiliza-se a analogia das equações que regem diferentes fenômenos, para modelar o processo desejado num sistema mais conveniente e de custo reduzido. Uma analogia pode ser encontrada entre as equações do movimento livre e a Lei de Malthus do crescimento exponencial de uma população conforme veremos na Unidade 4, ou entre um modelo de movimento oscilatório do tipo massa-mola e o de um circuito elétrico do tipo RLC, que consiste de um resistor (R), um indutor (L) e um capacitor (C).

Num **modelo matemático** procuramos representar a natureza de um sistema, através de uma formulação de um conjunto de equações ou sistemas de equações matemáticas a partir de um conjunto de dados, hipóteses e/ou leis físicas.

Uma grande vantagem de um modelo matemático é a versatilidade em que podemos modificar a sua lógica, incluindo ou retirando novos aspectos do problema real e fazendo diversas simulações para obtenção dos resultados de diferentes situações de um mesmo problema ou de diferentes problemas, além de obtermos resposta com mais rapidez e segurança com as ferramentas computacionais.

Durante o estudo de um problema ambiental é importante a discussão do mesmo por uma equipe multidisciplinar para que se possa levar em consideração os elementos essenciais vistos com uma abordagem ampla e diversificada.

Inicialmente na fase de estudos de um problema devemos identificar algumas questões relevantes e verificar se para resolver o problema é realmente necessário a elaboração de um modelo matemático.

Caso afirmativo, devemos ter clareza sobre qual é o problema que deve ser



modelado? Qual é o objetivo do modelo em questão? Quais processos são mais relevantes e quais devemos considerar? Quais são as variáveis do sistema? É possível obter alguns dados do problema? Quais são os parâmetros disponíveis e que dados são conhecidos? Quais as relações entre os dados? Que respostas procuramos? E, como podemos aferir o modelo? Os resultados podem ser verificados por meio de medições? O modelo pode ser validado? O modelo pode ser aplicado? etc.

Após a tomada de decisão sobre a utilização de um modelo matemático, devemos considerar as limitações do mesmo, as vantagens que ele pode oferecer e as suas desvantagens.

Lembramos que um modelo é somente uma ferramenta e as suas possíveis soluções devem servir de subsídios para indicar a tomada de decisões. Estas só podem ser tomadas quando existe a interpretação correta e a familiaridade necessária com os conceitos e técnicas empregados, bem como a validação do modelo e o conhecimento das reais limitações da modelagem realizada.

Devemos no entanto ter em mente que nenhum modelo é capaz de descrever exatamente os processos naturais por conta de diversos fatores como: a grande complexidade deles; o grande número de parâmetros; a falta de conhecimento ou a imprecisão de alguns deles; as hipóteses introduzidas; as simplificações convenientes ou as generalizações introduzidas etc.

A resposta de um modelo depende principalmente das hipóteses e simplificações e da exatidão dos parâmetros de entrada que propiciou a sua resolução.

Às vezes, somos levados a dividir um problema grande e complexo gerado pelo modelo em vários problemas menores e mais simples, e a partir dos mais simples resolver o mais complexo (POLYA, 1977).

Num problema físico geralmente fazemos algumas suposições para definir as questões mais relevantes e estipular as hipóteses sobre o sistema natural abordado. Na modelagem matemática geralmente simplificamos devidamente a descrição de um processo físico transformado em problemas regidos por relações matemáticas, considerando as leis de balanço como a conservação de massa, de energia etc. bem como as condições iniciais e de condições de contorno do problema.

Sempre que possível resolvemos analiticamente o problema em questão. No entanto, na maioria das vezes, nem sempre é possível encontrar uma solução analítica, o que nos leva a considerar métodos numéricos apropriados.

No tratamento numérico, buscamos aproximações da solução, como por exemplo, a descrição aproximada de uma equação diferencial por uma formulação algébrica de equações de diferenças etc. e o cálculo das variáveis em pontos discretos do domínio considerado.

Para obtenção dos resultados desejados na resolução de problemas podemos necessitar de diferentes conceitos e técnicas matemáticas como aquelas básicas que envolvem as matrizes, sistemas lineares etc. bem como de suas propriedades.

Outra consideração importante é que os parâmetros físicos obtidos da pesquisa ou literatura frequentemente não são números absolutos, podendo pertencer a um intervalo de valores reais com incertezas, o que exige a calibração e o ajuste com base em uma série de dados, ou mesmo a utilização da teoria Fuzzy (JAFELICE, 2005) que tem sido difundida ultimamente.

A interpretação dos resultados obtidos é uma fase final de grande importância da modelagem que implica nos conhecimentos físicos específicos das grandezas calculadas e a comparação dos resultados numéricos com valores medidos e/ou esperados.

A validação de um modelo é feita considerando uma série de parâmetros e medidas, de preferência por um certo período em condições variadas. Se a solução obtida não for a desejável, realmente devemos retornar ao problema inicial e reelaborar o modelo matemático ou iniciar um novo modelo mais realista. A alteração do problema considerando novas necessidades ou o aumento da precisão exigida pode levar inclusive à mudança do modelo, embora o objeto concreto de estudo permaneça o mesmo, a sua representação pode ser mudada.

O resultado de um modelo matemático ambiental nos dá um prognóstico que pode nos indicar uma direção para a tomada de decisões convenientes visando à melhoria da qualidade de vida da população.

A adequação de um modelo matemático ambiental pode responder determinadas perguntas como por exemplo as que abordam:

- os impactos do crescimento populacional (de um assentamento, de uma cidade etc.);
- a instalação de uma nova indústria numa região;
- o desmatamento ao redor de uma nascente ou das margens de um rio;
- os transtornos causados pela poluição do ar, rios, represas, lagoas etc.;

- as consequências da extração indiscriminada de determinados recursos naturais;
- as consequências da contaminação do ar, solo ou do lençol freático;
- o impacto devido à perfuração de um poço no lençol freático de uma região;
- o impacto de um vazamento de combustível ou petróleo no solo, rio ou mar;
- o impacto das chuvas torrenciais, enchentes e alagamentos numa cidade;
- métodos e processos biológicos para remediação de solos e aquíferos contaminados;
- o impacto da construção de uma usina atômica, hidrelétrica etc.;
- o impacto da predação, pesca ou caça etc.

### **Classificação dos modelos matemáticos**

Conforme o tipo de matemática utilizada, podemos classificar os modelos matemáticos em:

- **Determinístico:** quando considera que as informações de entrada, condições iniciais num determinado instante, são bem determinadas e suficientes para obter a solução, ou seja, prever o futuro;
- **Estocástico:** quando utiliza fatores aleatórios para descrever a dinâmica de um sistema;

Com relação a dependência do tempo um modelo pode ser:

- **Estático:** quando os valores das variáveis permanecem constante no tempo, de modo que a geometria espacial do sistema não depende diretamente do tempo;
- **Dinâmico:** quando as variáveis são dependentes do tempo, de modo que, uma decisão anterior influencia em decisões posteriores.

Um modelo matemático também pode ser classificado conforme as características das equações que o representa em:

- **linear;**

- **não linear.**

Lembremos que uma função real  $f(x)$  é **linear** se  $f(x_1 + x_2) = f(x_1) + f(x_2)$  e  $f(kx) = k f(x)$  para todos valores de  $x, x_1, x_2$  no seu domínio e  $k$  um valor constante. Um modelo é linear quando é representado por funções, equações ou inequações lineares, caso contrário, é não linear.

De acordo com a dimensão espacial os modelos podem ser classificados em:

- **Zero-dimensional:**

Como, por exemplo, o que aparece nas reações químicas de Na (sódio) com Cl (cloro), que resultam no NaCl (cloreto de sódio) do tipo



em que não possuem variáveis espaciais a serem determinadas.

- **Unidimensional:**

Como, por exemplo, o caso da quantidade de poluentes  $u(x, t)$  carregada por um rio estreito representado pela equação diferencial parcial da difusão

$$u_t = V u_{xx},$$

sendo  $u_t = \frac{du}{dt}$  a variação da quantidade de poluentes  $u(x, t)$  com o tempo  $t \in \mathbb{R}^+$ ,  $V$  um parâmetro real representando a velocidade média das águas do rio e  $u_{xx}$  a segunda derivada parcial da quantidade de poluentes  $u(x, t)$  em relação a variável  $x$ ,  $x \in I = [a, b] \subset \mathbb{R}$ , considerando uma única direção  $x$  de escoamento do rio.

Da mesma forma podemos considerar a infiltração unidirecional de precipitação em meio poroso; a propagação de calor em um fio metálico ou numa barra homogênea devido a uma fonte de calor na extremidade etc. são representadas por uma equação diferencial parcial unidimensional.

- **Bidimensional:**

Como aparece nos modelos de escoamento de um rio largo ou lagoa,

$$u_t = V (u_x + u_y)$$

com  $t \in \mathbb{R}^+$ ,  $(x, y) \in R \subset \mathbb{R}^2$ .

Neste caso, desprezamos a profundidade (componente vertical  $z$ ) do mesmo e levamos em consideração só o escoamento dinâmico plano nas direções  $x$  e  $y$ .

- **Tridimensional:**

Como o modelo tridimensional do problema de Dirichlet, explicitado pela equação de Laplace

$$h_{xx} + h_{yy} + h_{zz} = 0$$

para  $(x, y, z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$  descrevendo, por exemplo, o estado estacionário de um lençol freático em condições homogêneas e isotrópicas, com condições de fronteira, ou seja, conhecendo-se os valores de  $h$  na fronteira  $\partial\Omega$  de uma região  $\Omega$ .

Abordaremos alguns modelos matemáticos ambientais simples para ilustrar como ferramentas matemáticas conhecidas podem ser utilizadas para fazer previsões e nos conduzir a tomada de decisões de grande importância para nossa sobrevivência na Terra. Entretanto, modelos podem constantemente serem aperfeiçoados para torná-los cada vez mais realistas, seja utilizando as ferramentas conhecidas ou criando novas.

Muitos problemas ambientais preocupantes de nosso planeta têm sido abordados ultimamente como o limite das agressões que estão provocando a acidificação dos oceanos; a interferência dos ciclos globais de nitrogênio e do fósforo; a carga de aerossóis atmosféricos; a poluição química; o uso inadequado de água potável; as alterações no uso do solo etc., conforme ROCKSTROM et al (2009) que citam como limites já ultrapassados o do ciclo do nitrogênio, a da perda da biodiversidade e das mudanças climáticas.

Mais do que qualquer modelo, podemos questionar qual é a nossa contribuição para preservar a sustentabilidade de nosso planeta e para que as futuras gerações possam desfrutar de uma vida saudável, evitando que as nossas atividades continuem causando mudanças ambientais catastróficas, que se não forem reduzidas drasticamente ou interrompidas, brevemente destruirão a vida aqui na Terra<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup> Carta da Terra no Ministério do Meio Ambiente: <http://www.mma.gov.br/sitio/index.php?ido=conteudo.monta&idEstrutura=18&idConteudo=5225&idMenu=5253>, acesso em: 05/01/2011

### 1.3 Passivos Ambientais

Como planejar um empreendimento que provoque o mínimo de poluição ou evite danos ambientais consideráveis? Como reparar os danos causados ao ambiente? Como compensá-los?

Sabemos que os órgãos públicos têm suas limitações e muitas dificuldades para fiscalizar, distinguir através das características e atribuir responsabilidades aos causadores dos prejuízos ambientais, devido a vários fatores, entre eles, a insuficiência da quantidade de especialistas, a evidenciação dos danos, os entraves nos processos de registro e a ausência de modelos adequados.

O desenvolvimento de métodos de mensuração de danos ambientais é de grande importância para que se possa atribuir responsabilidades e também na prevenção de acidentes que causam danos ao meio ambiente.

A palavra **passivo** geralmente aparece ligada a um conjunto de dívidas encargos e obrigações de uma empresa. Assim como as dívidas, os financiamentos, o capital etc. que aparecem no balanço patrimonial das empresas, atualmente também consta um cálculo estimado do passivo ambiental, inclusive as aplicações de recursos destinados às ações de recuperação ambiental, os investimentos nas tecnologias visando contribuir com a redução ou eliminação da poluição gerada e a logística reversa.

De um modo geral, o passivo ambiental está relacionado à dívida ecológica contraída por toda população terrestre, pois todos nós geramos poluição diretamente ou indiretamente.

Desta forma, quem mais polui é o maior devedor no que diz respeito à responsabilidade social com os aspectos ambientais. O lixo urbano gerado pelos indivíduos e pelas empresas são responsáveis pelos maiores prejuízos ambientais e pela destruição da natureza.

Nos últimos anos, muitas ONGs (Organizações Não Governamentais), e alguns setores do estado vêm defendendo com mais afinco a preservação da natureza, e desempenhando um papel muitíssimo importante na proteção do meio ambiente, exigindo cada vez mais dos agentes poluidores, ou seja, fazendo-os se preocuparem com a contrapartida inclusive através de compensações.

O passivo ambiental possui características bastante abrangentes, dentre elas destacamos:

- i) os aspectos físicos que abordam diretamente os problemas ambientais;

ii) os aspectos administrativos, relativos à observância das normas e leis ambientais e dos procedimentos e estudos técnicos efetivados pelas empresas.

Com relação aos aspectos administrativos pode-se abordar atividades como o registro, o cadastramento nos órgãos do governo; o cumprimento das legislações; efetivação de estudo e do relatório de impacto ambiental das atividades exercidas; a conformidade das licenças ambientais; as pendências de infrações, as multas e penalidades; os acordos com vizinhanças ou comunidades; acordos comerciais como a certificação ambiental; pendência do Programa Básico Ambiental; resultados de auditorias ambientais; medidas de compensação e até indenização e outras mais que podem utilizar cálculos matemáticos.

Com relação aos aspectos físicos podemos abordar modelos matemáticos ambientais, como os relativos aos problemas de poluição de rios, represas, lagoas e mar; indústrias contaminadoras; instalações desativadas ou depósitos remanescentes; equipamentos obsoletos como os que contêm cézio ou outros elementos radioativos; recuperação de áreas degradadas como as que sofreram erosão, deslizamentos, oriundas de mineração; reposição florestal; recomposição de canteiros de obras; restauração de bota-fora etc.

Podemos abordar modelos matemáticos relacionados com os aspectos físicos dos reassentamentos humanos efetuados ou não realizados oriundos das construções de usinas hidrelétricas; resíduos industriais como os contendo produtos químicos; embalagens de agrotóxicos e produtos perigosos; lodo galvânico; efluentes industriais como os oriundos de curtumes; transporte, armazenagem e tratamento adequado dos resíduos; resíduos hospitalares, baterias, pilhas, acumuladores, material eletrônico; pneus usados; lixo espacial; despejos de animais como suínos e aves, cemitérios; produtos ou insumos industriais vencidos etc.

Também podem ser analisados através de modelos matemáticos problemas relacionados com os medicamentos humanos ou veterinários vencidos; bacias de tratamento de efluentes abandonadas; móveis e utensílios descartados; materiais obsoletos como formol; contaminação do solo e da água; emissões atmosféricas; preservação das reservas ecológicas e outros cujos aspectos físicos podem ser explorados matematicamente.

As pessoas e as pequenas, médias ou grandes empresas que contribuem ou contribuíram para degradação do ambiente devem ser responsabilizadas e se empenharem na recuperação do dano causado, como na compensação e na procura de meios alternativos para que possam continuar atuando sem causar

problemas ambientais.

Finalmente, como mencionado anteriormente, os modelos matemáticos ambientais podem ser úteis para a elaboração dos cálculos e para a simulação dos danos ambientais bem como para estimar os reparos ou direcionar as tomadas de decisões dos órgãos competentes.

As ferramentas matemáticas básicas como o cálculo de áreas de figuras planas, volumes de regiões espaciais, relações, funções, teoremas clássicos como o de Pitágoras, as equações e inequações algébricas e trigonométricas etc. são de grande utilidade para abordar alguns problemas ambientais simples como o do Exemplo 1.1 a seguir, sobre a área de proteção permanente das regiões ao redor de nascentes:

### **Exemplo 1.1 Preservação de uma nascente**

Sabemos que as matas ciliares são sistemas vegetais essenciais ao equilíbrio ambiental e, portanto, devem representar uma preocupação central para o desenvolvimento sustentável de qualquer local. A preservação e a recuperação delas, aliadas às práticas de conservação e ao manejo apropriado do solo, garantem a proteção de um dos principais recursos naturais, a água.

Dentre as principais funções das matas ciliares destacamos o controle da erosão nas margens dos cursos d'água evitando o assoreamento dos mananciais; minimização dos efeitos de enchentes; a filtração dos possíveis resíduos de produtos químicos como agrotóxicos e fertilizantes; colaboração na proteção da fauna local e a manutenção da quantidade e da qualidade das águas.

**Tabela 1.1 Curso d'água x Margem a ser preservada**

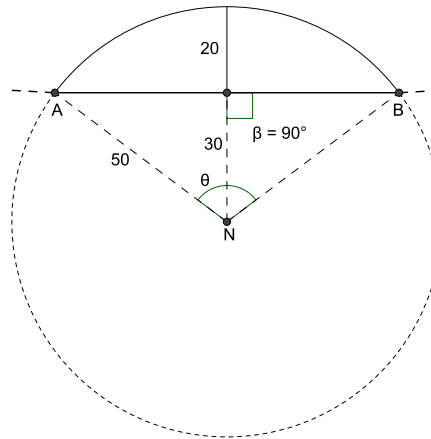
Largura do curso d'água(m)	Largura marginal a ser preservada (m)
0 - 10	30
10 - 50	50
50 - 200	100
200 - 600	500
Lago na zona urbana	30
Lago na zona rural < 20 ha	50
Lago na zona rural > 20 ha	100
Represas hidrelétricas	500

A relação prevista nos artigos 2º e 3º da Lei 4771/65 do código Florestal, entre a largura de um curso d'água e a correspondente largura da mata ciliar para



cada margem que deve ser preservada, encontra-se estabelecida na Tabela 1.1.

Assim, pequenos rios, lagos ou reservatórios em zona urbana devem ter uma região marginal de cada lado de 30 m do espelho d'água preservada com mata ciliar. Lagos ou reservatórios em zona rural com área menor do que de 20 hectares (ha), 50 m ao redor do espelho d'água. Para uma área a partir de 20 ha, a região marginal a ser preservada deve ser de 100 m ao redor do espelho d'água. Os grandes rios e as represas de hidrelétricas devem ter uma região de 500 m de mata ciliar ao redor do espelho d'água. As nascentes e olhos d'água devem ser protegidas num raio de 50 m (metros), de acordo com a Tabela 1.1.



**Figura 1.1:** Área de preservação permanente ao redor de uma nascente

Digamos que uma região ao redor de uma nascente que deveria ser protegida foi desmatada e invadida na direção radial conforme Figura 1.1 até o limite de uma secante 20 m a dentro da região circular.

#### Como obter a área da região invadida?

Considerando que as nascentes e olhos d'água devem ser protegidas num raio  $R = 50$  m, ilustramos geometricamente o problema. De fato, para auxiliar no entendimento consideremos que a Figura 1.1 representa a região circular envolvida que deveria ser protegida com a nascente no centro, a área invadida na direção radial de 20 m limitada pelo arco de circunferência AB e pela corda  $\overline{AB}$ .

Assim, a área que deveria ser preservada na região circular de raio  $R = 50$  m ao redor da nascente deve ser igual a  $A_p = \pi R^2 = \pi \times 50^2 \approx 7854 \text{ m}^2$ .

A região invadida é uma parte do setor circular subentendendo um ângulo central  $\theta$ . A área deste setor dá-se por:

$$A_s = R^2 \times \frac{\theta}{2}$$

A parte da região deste setor circular subtendendo um ângulo central  $\theta$  não invadida é igual a área do triângulo  $\widehat{ABN}$ ,

$$A_t = \frac{1}{2} \times 2 \times R \times \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \times 30$$

cujas base é a secante  $\overline{AB}$  de tamanho igual  $2 \times R \times \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$  e altura  $H = 30$  m. Portanto, a área invadida é dada por:

$$A_i = R^2 \frac{\theta}{2} - R \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) 30$$

Logo, sendo invadidos 20 m numa direção radial, a partir da corda  $\overline{AB}$ , restam  $H = 30$  m na região central.

Pelo conhecido teorema de Pitágoras,  $50^2 = H^2 + L^2$  e, a metade  $L$  da base do triângulo é igual a 40 m, então  $\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{40}{50} = 0.8$ , ou seja  $\theta = 1.854590436$  radianos.

Portanto, a área invadida obtida é dada por:

$$A_i = 50^2 \times \frac{1.85459}{2} - 2 \times 30 \times 20 = 1118 \text{ m}^2$$

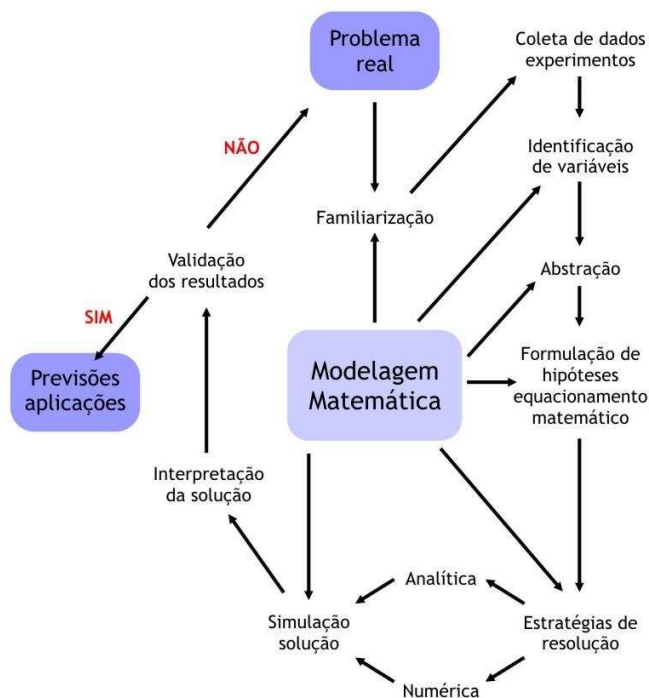
que corresponde a mais de 14% da região que deveria ser preservada.

#### 1.4 Mapas conceituais na exploração de problemas ambientais

Sabemos que existem diversas formas de comunicar conceitos e ideias em ciências e que a comunicação verbal, escrita e pictórica via mapas conceituais são poderosos elementos de comunicação e expressão do conhecimento levando a várias reflexões e questionamentos, especialmente na área ambiental.

Algumas destas formas de comunicação são mais simples e agradáveis para aprendermos a externalizar nossos pensamentos sobre o que estamos entendendo e aprendendo sobre um determinado tópico. As técnicas de mapeamento conceitual podem ser utilizadas como um instrumento para apreender e para registrar o pensar representando as relações significativas entre conceitos na forma de proposição.

Assim, um mapa conceitual é um instrumento esquemático para representar um conjunto de significados conceituais que estão imersos em uma estrutura de proposições, e após ter completado uma etapa de aprendizagem (tarefa de aprendizagem), os mapas conceituais fornecem um sumário esquemático do que está sendo aprendido, compreendido.



**Figura 1.2:** Um mapa conceitual sobre modelagem matemática

O mapa conceitual é um instrumento que pode ser utilizado no processo de pesquisa, ensino-aprendizagem e avaliação de modelagem matemática ambiental por meio de uma representação gráfica de um conjunto de significados conceituais, o qual pode vir acompanhado de um pequeno texto explicativo e inclusive de símbolos que ajudam organizar (SALVADOR et al, 2003), sistematizar, estudar e detectar as principais ideias do tópico abordado.

No mapa conceitual colocamos o tema central e o que achamos mais importante sobre este, com os links e orientações adequadas para que num simples olhar possamos notar as conexões e interações com o mesmo, como o apresentado na Figura 1.2

Observamos que cada um pode elaborar o seu mapa conceitual. Alguns itens não pode faltar no caso da modelagem matemática tais como: ler o mundo, determinar e entender o problema; fazer as hipóteses e simplificá-las; resolver o problema matemático obtido; validar as soluções matemáticas e definir a tomada de decisões baseando-se nos resultados.

Nas próximas unidades abordaremos modelos matemáticos ambientais utilizando ferramentas matemáticas como as equações discretas, equações diferenciais ordinárias e equações diferenciais parciais, métodos analíticos e numéricos,

## 1.5 Problemas propostos

1. **Protegendo nascentes:** Verifique que podemos generalizar a área da região invadida da Figura 1.1 em função da altura  $H$  do triângulo suporte da região circular invadida por:

$$A_i = 50^2 \times \frac{\theta}{2} - H \times 50 \times \sin \frac{\theta}{2} = 50^2 \times \arcsen\left(\frac{\sqrt{R^2 - H^2}}{R}\right) - H \times \sqrt{R^2 - H^2}$$

Explicite o ângulo  $\theta$  em função de  $H$  e faça uma tabela contendo os valores de  $H \times A_i$ . Se a região invadida fosse 40 m na direção radial qual seria a sua área? E se a região invadida fosse  $x$  metros na direção radial? Como poderíamos sugerir a recuperação da área invadida? Quantas mudas de árvores nativas seriam necessárias para recuperar a região? Que tipo de punição ou compensação deveria ser imposto ao invasor? Se multado, como calcular o valor da multa a ser aplicada?

2. **Crescimento populacional de uma região:** A estimativa do crescimento populacional de uma região urbana e suburbana é de grande importância para várias áreas de engenharia. Supomos que a população da área urbana de uma cidade está decrescendo exponencialmente com o tempo de acordo com a função

$$P_u(t) = P_{uMax}e^{-k_u t} + P_{uMin}$$

em que  $P_u(t)$  é a população urbana no instante  $t$ ,  $P_{uMax}$  é a população urbana máxima,  $k_u$  é a taxa de decaimento da população urbana e  $P_{uMin}$  é a população urbana mínima, além disso, supomos que a população suburbana está crescendo logisticamente de acordo com a função

$$P_s(t) = \frac{P_{sMax}}{1 + \left(\frac{P_{sMax}}{P_{s0}} - 1\right)e^{-k_s t}}$$

em que  $P_s(t)$  é a população suburbana no instante  $t$ ,  $P_{sMax}$  é a população suburbana máxima,  $k_s$  é a taxa de crescimento da população suburbana,  $P_{s0}$  é a população suburbana inicial, em que tais parâmetros podem ser obtidos empiricamente. Assim, a população da cidade fica

$$P(t) = P_u(t) + P_s(t)$$

É possível a população suburbana atingir 20% mais do que a urbana, com os valores:  $k_u = 0.045$ ,  $k_s = 0.08$ ,  $P_{uMax} = 10\,000$ ,  $P_{uMin} = 7\,500$ ,  $P_{s0} = 15\,000$  para este modelo?

Calcule o tempo e o valor correspondente quando a região suburbana for 20% mais populosa do que a urbana, se os valores dos parâmetros forem:  $k_u = 0.045$ ,  $k_s = 0.08$ ,  $P_{uMax} = 8\,500$ ,  $P_{uMin} = 1\,000$ ,  $P_{s0} = 5\,000$ .

3. **População de um município:** Considere a função população  $p(t)$  de um município num instante  $t$  contados a partir de hoje representada pela função  $p(t) = 15\,000 \left(\frac{3}{2}\right)^{c+t}$  em que  $c$  é uma constante real. Sabendo que a população atual do município  $p(0) = 10\,000$  qual deve ser o valor da constante  $c$ ? Qual será a população daqui a 3 anos? E daqui a 5 anos?
4. **Energia:** O crescimento exponencial é um caso de aumento de uma quantidade que pode ser aplicado em vários problemas ambientais como os energéticos, econômicos, populacionais etc. No final do século XX o crescimento da geração de eletricidade no Brasil foi cerca de 4% ao ano. Sabendo-se que no ano de 2000 foi de 349 terawatts-hora ( $1\text{ TWh} = 10^{12}\text{ Wh}$ ) e, se continuar crescendo com esta mesma taxa, quanto deverá atingir no ano de 2012?
5. **Mapa conceitual:** Elabore um mapa conceitual do que entendeste sobre a modelagem matemática ambiental. Em seguida, elabore um mapa conceitual sobre os principais problemas ambientais específicos da sua cidade (região, estado, país ou do mundo).

# UNIDADE 2

Matemática Básica para Problemas Ambientais



## 2.1 Introdução

Nesta unidade abordaremos fundamentos da matemática para a resolução de problemas ambientais utilizando métodos de interpolação e ajuste de funções (funções afim, quadrática, cúbica etc.), solução de equações, equações diofânticas e suas soluções.

Na elaboração do modelo matemático de um problema ambiental, como citado anteriormente, é de grande importância a observação e o entendimento do mesmo para seleção, coleta e tratamento dos dados, bem como ensaios experimentais quando possíveis.

Na coleta de dados de um problema, as quantidades que influenciam nos resultados de um modelo são as variáveis, os parâmetros e as constantes envolvidas bem como as relações matemáticas.

As constantes são quantidades fixas e, portanto, estas possuem o mesmo valor durante o processo dinâmico. Os parâmetros são medidas ou valores auxiliares que podem ser fixos ou alterados durante o processo. As variáveis discretas ou contínuas são quantidades a serem determinadas.

As taxas de variações que geralmente aparecem num modelo ambiental representam as taxas de decaimento ou de crescimento de uma quantidade considerada, como por exemplo, população, recursos naturais, poluentes etc. além da velocidade, aceleração, crescimento relativo etc.

Com a observação, o entendimento, o levantamento e a interpretação dos dados de um problema, partimos para a abstração considerando as principais variáveis, parâmetros e constantes para a formulação de hipóteses razoáveis para elaboração do modelo matemático. Posteriormente com a escolha de métodos analíticos ou numéricos para a resolução matemática do problema e após a determinação da sua solução, a verificação da validade dos resultados e a aplicabilidade do mesmo.

## 2.2 Sequências em problemas ambientais

Na fase inicial da modelagem matemática de um problema devemos ter uma familiaridade com o mesmo e, geralmente, obtemos um conjunto de dados ou medidas  $x_n$ ,  $n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$  que é uma sequência de valores reais:

$$x_1, x_2, \dots, x_n, \quad n \in \mathbb{N}.$$



em que  $\mathbb{N}$  representa o conjunto dos números naturais.

Uma **sequência** real é uma função

$$x : M \subset \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R},$$

cujo domínio é um subconjunto  $M$  do conjunto dos números naturais  $\mathbb{N}$ , que a cada número natural  $n$  associa um número real  $x(n) = x_n$ , que geralmente é representada por  $\{x_n\}$ ,  $n \in \mathbb{N}$ .

Se  $M = \mathbb{N}$  temos uma sequência infinita, como por exemplo, o próprio conjunto dos números naturais  $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$  é uma sequência infinita.

Podemos por exemplo, considerar o conjunto das temperaturas médias absolutas  $T(^{\circ}\text{K})$  da superfície terrestre, ou ainda de uma cidade ou região nos últimos anos, que é uma função positiva, que relaciona os valores das temperatura  $T_n$  e os instantes de tempo  $t_n$ ,  $n \in \mathbb{N}$  em que são feitas as medidas, ou seja,  $T : M \rightarrow \mathbb{R}$  com  $T(n) = T_n$  em que,  $T_n$  é a temperatura média absoluta no período  $n$  (horas, dias, semanas, meses, anos etc.)

Mostraremos posteriormente os dados obtidos que relacionam a temperatura absoluta média  $T_n$  e o tempo  $t_n$ , podem ser tabelados e representados por uma função que melhor se ajusta aos dados da tabela.

Destacaremos que nem sempre é possível obter uma boa expressão analítica para representar uma sequência real gerada por dados observados ou medidos de um fenômeno real.

### Convergência de uma sequência

A **convergência** de uma sequência é uma das características importantes para elaboração de modelos matemáticos de fenômenos estáveis.

Dizemos que uma sequência  $\{x_n\}$  **converge** para um valor  $x^*$  se dado um número  $\varepsilon > 0$  e arbitrariamente pequeno, existe um número natural  $n_0$ , tal que para todo  $n > n_0$  implica que  $|x_n - x^*| < \varepsilon$ .

Neste caso, escrevemos:

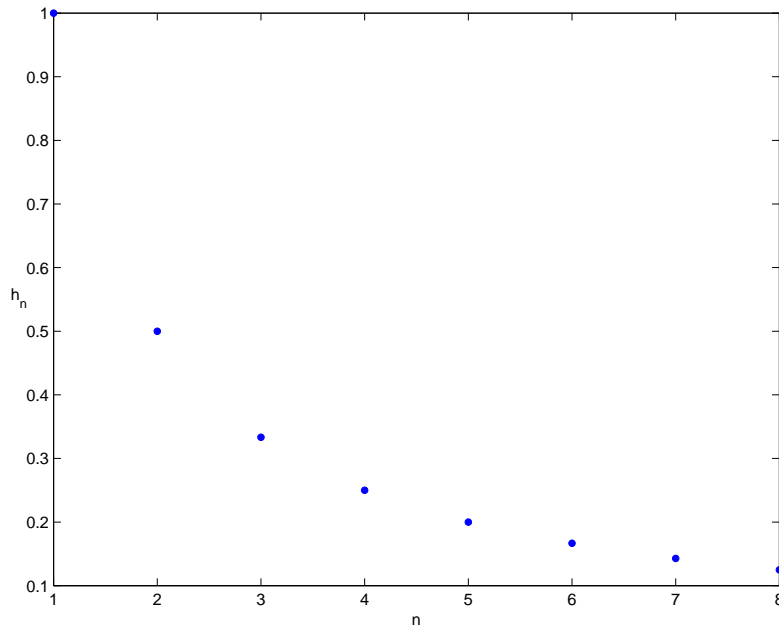
$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*$$

indicando que o limite de  $x_n$  quando  $n$  tende ao infinito é igual a  $x^*$ .

#### Exemplo 2.1

É fácil verificar que a sequência harmônica de números reais definida por  $h_n = \{\frac{1}{n}\}$ , com  $n = 1, 2, 3, \dots$  converge para o número zero, pois a medida em

que  $n$  cresce, ou seja, quando  $n$  vai tendendo ao infinito, a razão  $\frac{1}{n}$  tende ao número zero, conforme Figura 2.1.



**Figura 2.1:** Sequência harmônica

Observamos que o **gráfico** de uma sequência  $\{x_n\}$  é um conjunto discreto de pontos num sistema cartesiano  $n \times x_n$ ,  $n \in \mathbb{N}$ .

Na representação gráfica da sequência harmônica observe que ela converge para  $h^* = 0$ . De fato, dado um  $\varepsilon = 0.001$ , existe  $n_0 \in \mathbb{N}$  tal que  $|\frac{1}{n} - 0| < 0.001$ , ou seja  $\frac{1}{n} \leq 0.001 \Leftrightarrow n > 1\,000$ . Assim,  $|\frac{1}{n} - 0| < 0.001$ , para todo  $n > n_0 = 1\,000$ .

É fácil ver que a partir do milésimo termo os valores da sequência  $\{h_n\}$  estão mais próximos de zero do que  $\varepsilon = 0.001$ , logo ela converge para zero.

Quando trabalhamos com uma sequência infinita  $\{x_n\}$  nem sempre se pode obter uma expressão analítica para  $\{x_n\}$  como a sequência harmônica  $h_n = \frac{1}{n}$ . Entretanto, às vezes não temos como calcular o  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n$  mas, algumas propriedades de uma sequência de dados reais podem nos garantir a sua convergência.

Uma sequência real  $\{x_n\}$  é chamada de **monótona** se esta é não crescente ou não decrescente.

Observamos que a sequência harmônica é monótona não crescente.

Uma sequência real  $\{x_n\}$  é **limitada** se existe um número real  $L > 0$  tal que  $|x_n| < L$  para todo  $n \in \mathbb{N}$ .

Toda sequência real  $x_n$  monótona e limitada é convergente (THOMAS, 2001)

Observamos que  $h_n = \{\frac{1}{n}\}$  é uma sequência limitada, monótona decrescente e convergente para 0, enquanto que a sequência  $a_n = \{\frac{17}{1 + e^{-n}}\}$ , que descreve a altura da árvore baraúna em metros com o tempo é limitada, monótona crescente e convergente para o número 17, que é o limite de sua altura em metros.

Assim, uma sequência pode ser limitada por imposição do fenômeno observado. Por exemplo, as sequências das alturas  $\{a_n\}$  e dos diâmetros médios  $\{d_n\}$  das árvores de uma floresta, ou de um reflorestamento com o tempo  $n$  considerado em anos, décadas, séculos ou milênios são não decrescentes.

Estas sequências são crescentes e limitadas, e portanto, podemos supor que são convergentes para o valor da altura máxima e do diâmetro máximo da espécie de árvore considerada.

### Exemplo 2.2

O limite máximo da altura de uma árvore pode ser considerado igual ao da altura da árvore mais alta da sua família ou da mais alta do mundo conhecida como Hyperion, de 115 m, e o diâmetro da árvore mais larga como o da General Sherman de 11.1 m no Parque das Sequóias localizado no norte da Califórnia nos Estados Unidos da América.

No Brasil temos, entre outras, o pinheiro (*Araucária Angustifolia*) com cerca de 47 m de altura e 7.5 m de diâmetro no município de Nova Petrópolis no estado do Rio Grande do Sul. E será que existem árvores maiores do que a Denisia Excelsa que chega a 60 m na floresta amazônica? E na sua região qual é a maior árvore?

Geralmente os dados reais de um fenômeno ambiental são obtidos em intervalos espaçados, outras vezes eles são observados continuamente no tempo  $t$ ,  $t \in \mathbb{R}$ . Neste caso, uma variável  $x$ , depende do tempo  $t$  em que  $x = x(t)$  é uma função real.

Por exemplo,  $x(t)$  pode representar a temperatura absoluta de um local num intervalo de tempo  $[t_0, t_1]$ .

## 2.3 Funções e taxas de variação em problemas ambientais

Muitas funções conhecidas, como as funções linear, afim, quadrática, exponencial, logaritmica, trigonométrica, racional, convexa etc., são comumente utilizadas na resolução de problemas ambientais.

Podemos utilizá-las na exploração de fenômenos naturais representando intensidade de terremotos, intensidade luminosa, comportamento de populações, evolução de recursos ambientais e fenômenos periódicos conforme exemplos que seguem:

### Exemplo 2.3

A intensidade  $I = I(E)$  de um terremoto na escala Richter com pontuação de 0 a 8.9 é uma função da energia liberada  $E$  e, é dada pela função logarítmica:

$$I(E) = \frac{2}{3} \log\left(\frac{E}{E_0}\right) \quad (2.1)$$

em que a constante  $E_0 = 7 \times 10^{-3}$  Kwh.

### Exemplo 2.4

A queima de combustíveis fósseis é uma das ações que libera o poluente  $SO_2$  (dióxido sulfídrico ou anidrido sulfuroso) que é um gás tóxico denso, incolor, não inflamável e irritante. Ele provoca a mortandade de peixes quando lançado num rio. Desejamos determinar uma função afim do tipo:

$$p(q) = a_1 q + a_0$$

que representa o número de peixes  $p$  de um compartimento de um rio que morre num período em função da quantidade  $q$ , ( $\mu g/m^3$ ) de  $SO_2$  lançada no rio. Sabendo-se que  $p(250) = 85$  e  $p(320) = 92$ . Qual deve ser a quantidade máxima de  $SO_2$  tolerável de modo que a mortandade de peixes no compartimento do rio não ultrapasse 100 peixes no período considerado, uma vez que tal valor prejudicaria seriamente a reprodução de peixes.

Para resolver o problema devemos encontrar os coeficientes reais  $a_0$  e  $a_1$  da função afim  $p(q)$  da variável  $q$  e o valor da quantidade  $q$  ( $\mu g/m^3$ ) de  $SO_2$  tal que

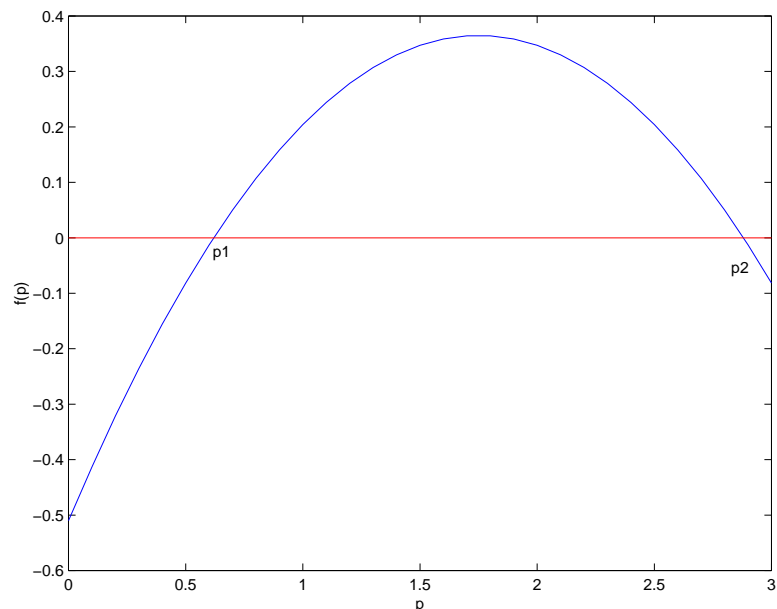
$$p(q) \leq 100 \Leftrightarrow a_1 q + a_0 \leq 100.$$

Considerando os valores de  $p$  e  $q$  dados e resolvendo o sistema de equações lineares:

$$\begin{cases} a_1 250 + a_0 = 85 \\ a_1 320 + a_0 = 92 \end{cases}$$

obtemos os valores dos coeficientes  $a_1 = 0.1$  e  $a_0 = 60$ .

A função obtida é  $p(q) = 0.1q + 60$  e a quantidade máxima de  $SO_2$  para que a mortandade não ultrapasse 100 peixes é  $400 \mu g/m^3$ , ou seja,  $p(400) = 100$ .



**Figura 2.2:**  $f(p)$  côncava

Utilizaremos ainda os conceitos de conjunto convexo, funções côncavas e convexas definidas num conjunto convexo na exploração de problemas de evolução populacional, de programação linear etc.

Uma função  $f : S \subset V \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , é **convexa** em um conjunto convexo  $S$  se, para todos pontos  $x, y \in S$ , vale a desigualdade

$$f((1 - \alpha)x + \alpha y) \leq (1 - \alpha)f(x) + \alpha f(y)$$

para todo  $\alpha \in [0, 1]$ .

Caso contrário, se  $f((1 - \alpha)x + \alpha y) \geq (1 - \alpha)f(x) + \alpha f(y)$  para todo  $\alpha \in [0, 1]$  e  $x, y \in S$  a função é chamada de função **côncava**, conforme Figura 2.2.

Dizemos que um subconjunto  $S$  de  $\mathbb{R}^n$  é **convexo** se o segmento  $[x, y] \subset S$ , para todo  $x$  e  $y$  pertence a  $S$ .

Na Figura 2.3 observamos no plano  $\mathbb{R}^2$  o segmento  $[X, Y]$  contido num conjunto convexo e  $[X_1, Y_1]$  que não está inteiramente contido num conjunto não convexo.

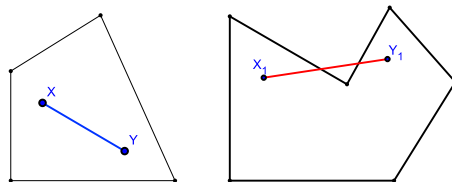
#### **Exemplo 2.5:**

Visualização de conjuntos convexo e não convexo no plano.

Sejam  $x$  e  $y$  pontos de  $\mathbb{R}^n$ . Dizemos que o conjunto

$$[x, y] = \{z \in \mathbb{R}^n, \text{ tal que } z = (1 - \alpha)x + \alpha y, 0 \leq \alpha \leq 1\}$$

é o **segmento de reta** que liga os pontos  $x$  e  $y$ .



**Figura 2.3:** Conjuntos convexo e não convexo

De um modo geral, dizemos que um subconjunto  $S$  de um espaço vetorial  $V$  (POOLE, 2004) é **convexo** se para quaisquer pontos  $x$  e  $y$  de  $S$ ,  $(1 - \alpha)x + \alpha y$  com  $0 < \alpha < 1$  está inteiramente contido em  $S$ , ou seja, o segmento  $[x y] \subset S$ .

Podemos também utilizar a resolução de equações algébricas de duas variáveis em problemas ambientais como segue no Exemplo 2.6.

### Exemplo 2.6

Uma associação ambientalista de uma cidade possui um limite máximo de 100 sócios. Eles pagam uma taxa anual de R\$120,00 reduzida a R\$100,00 para cada membro sênior com mais de 70 anos. Num ano o total de taxas pagas pelos membros com idade menor do que 70 anos ultrapassou em R\$9 000,00 o valor pago pelos membros seniores. Quantos associados tinha tal associação ambientalista naquele ano?

Este problema nos leva a explorar as soluções de uma **equação diofantina** que é do tipo  $ax + by + c = 0$  em que  $a$ ,  $b$  e  $c$  são números reais.

Para equacioná-lo consideramos as seguintes variáveis:

$x$ : o número de membros ordinários da associação e

$y$ : o número de membros seniores.

Temos que,  $120x$  é a contribuição dos membros ordinários e  $100y$  é a contribuição dos membros seniores da associação.

E assim, a equação correspondente ao problema torna-se:

$$120x - 100y = 9\,000$$

cuja solução nos fornece os números de sócios  $x$  e  $y$ .

Simplificando a equação anterior obtemos:

$$6x - 5y = 450 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{x}{5} + \frac{y}{6} = 15 \quad (2.2)$$

Observamos que uma **equação diofantina**  $ax + by + c = 0$  com  $a$ ,  $b$  e  $c$  reais possui soluções inteiras quando  $c$  é um múltiplo do máximo divisor comum

entre os coeficientes  $a$  e  $b$ , ou seja;

$$c = k \cdot \text{mdc}(a, b), \quad k \in \mathbb{N}.$$

Desta forma, vemos que  $450 = k \cdot \text{mdc}(6, 5)$  com  $k = 15$ , logo equação (2.2) possui soluções inteiras.

Resolvendo-a para a variável  $y$ , já que seu coeficiente é menor, obtemos

$$y = \frac{6x - 450}{5}$$

Segue que,  $6x - 450 > 0$ , ou seja,  $x > 75$  e, como  $x$  deve ser divisível por 5, obtemos as seguintes soluções inteiras:

- $x_1 = 80$ ,  $y_1 = 6$  com  $x_1 + y_1 = 86$
- $x_2 = 85$ ,  $y_2 = 12$  com  $x_2 + y_2 = 97$

Para que a soma dos membros da associação seja no máximo 100 podemos ter a primeira solução de (2.2),  $x_1 + y_1 = 86$  com  $x_1 = 80$  associados ordinários e  $y_1 = 6$  seniores, ou uma segunda solução  $x_2 + y_2 = 97$  com  $x_2 = 85$  associados ordinários e  $y_2 = 12$  seniores.

É importante observar que temos outras soluções inteiras da equação (2.2), mas que não satisfazem as restrições do problema.

Muitos problemas ambientais nos levam a uma equação ou sistemas de equações cuja solução analítica é difícil de ser encontrada ou mesmo que não possuem soluções analíticas, neste caso se faz necessário de métodos numéricos de resolução apropriados, como por exemplo o método de Newton (ARENALES & SALVADOR, 2009)

### **Taxas de variação**

Na maioria dos problemas é muito importante observarmos a variação das quantidades envolvidas.

Consideremos a variação simples de uma quantidade ambiental como a de poluentes lançados numa lagoa. Sejam  $t_i$  e  $t_{i+1}$  dois instantes de tempo distintos. Seja  $p_i$  a quantidade de poluente medida no instante  $t_i$  e,  $p_{i+1}$  a quantidade de poluentes no instante  $t_{i+1}$ , obtemos a diferença:

$$\Delta p = p_{i+1} - p_i \quad (2.3)$$

que é a **variação total** da quantidade de poluentes no intervalo de tempo de  $t_i$  a  $t_{i+1}$ .

Concluimos que, se  $\Delta p > 0$  então a quantidade de poluentes aumentou, se  $\Delta p < 0$  a quantidade de poluentes diminuiu e, se  $\Delta p = 0$  a quantidade de poluentes permaneceu constante naquele intervalo de tempo  $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ .

Considerando uma quantidade representada por uma função conhecida como afim,  $y = ax + b$  da variável real independente  $x$  com os parâmetros  $a \neq 0$  e  $b$  no conjunto dos números reais. A **variação simples** de  $y$  no intervalo  $[x_1, x_2] \subset \mathbb{R}$  dada por

$$\Delta y = a (x_2 - x_1),$$

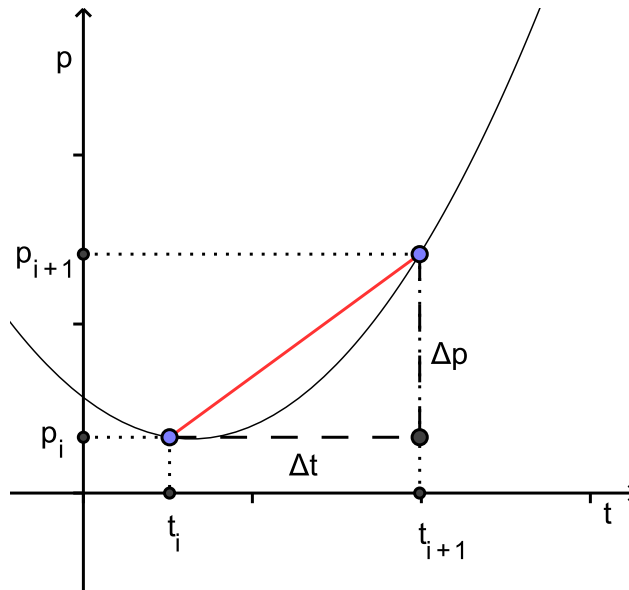
ou seja, a variação de  $y$  é proporcional a variação de  $x$

$$\Delta y = a \Delta x.$$

Podemos ainda, analisar a **velocidade média** ou taxa de **variação média** com que uma quantidade de poluentes  $p(t)$  varia por unidade de tempo dada por

$$\frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{p_{i+1} - p_i}{t_{i+1} - t_i}. \quad (2.4)$$

Esta é obtida quando consideramos a razão entre as diferenças das medidas de  $p$ ,  $\Delta p = p_{i+1} - p_i$  e o intervalo de tempo  $\Delta t = t_{i+1} - t_i$  transcorrido de  $t_i$  a  $t_{i+1}$ .



**Figura 2.4:** Taxa variação

Geometricamente, a velocidade média é a taxa de variação média por unidade de tempo, ou seja, representa o coeficiente angular  $\alpha$  ou a inclinação da reta que liga os pontos  $(t_i, p_i)$  a  $(t_{i+1}, p_{i+1})$  do gráfico de  $p(t)$ , conforme a Figura 2.4.



Para uma função afim  $y = ax + b$  a taxa de variação média é constante igual ao coeficiente angular  $a$ .

Para uma quantidade representada pela função quadrática na variável  $t$ ,  $y = at^2 + bt + c$ , com  $a$ ,  $b$  e  $c$  reais, a **taxa de variação média** igual a

$$\frac{\Delta y}{\Delta t} = a(t_{i+1} - t_i) + b.$$

Às vezes, utilizamos a **variação relativa** de uma quantidade  $p(t)$  que é a variação relativa à quantidade que iniciou tal variação,  $p_i$ :

$$\frac{1}{p_i} \frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{1}{p_i} \frac{p_{i+1} - p_i}{t_{i+1} - t_i},$$

ou seja, é a variação de  $p$  por unidade de tempo  $t$  relativa a quantidade inicial  $p_i$ .

As variações simples, média e relativa são satisfatórias em modelos discretos, mas em algumas situações é conveniente obter a variação instantânea de uma quantidade em um ponto.

Este procedimento possibilita simulações de modelos contínuos quando consideramos hipóteses adicionais aos dados obtidos. Neste caso, a variação instantânea de uma função contínua  $p = p(t)$  num ponto  $t_0$  é dada pela sua derivada

$$\frac{dp}{dt}(t_0) = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{p(t) - p(t_0)}{t - t_0}.$$

A velocidade instantânea  $v(t)$  é um exemplo de derivadas da função  $s(t)$  do espaço percorrido por algo que se desloca de um ponto a outro.

No caso do movimento uniformemente acelerado  $s(t) = s_0 + v_0 t + \frac{a}{2} t^2$ , em que  $s_0$ ,  $v_0$  e  $a$  são constantes, a velocidade é dada por  $v(t) = s'(t) = v_0 + at$  e a segunda derivada de  $s(t)$ ,  $s''(t) = a$  representa a aceleração constante do movimento.

Geralmente ajustamos ao conjunto de dados discretos por uma função contínua conforme seções de 2.4 a 2.8 e, assim é possível obtermos a taxa de variação instantânea da função.

Geometricamente a taxa de variação instantânea  $\frac{dp(t_0)}{dt}$  ou  $p'(t_0)$  representa a inclinação da reta tangente ao gráfico de  $p(t)$  no ponto  $t_0$  conforme (THOMAS, 2001).

Para uma quantidade ambiental expressa como uma função exponencial do tempo,  $p(t) = a e^{bt}$ , com  $a$  e  $b$  constantes reais não nulas, a taxa de variação instantânea de  $p$  num instante  $t$  é igual a sua derivada,  $p'(t) = a b e^{bt}$ .

Nos casos em que uma variável  $y$  é proporcional a uma potência de outra variável independente  $x$ , como:

$$y = b x^a$$

com  $a$  e  $b$  constantes reais, relação esta, conhecida como **alometria** nos modelos biológicos, a taxa de variação instantânea  $\frac{dy}{dx} = a b x^{a-1}$ .

Numa relação de alometria, se  $x$  e  $y$  são funções de  $t$ ,  $y = y(t)$  e  $x = x(t)$  a taxa de variação relativa de  $y$  é proporcional a taxa de variação relativa de  $x$ , ou seja:

$$\frac{1}{y(t)} \frac{dy(t)}{dt} = a \frac{1}{x(t)} \frac{dx(t)}{dt}$$

Esta relação ocorre, por exemplo, entre o peso e a área da superfície do corpo de um animal.

Acontece que em muitos problemas uma variável  $f$  pode depender de várias variáveis independentes, como por exemplo, no caso do estudo da deformação de uma barra cilíndrica, a flexão  $h$  sofrida pode ser expressa como uma função do raio  $R$ , do comprimento  $L$ , da força aplicada  $F$  e do módulo de Young  $E$ :

$$h(R, L, F, E) = \frac{1}{12\pi} R^\alpha L^\beta F^\mu E^\nu$$

com os parâmetros  $\alpha, \beta, \mu, \nu \in \mathbb{Z}$  e, que podem ser determinados experimentalmente.

Neste caso temos as taxas de variações parciais com relação a cada uma das variáveis independentes:

$$\frac{\partial h(R, L, F, E)}{\partial R} = \frac{1}{12\pi} \alpha R^{\alpha-1} L^\beta F^\mu E^\nu \quad \text{e} \quad \frac{\partial h(R, L, F, E)}{\partial L} = \frac{1}{12\pi} \beta R^\alpha L^{\beta-1} F^\mu E^\nu.$$

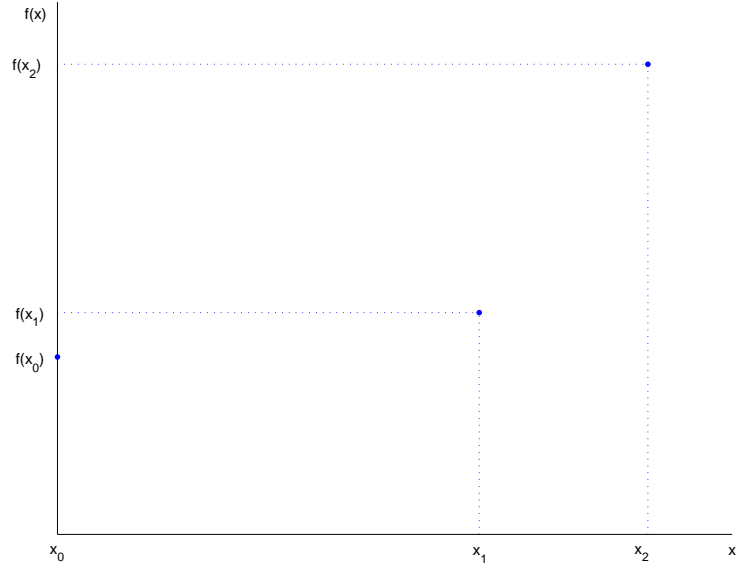
Na análise de um conjunto de dados observados ou de um determinado experimento, nem sempre obtemos uma relação conhecida entre as variáveis.

A partir de uma tabela de dados, elaboramos um gráfico e apesar deste nos dar uma idéia do comportamento do fenômeno, muitas vezes, necessitamos de trabalhar com uma função contínua no lugar de um conjunto de dados discretos, de modo que eles devem ser interpolados ou ajustados por uma função contínua conforme ARENALES & SALVADOR (2009).

Neste caso, utilizamos métodos de interpolação para obter valores de uma função entre os valores dados e, o método dos mínimos quadrados para ajuste de uma função visando estimar valores da função no intervalo dos dados ou para fazer previsões fora do intervalo considerado ou observado.

## 2.4 Interpolação polinomial

Consideremos uma função  $f(x)$  definida em  $n + 1$  pontos distintos de um intervalo  $[a, b]$  e, denotamos por  $f(x_i) = y_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$  os valores de  $f$  nos pontos dados, conforme representação na Figura 2.5 a seguir.



**Figura 2.5:** Conjunto de dados

Desejamos aproximar a função  $f(x)$  definida em  $n + 1$  pontos distintos do intervalo  $[a, b]$ , por um polinômio  $p(x)$  de grau menor ou igual  $n$ , que coincida com a própria função nestes pontos, isto é,  $p(x_i) = f(x_i) = y_i$  com  $i = 0, 1, 2, \dots, n$ .

Podemos afirmar que dado uma função  $f(x)$  definida em  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$   $n + 1$  pontos distintos de um intervalo  $[a, b]$ , existe um único polinômio  $p(x)$  de grau menor ou igual a  $n$ , tal que:

$$p(x_i) = f(x_i)$$

com  $i = 0, 1, \dots, n$ . Este fato pode ser provado considerando um polinômio de grau  $n$ ,  $p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_0$  com  $a_i \in \mathbb{R}$  para  $i = 0, 1, \dots, n$ .

Desta forma, para que o polinômio  $p(x)$  coincida com a função  $f(x)$  nos  $n + 1$  pontos dados, temos um sistema de equações lineares, nas incógnitas  $a_0, a_1, \dots, a_n$  da seguinte forma:

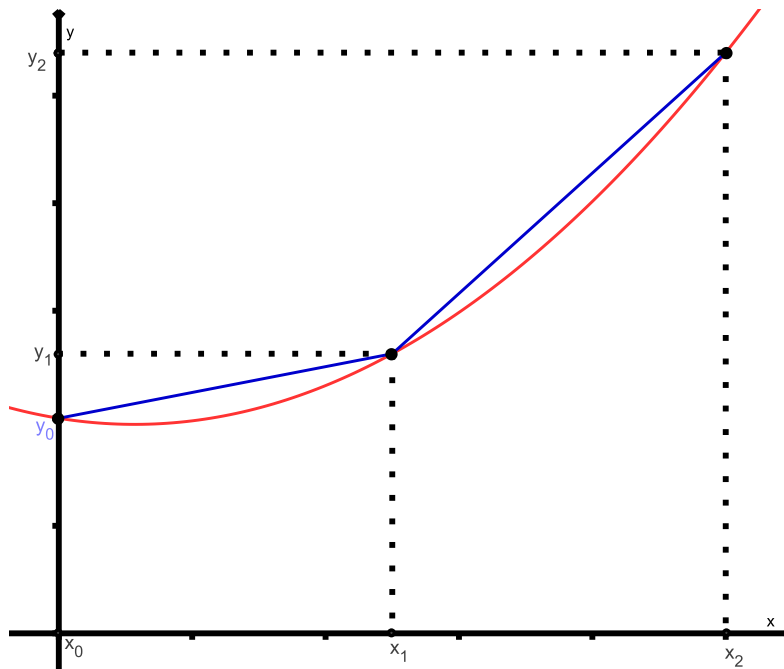
$$\begin{cases} a_n x_0^n + a_{n-1} x_0^{n-1} + \dots + a_1 x_0 + a_0 = y_0 \\ a_n x_1^n + a_{n-1} x_1^{n-1} + \dots + a_1 x_1 + a_0 = y_1 \\ \vdots \\ a_n x_n^n + a_{n-1} x_n^{n-1} + \dots + a_1 x_n + a_0 = y_n \end{cases} \quad (2.5)$$

o qual deve ser satisfeito para  $\alpha_i, i = 0, 1, 2, \dots, n$ , conforme ARENALES & SALVADOR (2009)

Embora a resolução deste sistema de equações lineares forneça os coeficientes do polinômio interpolador, este pode ser obtido de outros modos, como por exemplo, utilizando a Fórmula de Lagrange, Fórmula de Newton-Gregory etc., que embora distintas levam ao mesmo polinômio interpolador, já que este é único.

De fato, o determinante da matriz do sistema (2.5) é o determinante de Vandermonde que é diferente de zero.

Graficamente, exibimos os polinômios interpoladores linear e quadrático de uma função conforme Figura 2.6 conhecendo-se três pontos.



**Figura 2.6:** Polinômios interpoladores linear e quadrático

## 2.5 Polinômio interpolador de Lagrange

Considere os nós da interpolação  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$  como  $n + 1$  pontos distintos de uma partição do intervalo  $[a, b] \subset \mathbb{R}$  em que  $x_0 = a$  e  $x_n = b$  e, os respectivos valores da função  $f$  nestes pontos,  $f(x_i) = y_i, i = 0, 1, 2, \dots, n$ .

Consideremos o polinômio interpolador de Lagrange de grau 1 de  $f(x)$ , dado por:

$$p_1(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x)$$

em que, os polinômios  $L_i(x), i = 1, 2$  são ambos de grau 1.

Para cada valor de  $i$  exigimos que a condição  $p_i(x_i) = f(x_i) = y_i$  seja verificada para  $i = 1, 2$ .

Esta condição é satisfeita impondo que  $L_k(x_i) = \delta_{ki}$ , em que  $\delta_{ki}$ ,  $i, k \in \mathbb{N}$  é o **delta de Kronecker** definido por:

$$\delta_{ki} = \begin{cases} 1, & \text{se } k = i \\ 0, & \text{se } k \neq i \end{cases}$$

Para isso, basta definirmos os polinômios

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0},$$

em que,  $L_k(x)$  é um polinômio de grau 1 para  $k = 0, 1$  e satisfaz a propriedade  $L_k(x_i) = \delta_{ki}$ , ou seja,  $L_0(x_0) = 1$ ,  $L_0(x_1) = 0$ ,  $L_1(x_0) = 0$  e  $L_1(x_1) = 1$ .

Assim, o polinômio interpolador de Lagrange linear pode ser escrito como:

$$p_1(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

satisfazendo  $p_1(x_i) = y_i$ ,  $i = 0, 1$ .

Generalizando este procedimento, para os  $n+1$  pontos distintos de um intervalo  $[a, b]$ ,  $x_0, x_1, \dots, x_n$  dados, em que,  $x_0 = a$  e  $x_n = b$  e os respectivos valores da função  $f$  nestes pontos  $x_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, n$  conhecidos, podemos obter um polinômio interpolador de Lagrange de grau menor ou igual a  $n$ , o qual coincide com a função nestes pontos, isto é,

$$p_n(x_i) = f(x_i) = y_i$$

com  $i = 0, 1, 2, \dots, n$  dado por:

$$p_n(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + \dots + y_n L_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i(x)$$

em que, os polinômios  $L_i(x)$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, n$  são de graus menores ou igual a  $n$ .

Assim, definimos

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_n)}$$

em que, o numerador desta expressão é o produto de  $n$  fatores do tipo  $x - x_i$ , com  $i = 0, 1, 2, \dots, k-1, k+1, \dots, n$ , satisfazendo a propriedade  $L_k(x_i) = \delta_{ki}$ .

Assim, o polinômio interpolador de Lagrange de grau  $n$ , é dado por:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n y_k L_k(x)$$

com  $L_k(x)$  dado por um produto

$$L_k(x) = \prod_{j \neq k} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$$

com  $j, k = 0, 1, 2, \dots, n$ .

### Exemplo 2.7

Considere a Tabela 2.1 a seguir que representa os valores de uma função  $f(x)$  correspondente a altura do nível d'água (metros) numa seção transversal do rio num instante  $x$  (horas) durante uma chuva torrencial.

$x_i$ (h)	0	0.5	1
$y_i = f(x_i)$ (m)	1	1.3	2.7

**Tabela 2.1** Nível d'água do rio

Determine o polinômio interpolador de Lagrange da função  $f(x)$  nos instantes  $x = 0$ ,  $x = 0.25$  e  $x = 0.75$ .

O polinômio interpolador para o conjunto de três pontos dados de acordo com a Tabela 2.1 é um polinômio de grau menor ou igual a 2. Considerando o polinômio de grau 2:

$$p_2(x) = \sum_{k=0}^2 y_k L_k(x)$$

com

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 0.5)(x - 1)}{(0 - 0.5)(0 - 1)} = 2(x - 0.5)(x - 1)$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x - 0)(x - 1)}{(0.5 - 0)(0.5 - 1)} = -4x(x - 1)$$

e,

$$L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x - 0)(x - 0.5)}{(1 - 0)(1 - 0.5)} = 2x(x - 0.5)$$

Obtemos,

$$p_2(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + y_2 L_2(x)$$

$$p_2(x) = 2(x - 0.5)(x - 1) - 5.2x(x - 1) + 5.4x(x - 0.5) = 2.2x^2 - 0.5x + 1$$

Observemos que em cada um dos pontos  $x_i$ ,  $i = 0, 1, 2$  o polinômio interpolador satisfaz  $p_i(x_i) = f(x_i) = y_i$ ,  $i = 0, 1, 2$ .

Num ponto entre os pontos dados, podemos encontrar o valor aproximado de  $f(x)$  usando o polinômio interpolador de grau 2,  $p_2(x)$  como segue:

- para  $x_0 = 0$  (h) temos a altura do nível d'água normal do rio igual a 1 m.

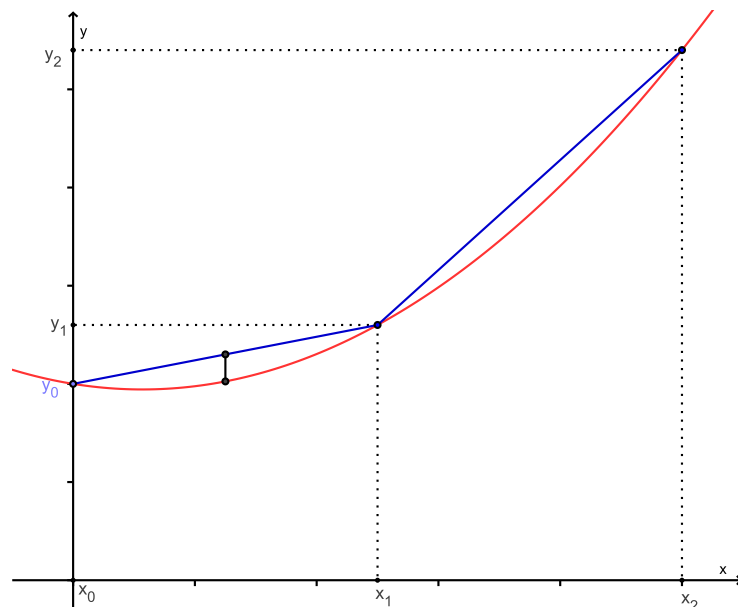
- para  $x = 0.25$  (h), ou seja, um quarto de hora depois de iniciada a chuva, obtemos o valor aproximado  $f(0.25) \approx p_2(0.25) = 1.0125$  (m), em que  $\approx$  significa aproximado;
- para  $x = 0.75$  (h) o polinômio interpolador de grau 2 nos dá o valor aproximado  $f(0.75) \approx p_2(0.75) = 1.8625$  (m).

### 2.5.1 Erro cometido

Sabemos que toda medida experimental apresenta uma incerteza de modo que a solução do problema é influenciada por este tipo inicial de erro. Além disso, a propagação dos erros determina sensibilidade de um problema ao método numérico. Se uma pequena variação dos dados iniciais de entrada leva a uma grande variação no resultado final dizemos que o problema é mal condicionado.

No caso dos métodos de interpolação, o polinômio interpolador  $p(x)$  coincide com a função nos pontos  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ , além disso, gostaríamos que ele nos desse uma boa aproximação para um ponto qualquer  $\bar{x} \in [a, b]$ , ou seja, que  $p(\bar{x}) \approx f(\bar{x})$ . Desta forma cometemos um erro dado por:

$$E(\bar{x}) = p(\bar{x}) - f(\bar{x})$$



**Figura 2.7:** Erro de interpolação

Não podemos calcular o  $E(\bar{x})$  pois desconhecemos  $f(\bar{x})$ , entretanto podemos

estimá-lo usando um limitante superior para o erro num ponto  $x$  dado por:

$$E(x) = \frac{\psi(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \leq \frac{\psi(x)}{(n+1)!} M$$

em que,

$$\psi(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

com  $\xi \in [x_0, x_n]$  e,

$$M = \max\{|f^{(n+1)}(x)|, x \in [x_0, x_n]\}$$

conforme ARENALES & SALVADOR, (2009).

Além disso, somente calculamos uma estimativa para o erro quando tivermos a expressão analítica da função  $f(x)$ , pois de acordo com a fórmula do limitante superior para o erro temos que conhecer a  $(n+1)$  - ésima derivada da função  $f(x)$ .

Na maioria dos problemas  $x$  e  $f(x)$  são as variáveis independentes e dependentes respectivamente, em que os valores de  $x$  dados são igualmente espaçados.

O problema de encontrar o valor correspondente  $x$  dado um valor de  $f(x)$  consiste num problema de **interpolação inversa**.

Neste caso, ficaríamos tentados a trocar  $x$  por  $f(x)$  na tabela e simplesmente interpolar. Infelizmente quando trocamos as variáveis, não há garantia de que os valores dados de  $f(x)$  sejam igualmente espaçados. Tal espaçamento não uniforme da nova abscissa geralmente provoca oscilações mesmo para polinômios de graus menores. Isto nos leva a interpolar os dados originais  $(x, f(x))$ , e o problema de encontrar um valor de  $x$  correspondente a  $f(x)$  reduz a determinar a raiz do polinômio interpolador.

### Exemplo 2.8

Considere a Tabela 2.1 do exemplo 2.7 e encontre o instante depois de iniciado a chuva em que o nível d'água alcançou 2.008 m.

Neste caso, fazemos a interpolação e obtemos o polinômio interpolador  $p_2(x) = 2.2x^2 - 0.5x + 1$ . Em seguida, resolvemos numericamente a equação  $p_2(x) = 2.008$ , que nos dá o valor de  $x = 0.8$  h, equivalente a 48 minutos depois de iniciada a chuva.

Uma maneira mais adequada de evitar grandes oscilações, que é um dos problemas que ocorre com polinômios interpoladores de graus maiores, conhecidas como fenômeno de Runge, é considerarmos polinômios de graus menores. Outra alternativa seria utilizarmos os polinômios interpoladores definidos por par-



tes conhecidos como Splines Cúbicos que são suaves (CHAPRA & CANALE, 2008).

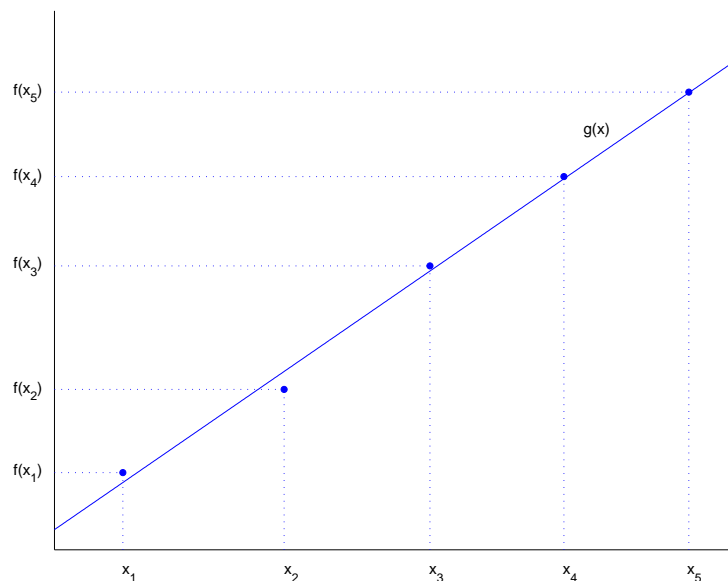
## 2.6 Método dos mínimos quadrados

Nesta seção apresentaremos o Método dos Mínimos Quadrados para ajuste de uma função  $f(x)$ . Conhecidos os valores de  $f(x)$  nos pontos  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ , tal método consiste em determinar uma função  $g(x)$  que melhor se aproxime de  $f(x)$  nestes dados de modo que a soma dos quadrados dos erros seja mínima.

### 2.6.1 Ajuste de dados por uma função linear

Ao obtermos um conjunto de dados de um problema descrevendo um fenômeno ambiental, fazemos um gráfico para verificar o comportamento do fenômeno e, na maioria das vezes é conveniente determinar uma função que melhor se ajuste a estes dados.

Suponhamos que num problema os dados se comportam graficamente muito próximos de uma reta como os exibidos na Figura 2.8:



**Figura 2.8:** Ajuste linear

Observando a distribuição dos  $m$  pontos  $(x_i, f(x_i))$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ , vemos que a disposição deles estão próximos de uma reta  $r$ , a qual poderia ser representada por um polinômio de grau 1:

$$g(x) = a_1 g_1(x) + a_0 g_0(x),$$

com  $g_1(x) = x$  e  $g_0(x) = 1$ .

Neste caso, dizemos que estamos fazendo um **ajuste linear** nos dados do problema.

O **Método dos Mínimos Quadrados** considera o mínimo da soma dos quadrados dos desvios ou erros em cada ponto, isto é,

$$\min \sum_{i=1}^m e(x_i)^2 = \min \sum_{i=1}^m (f(x_i) - g(x_i))^2$$

No caso do ajuste linear, em que  $g(x) = a_1x + a_0$ , temos que o erro:

$$E(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^m e(x_i)^2 = \sum_{i=1}^m (f(x_i) - a_1x_i - a_0)^2$$

é uma função dos parâmetros  $a_1$  e  $a_0$  a serem ajustados.

$$E(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^m (f(x_i)^2 - 2f(x_i)a_1x_i - 2f(x_i)a_0 + a_1^2x_i^2 + 2a_1x_ia_0 + a_0^2)$$

Para determinar uma função  $g(x) = a_1x + a_0$  que melhor se ajusta à função  $f(x)$ , devemos encontrar os parâmetros  $a_0$  e  $a_1$  exigindo que o erro  $E(a_0, a_1)$  seja mínimo.

Neste caso, as derivadas parciais da função  $E$ , com relação às variáveis independentes  $a_0$  e  $a_1$  devem ser nulas nesse ponto, isto é:

$$\frac{\partial E}{\partial a_0}(a_0, a_1) = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial E}{\partial a_1}(a_0, a_1) = 0.$$

Deste modo, os parâmetros  $a_0$  e  $a_1$  que minimizam a função erro devem satisfazer o seguinte sistema de equações lineares, chamado de **sistemas de equações normais**:

$$\begin{cases} \left( \sum_{i=1}^m 1 \right) a_0 + \sum_{i=1}^m x_i a_1 = \sum_{i=1}^m f(x_i) \\ \sum_{i=1}^m x_i a_0 + \sum_{i=1}^m x_i^2 a_1 = \sum_{i=1}^m x_i f(x_i) \end{cases} \quad (2.6)$$

o qual pode ser resolvido por qualquer método numérico para resolução de sistemas lineares conhecido.

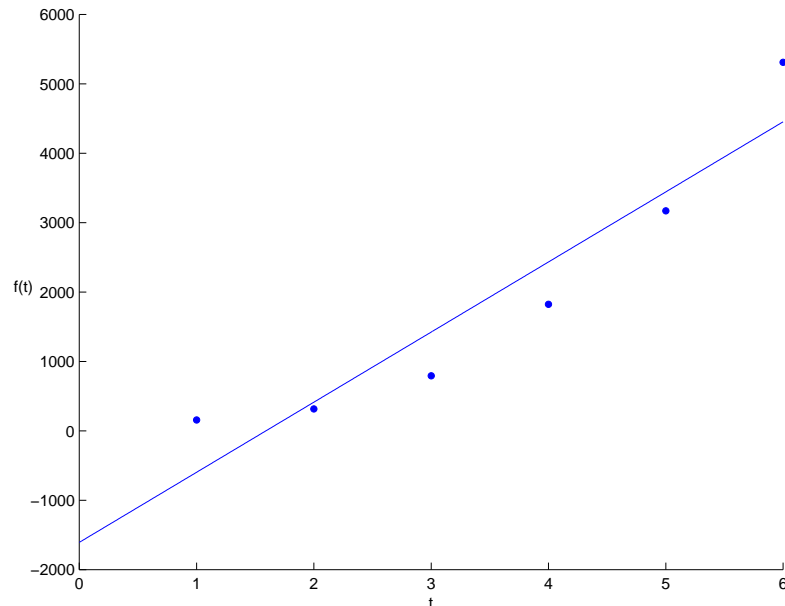
### Exemplo 2.9

Considere um conjunto de dados de um tipo de recurso natural  $f(t)$  nos instantes  $t_i$ ,  $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$  variando no tempo  $t$  conforme Tabela 2.2 a seguir.

**Tabela 2.2** Dados de recursos naturais

$t_i$	1	2	3	4	5	6
$f(t_i)$	158	317	793	1823	3170	5310

Inicialmente construímos um gráfico dos pontos no plano e a partir da disposição destes pontos podemos verificar se tal quantidade está crescendo, sendo decidir por um ajuste linear caso eles estejam próximos de uma reta.



**Figura 2.9:** Ajuste linear

Observando a Figura 2.9 determinaremos a função afim  $g(t) = a_1 t + a_0$ , que melhor se ajusta aos dados da Tabela 2.2 e obtemos o seguinte sistema de equações normais conforme (2.6):

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m t_i a_1 = \sum_{i=1}^m f(t_i) \\ \sum_{i=1}^m t_i a_0 + \sum_{i=1}^m t_i^2 a_1 = \sum_{i=1}^m t_i f(t_i) \end{cases}$$

Para resolvermos o sistema anterior passo a passo, utilizamos a tabela auxiliar 2.3 contendo os valores de  $t_i$ ,  $f(t_i)$ ,  $t_i^2$  e  $t_i f(t_i)$  e suas somas.

Assim, para determinar os parâmetros  $a_0$  e  $a_1$ , resolvemos o sistema:

$$\begin{cases} 6 a_0 + 21 a_1 = 11571 \\ 21 a_0 + 91 a_1 = 58173 \end{cases}$$

Utilizando o método de Gauss-Jordan obtemos os valores de  $a_1 = 1009.971$

e  $a_0 = -1606.4$  e, portanto a função linear:

$$g(t) = 1009.971 t - 1606.4$$

é a que melhor se ajusta aos dados do problema conforme a reta da Figura 2.9.

**Tabela 2.3** Tabela auxiliar para o sistema de equações normais

$t_i$	1	2	3	4	5	6	$\sum_{i=1}^6 t_i = 21$
$f(t_i)$	158	317	793	1823	3170	5310	$\sum_{i=1}^6 f(t_i) = 11571$
$t_i^2$	1	4	9	16	25	36	$\sum_{i=1}^6 t_i^2 = 91$
$t_i f(t_i)$	158	634	2379	7292	1580	31860	$\sum_{i=1}^6 t_i f(t_i) = 58173$

Embora fizemos o ajuste linear, observemos que em geral os dados de um problema nem sempre se comportam como uma reta. Verifique por exemplo que o erro no caso do Exemplo 2.9:

$$E = \sum_{i=1}^m e(x_i)^2 = \sum_{i=1}^m (1009.971 t_i - 2033.583864 - f(t_i))^2$$

é um valor considerado grande.

Assim, observamos que alguns dados nos levam a ajustar uma função  $f(x)$  por um polinômio de grau  $n \geq 2$ , isto é, um polinômio do tipo

$$g(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$$

com  $a_k \in \mathbb{R}$ ,  $k = 0, 1, 2, 3, \dots, n$ , ou mesmo, por outras funções como a exponencial, logarítmica, trigonométrica etc., de modo que o erro seja menor. Nesse caso, aplicamos o método dos mínimos quadrados escrevendo  $g(x)$  como uma combinação linear de funções mais gerais do tipo:

$$g(x) = a_n g_n(x) + a_{n-1} g_{n-1}(x) + \dots + a_1 g_1(x) + a_0 g_0(x)$$

em que as funções  $g_k(x)$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$  são escolhidas convenientemente.

Analogamente, ao caso ajuste linear podemos determinar os parâmetros  $a_k$ ,  $k = 0, 1, \dots, n$  de forma que  $\sum_{i=1}^m e_i(x_i)^2$  seja mínimo, ou seja, os parâmetros são tais que  $\frac{\partial E}{\partial a_k} = 0$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ , o que nos leva a resolver o seguinte

sistema de equações normais:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m g_0(x_i) g_0(x_i) a_0 + \sum_{i=1}^m g_0(x_i) g_1(x_i) a_1 + \dots \\ \quad + \sum_{i=1}^m g_0(x_i) g_n(x_i) a_n = \sum_{i=1}^m g_0(x_i) f(x_i) \\ \sum_{i=1}^m g_1(x_i) g_0(x_i) a_0 + \sum_{i=1}^m g_1(x_i) g_2(x_i) a_1 + \dots \\ \quad + \sum_{i=1}^m g_1(x_i) g_n(x_i) a_n = \sum_{i=1}^m g_1(x_i) f(x_i) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^m g_n(x_i) g_0(x_i) a_0 + \sum_{i=1}^m g_n(x_i) g_1(x_i) a_1 + \dots \\ \quad + \sum_{i=1}^m g_n(x_i) g_n(x_i) a_n = \sum_{i=1}^m g_n(x_i) f(x_i) \end{array} \right. \quad (2.7)$$

A solução do sistema anterior nos fornece os valores dos parâmetros  $a_k$  com  $k = 0, 1, 2, \dots, n$  e, portanto, a função  $g(x)$  que melhor se ajusta à função  $f(x)$  nos pontos  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  dados no sentido dos mínimos quadrados.

## 2.7 Ajustes não-lineares

Ao elaborarmos o gráfico de alguns dados de um fenômeno real e verificarmos que eles possuem um comportamento não linear, tipo exponencial, exponencial assintótico, hiperbólico, trigonométrico, etc., podemos escolher uma transformação conveniente para reduzi-lo a um problema mais simples (POLYA, 1977), como é o caso de um ajuste linear descrito anteriormente.

### 2.7.1 Ajuste exponencial

Em muitos modelos matemáticos importantes, a variação de uma quantidade é proporcional a própria quantidade, e neste caso, os dados se comportam como funções exponenciais reais do tipo

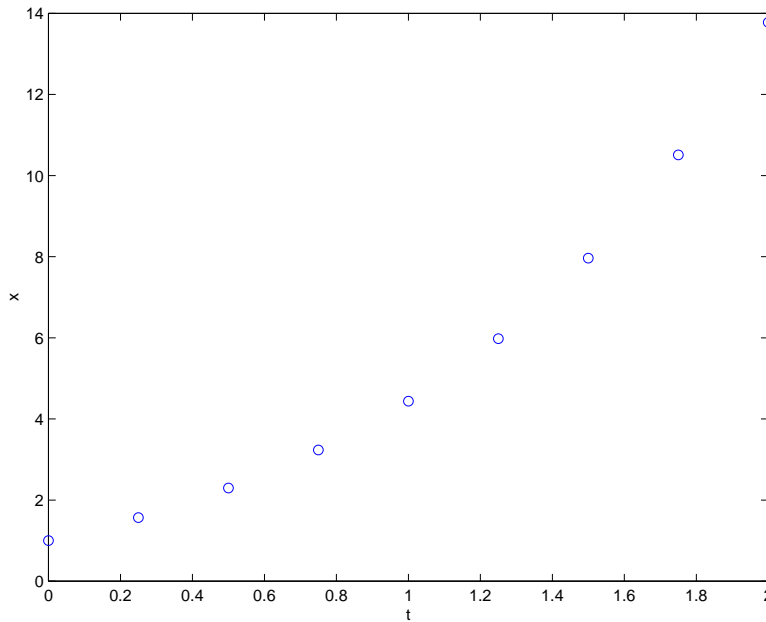
$$g(x) = b e^{a x} \quad (2.8)$$

para a variável  $x \in \mathbb{R}$ , com  $b > 0$ ,  $a \in \mathbb{R}$  conforme gráfico mostrado na Figura 2.10 com  $a > 0$ . Podemos realizar um ajuste linear fazendo a seguinte transformação:

$$z = \ln(g(x)) = \ln(b e^{a x})$$

Com as propriedades da função logarítmica, podemos escrever:

$$z = ax + \ln(b) = a_1 g_1(x) + a_0 g_0(x) \quad (2.9)$$



**Figura 2.10:** Ajuste exponencial

a qual corresponde ao ajuste linear explorado anteriormente  $z = a_1 x + a_0$  com  $g_1(x) = x$ ,  $g_0(x) = 1$  em que  $a_1 = a$  e  $a_0 = \ln(b)$ .

Assim, o sistema de equações normais conforme (2.6) torna-se:

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m x_i a_1 = \sum_{i=1}^m \ln(f(x_i)) \\ \sum_{i=1}^m x_i a_0 + \sum_{i=1}^m x_i^2 a_1 = \sum_{i=1}^m x_i \ln(f(x_i)) \end{cases}$$

que resolvido nos dá os valores dos parâmetros  $a_0$  e  $a_1$  e, desta forma a função exponencial  $g(x) = b e^{ax}$  em que  $a = a_1$  e  $a_0 = \ln(b) \Rightarrow b = e^{a_0}$ .

### Exemplo 2.10

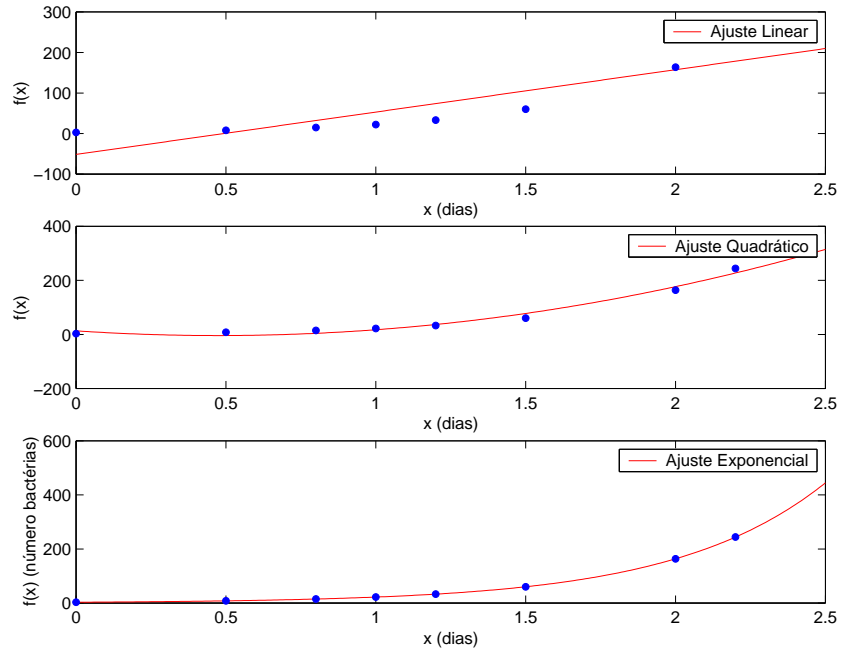
Consideramos os dados obtidos de uma cultura de bactérias num laboratório conforme a Tabela 2.4 em que  $x$  representa o tempo (número de dias observados) e  $f(x)$  o número de bactérias correspondente.

**Tabela 2.4** Dados de uma população de bactérias

$x$	0	0.5	0.8	1	1.2	1.5	2	2.2
$f(x)$	3.010	8.144	14.849	22.187	33.059	60.268	163.790	244.340

O gráfico dos dados podem ser visualizados na Figura 2.11.

Se fizéssemos o ajuste linear como mostrado na Figura 2.11a, poderíamos ampliar a tabela para facilitar os cálculos dos seguintes valores:  $\sum_{i=1}^8 x_i = 9.2$ ,



**Figura 2.11:** Ajuste linear, quadrático e exponencial

$\sum_{i=1}^8 x_i^2 = 14.42$ ,  $\sum_{i=1}^8 x_i f(x_i) = 10\,233.3$  e, assim construiríamos o sistema de equações normais conforme (2.6), que resolvido nos dá o ajuste linear:

$$g(x) = 104.4909x - 51.4586$$

cujo erro é dado por:

$$E_l = \sum_{i=1}^m (f(x_i) - (104.4909x_i - 51.4586))^2 = 1.2352 \times 10^4$$

Entretanto, observando o gráfico, poderíamos pensar em fazer um ajuste melhor, por exemplo, o quadrático, como mostrado na Figura 2.11b ou seja, por um polinômio do tipo

$$g(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

com  $a_k \in \mathbb{R}$ ,  $k = 0, 1, 2$  em que  $g_0(x) = 1$ ,  $g_1(x) = x$  e  $g_2(x) = x^2$ .

Analogamente, ao caso do ajuste linear, podemos determinar os parâmetros  $a_k$ ,  $k = 0, 1, 2$  de forma que  $\sum_{i=1}^m e_i(x_i)^2$  seja mínimo, ou seja, os parâmetros são tais que  $\frac{\partial E}{\partial a_k} = 0$ ,  $k = 0, 1, 2$ , o que nos leva a resolver o seguinte sistema de equações normais (2.6) na forma:

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m x_i a_1 + \sum_{i=1}^m x_i^2 a_2 = \sum_{i=1}^m f(x_i) \\ \sum_{i=1}^m x_i a_0 + \sum_{i=1}^m x_i^2 a_1 + \sum_{i=1}^m x_i^3 a_2 = \sum_{i=1}^m x_i f(x_i) \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 a_0 + \sum_{i=1}^m x_i^3 a_1 + \sum_{i=1}^m x_i^4 a_2 = \sum_{i=1}^m x_i^2 f(x_i) \end{cases} \quad (2.10)$$

A solução do sistema (2.10) nos fornece os valores dos parâmetros  $a_k$  com  $k = 0, 1, 2$  e a função quadrática

$$g(x) = 77.7034x^2 - 73.6805x + 13.3781$$

que melhor se ajusta à função  $f(x)$  nos pontos  $x_i$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots, m$  dados no sentido dos mínimos quadrados.

Neste ajuste, verificamos que o erro obtido é dado por:

$$E_q = \sum_{i=1}^m (f(x_i) - (77.7034x^2 - 73.6805x + 13.3781))^2 = 1.169 \times 10^3$$

Observamos que o ajuste quadrático é melhor do que o linear, pois  $E_q < E_l$ , entretanto o erro ainda parece grande.

Podemos experimentar também um ajuste exponencial do tipo  $g(x) = b e^{ax}$  para verificar se ele é melhor.

**Tabela 2.5 Tabela Auxiliar**

x	0	0.5	0.8	1	1.2	1.5	2	2.2
f(x)	3.01	8.145	14.849	22.187	33.059	60.268	163.79	244.34
$x^2$	0	0.250	0.640	1.000	1.440	2.250	4	4.840
$x^3$	0	0.125	0.512	1.000	1.728	3.375	8	10.648
$x^4$	0	0.063	0.410	1.000	2.074	5.063	16	23.426
$x^2 f(x)$	0	2	9.5	22.2	47.6	135.6	655.2	1182.6
$\ln(f(x))$	1.102	2.097	2.698	3.100	3.498	4.100	5.0976	5.499
$x \ln(f(x))$	0	1.049	2.158	3.099	4.198	6.148	10.197	12.097

Com o auxílio da Tabela 2.5 ampliada calculamos os valores de  $\sum_{i=1}^8 x_i = 9.2$ ,

$$\sum_{i=1}^8 x_i^2 = 14.42, \sum_{i=1}^8 f(x_i) = 549.647, \sum_{i=1}^8 x_i f(x_i) = 1033.3, \sum_{i=1}^8 \ln(f(x_i)) = 27.1909, \\ \sum_{i=1}^8 x_i \ln(f(x_i)) = 38.9467, \sum_{i=1}^8 x_i^3 = 25.388, \sum_{i=1}^8 x_i^4 = 48.0338 \text{ e } \sum_{i=1}^8 x_i^2 f(x_i) = 2054.7$$

Assim, construímos o sistema de equações normais conforme (2.6):

$$\begin{cases} 8 a_0 + 9.20 a_1 = 27.1909 \\ 9.20 a_0 + 14.42 a_1 = 38.9467 \end{cases}$$



Resolvendo o sistema anterior obtemos os valores  $\alpha_1 = 2.000$  e  $\alpha_0 = 1.097$  e, assim,  $b = e^{\alpha_0} = 2.999$ , portanto, a função ajuste exponencial  $g(x) = 3.0033 e^{2.000 x}$ .

Neste caso, o erro é dado por:

$$E_{\text{exp}} = \sum_{i=1}^m (f(x_i) - 3.0033 e^{2.000 x_i})^2 = 0.0189$$

o que justifica como um ajuste muito melhor do que os ajustes polinomiais de grau um e dois, conforme mostra a Figura 2.11c.

Como o expoente  $\alpha_1 > 0$  a função exponencial  $g(x)$  será crescente e, portanto o modelo tem suas limitações reais. Um conjunto de bactérias pode crescer exponencialmente num certo intervalo de tempo, o que é razoável, mas nunca ilimitadamente devido a várias restrições.

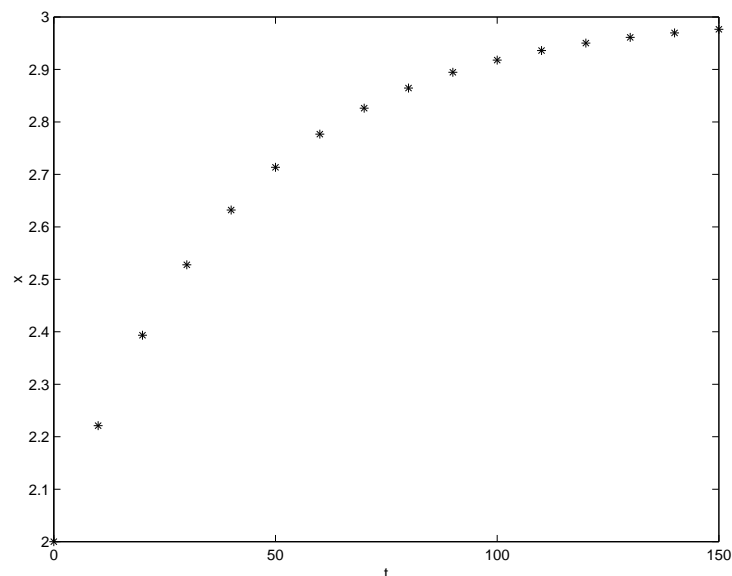
Entretanto, se tivéssemos  $\alpha_1 < 0$ , ela seria decrescente e, neste caso, a função exponencial  $g(x)$  tenderia para o valor assintótico  $g^* = 0$ .

### Ajuste exponencial assintótico

Notemos ainda que alguns dados, como o crescimento de árvores, a produção de alimentos por alqueire relativo a aplicação de adubos etc. se comportam como **funções exponenciais assintóticas** do tipo

$$g(x) = f^* - b e^{\alpha x} \approx f(x) \quad (2.11)$$

com  $\alpha < 0$  e  $f^* > f$  como mostra a Figuras 2.12.



**Figura 2.12:** Ajuste exponencial assintótico de dados

Nos modelos que apresentam um valor assintótico, indicando a tendência de  $f(x)$  convergir para um valor  $f^*$  quando  $x$  cresce muito, temos que

$$\lim_{x \rightarrow \infty} g(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} (f^* - be^{ax}) = f^*$$

é chamado valor de equilíbrio da função  $f(x)$ .

Neste caso, a medida que  $i$  cresce, os valores de  $f(x_i)$  vão se tornando cada vez mais próximos de  $f(x_{i+1})$  na sequência dos dados. Se observarmos os pontos  $(f(x_i), f(x_{i+1}))$  num gráfico cartesiano, eles vão convergindo para o ponto de equilíbrio  $f^*$  situado na diagonal do mesmo.

Escrevemos  $f^* - f(x) \approx b e^{ax}$  e aplicando o logaritmo em ambos os lados obtemos

$$\ln(g(x)) = \ln(f^* - f(x)) = a x + \ln(b) = a_1 g_1(x) + a_0 g_0(x)$$

em que  $g_1(x) = x$  e  $g_0(x) = 1$ .

Com isso, de acordo com (2.6) obtemos o seguinte sistema de equações normais:

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m x_i a_1 = \sum_{i=1}^m \ln(f^* - f(x_i)) \\ \sum_{i=1}^m x_i a_0 + \sum_{i=1}^m x_i^2 a_1 = \sum_{i=1}^m x_i \ln(f^* - f(x_i)) \end{cases} \quad (2.12)$$

Resolvendo o sistema anterior obtemos os valores dos parâmetros  $a_1$  e  $a_0$  e a função exponencial  $g(x) = f^* + be^{ax}$  com os valores  $a = a_1$  e  $a_0 = \ln(b) \Rightarrow b = e^{a_0}$ .

### Exemplo 2.11

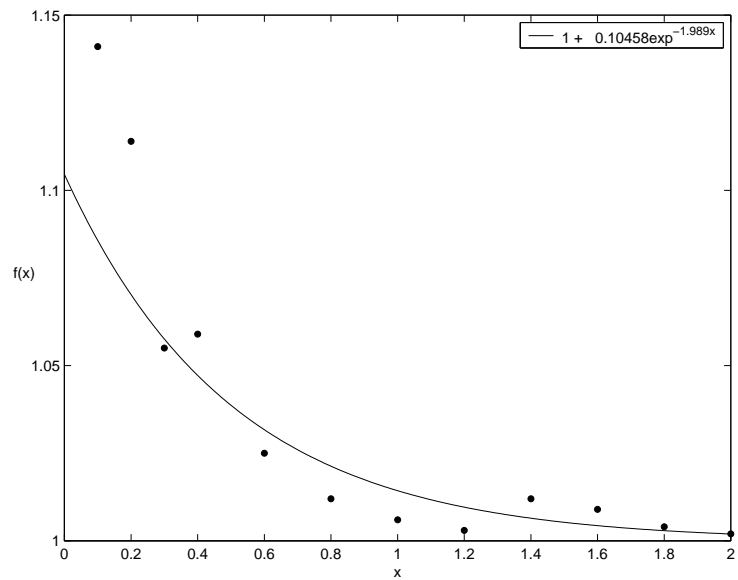
Considere os dados da Tabela 2.6 mostrados na Figura 2.13 a seguir.

Observamos que neste caso os dados são decrescentes convergindo para  $f^* = 1$ .

**Tabela 2.6** Dados

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.6	0.8
f(x)	1.141	1.114	1.055	1.059	1.025	1.012
x	1	1.2	1.3	1.6	1.8	2
f(x)	1.006	1.003	1.012	1.009	1.004	1.002

Observando o comportamento dos pontos da Figura 2.13 anterior vemos que podemos ajustar uma função  $g(x) = f^* + be^{ax}$  com  $f^* = 1$ .



**Figura 2.13:** Ajuste assintótico decrescente

Construindo a tabela auxiliar Tabela 2.7 para obter o sistema de equações normais de acordo com (2.6) torna-se:

$$\begin{cases} 12a_0 + 11.4a_1 = -49.7675 \\ 11.4a_0 + 15.5a_1 = -56.5677 \end{cases}$$

cuja solução nos dá  $a_0 = -2.257752855 \Rightarrow b = e^{a_0} = 0.1046$  e  $a_1 = -1.988988223$ .

Portanto, temos,  $g(x) = 1 + 0.1046 e^{-1.988988223x}$ .

**Tabela 2.7** Tabela auxiliar a 2.6

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.6	0.8
f(x)	1.141	1.114	1.055	1.059	1.025	1.012
f(x) - f*	0.141	0.114	0.055	0.059	0.025	.012
ln(f(x) - f*)						
x	1	1.2	1.3	1.6	1.8	2
f(x)	1.006	1.003	.112	1.009	1.004	1.002
f(x) - f*	0.006	0.003	0.112	0.009	0.004	0.002
ln(f(x) - f*)						

Se  $b < 0$ , podemos fazer a seguinte transformação:

$$g(x) = f^* - be^{ax} \approx f(x)$$

desta forma, segue que:

$$f(x) - f^* = \bar{b} e^{ax}$$

em que  $\bar{b} = -b$ .

$$\ln(f(x) - f^*) \approx \ln(\bar{b}) + ax = a_1x + a_0$$

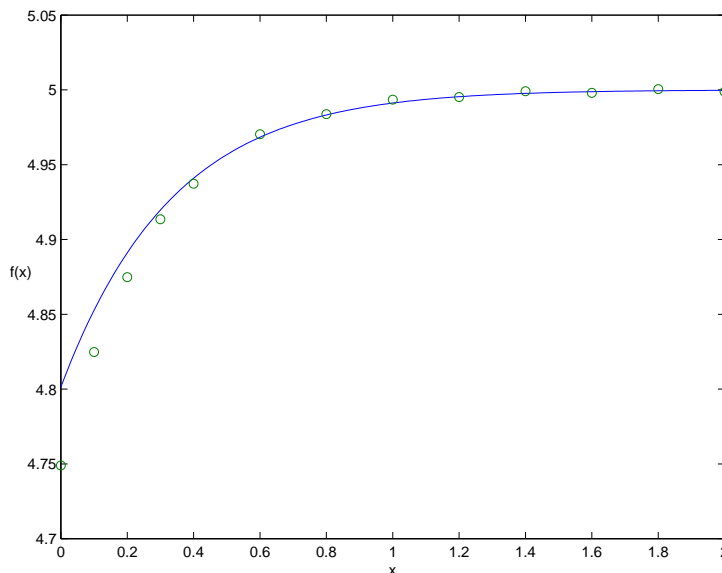
em que  $a_0 = \ln(\bar{b})$  e  $a_1 = a$ .

Como anteriormente, temos o ajuste linear

$$z = a_1 x + a_0$$

### Exemplo 2.13

Considere os dados plotados na Figura 2.14 verifique que o comportamento dos pontos nos levaria a ajustar  $g(x) = f^* + be^{ax}$  com  $f^* = 5$ ,  $b < 0$  e  $a < 0$ .



**Figura 2.14:** Ajuste exponencial assintótico

Observemos que se  $a > 0$  a exponencial será crescente e, se  $a < 0$ , ela será decrescente e em ambos os casos a função ajustada tenderá para o valor assintótico  $g^*$ .

### 2.7.2 Ajuste geométrico

Suponha que os dados de um experimento ou fenômeno se comportam como funções potências do tipo

$$g(x) = b x^a \quad (2.13)$$

com  $a > 0$ ,  $b > 0$  e  $x \in \mathbb{R}$  positivo e  $x \neq 1$ .

De fato, fazendo a seguinte transformação:

$$g(x) = b x^a \approx f(x)$$

Temos

$$\ln(g(x)) = \ln(b) + a \ln(x) = a_1 g_1(x) + a_0 g_0(x)$$

em que  $g_2(x) = \ln(x)$  e  $g_0(x) = 1$

Desta forma, determinamos os valores de  $a_1 = a$  e  $a_0 = \ln(b) \Rightarrow b = e^{a_0}$ .

Neste caso, o sistema de equações normais (2.6) torna-se:

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m \ln(x_i) a_1 = \sum_{i=1}^m \ln(f(x_i)) \\ \sum_{i=1}^m \ln(x_i) a_0 + \sum_{i=1}^m (\ln(x_i))^2 a_1 = \sum_{i=1}^m \ln(x_i) \ln(f(x_i)) \end{cases}$$

Uma vez resolvido o sistema obtido, temos os valores de  $a_0$  e  $a_1$ . Portanto, temos  $b = e^{a_0}$ ,  $a = a_1$  e, portanto,  $g(x) = b x^a$ .

### Exemplo 2.14

Num experimento realizado no laboratório de Física da UFSCar analisamos o comportamento de um pêndulo simples para modelar o seu período  $T$ . A princípio podemos supor que ele depende de várias variáveis como da massa  $m$  do corpo pendurado num fio fino de espessura desprezível e de comprimento  $L$ , da aceleração da gravidade  $g$  e do ângulo inicial  $\theta$  de abandono do corpo do seu ponto de equilíbrio etc. Assim poderíamos considerar que

$$T = k m^a L^b g^c \theta^d$$

em que  $k$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$  são constantes a serem determinadas.

**Tabela 2.10** Dados do pêndulo

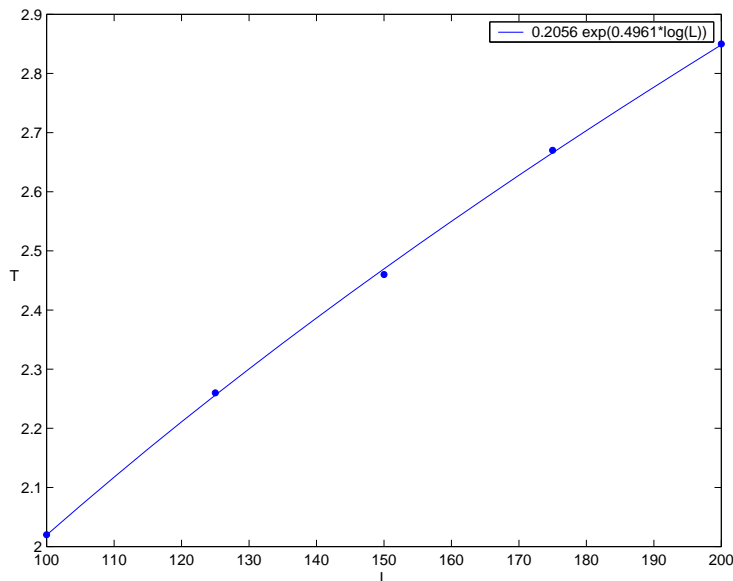
L(cm)	100	125	150	175	200
T(s)	2.02	2.26	2.46	2.67	2.85

Depois de vários experimentos fixando todas as variáveis exceto uma delas, observamos que o período  $T$  depende apenas do comprimento  $L$  do pêndulo de acordo com uma expressão do tipo

$$T = K L^b$$

em que a constante  $K$  engloba todas as outras quantidades consideradas constantes para determinação do período  $T$ .

Podemos encontrar uma relação geométrica ajustando os dados da tabela obtidos experimentalmente.



**Figura 2.15:** Período do pêndulo em função do comprimento

Considerando os dados plotados na Figura 2.15, construímos uma tabela auxiliar

**Tabela 2.11** Tabela auxiliar dos logaritmos dos dados

L(cm)	100	125	150	175	200
T(s)	2.02	2.26	2.46	2.67	2.85
log(L)	4.6052	4.8283	5.0106	5.1648	5.2983
log(T)	0.7031	0.8154	0.9002	0.9821	1.0473

E, fazendo o ajuste linear com o logaritmo dos dados obtemos:

$$\log(T) = -1.5817 + 0.4961 \log(L)$$

com  $\alpha_0 = e^{-1.5817} = 0.2056$  e  $\alpha_1 = 0.4961$ , de modo que o valor obtido para o período é  $T = 0.2056 e^{0.4961}$ , que é próximo do aceito teoricamente:

$$T = 2\pi\sqrt{\left(\frac{L}{g}\right)}$$

Com o valor obtido experimentalmente obtemos a aceleração da gravidade de São Carlos que é  $g = 937.9059 \approx 938 \text{ cm/s}^2$

### 2.7.3 Ajuste hiperbólico

No ajuste hiperbólico, temos uma curva de crescimento ou decaimento limitado. Um conjunto de dados com este comportamento gráfico pode ser representado por funções do tipo

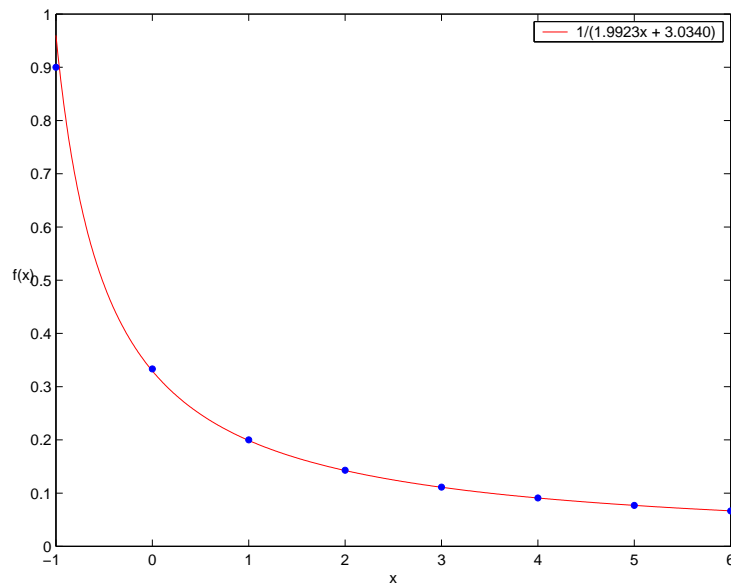
$$g(x) = \frac{1}{a_1 x + a_0} \quad \text{ou} \quad g(x) = c + d \left( \frac{1}{x} \right)$$

conforme a Figura 2.16.

1. Se a função  $g(x)$  de ajuste for escrita como:

$$g(x) = \frac{1}{a_1 x + a_0} \approx f(x) \quad (2.14)$$

com os parâmetros reais  $a_0 > 0$  e  $a_1 > 0$  para  $x \neq -\frac{a_1}{a_0}$  conforme a Figura 2.16.



**Figura 2.16:** Ajuste hiperbólico de dados

Na Figura 2.16 vemos também os dados da Tabela 2.12 ajustados por uma função contínua fazendo a seguinte transformação:

$$z = \frac{1}{g(x)} = a_1 x + a_0 \approx \frac{1}{f(x)}$$

para  $x \neq 0$ .

**Tabela 2.12** Dados a serem ajustados

x	-1	0	1	2	3	4	5	6
f(x)	0.9	0.3334	0.2001	0.1429	0.1112	0.0909	0.0769	.0666

Desta forma obtemos a função

$$z = a_1 x + a_0$$

e portanto, os coeficientes  $a_0$  e  $a_1$  do ajuste.

Para obter os parâmetros  $a_1$  e  $a_0$  temos que resolver o seguinte sistema de equações normais conforme (2.6):

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m x_i a_1 = \sum_{i=1}^m \frac{1}{f(x_i)} \\ \sum_{i=1}^m x_i a_0 + \sum_{i=1}^m x_i^2 a_1 = \sum_{i=1}^m x_i \frac{1}{f(x_i)} \end{cases} \quad (2.15)$$

Neste caso, a função hiperbólica que melhor se ajusta aos dados é:

$$g(x) = \frac{1}{1.9923x + 3.0340}$$

2. Por outro lado, se a função  $g(x)$  for escrita como:

$$g(x) = a_1 g_1(x) + a_0 g_0(x) = c + d \left( \frac{1}{x} \right) \quad (2.16)$$

com  $c$  e  $d \in \mathbb{R}$  e, neste caso devemos ter necessariamente  $x \neq 0$ , conforme Figura 2.16, pois  $g_1(x) = 1/x$   $g_0(x) = 1$  em que os parâmetros  $c = a_0$  e  $d = a_1$ .

Para obter os parâmetros  $a_0$  e  $a_1$  temos que resolver o seguinte sistema de equações normais conforme (2.6):

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m \frac{1}{x_i} a_1 = \sum_{i=1}^m \frac{1}{f(x_i)} \\ \sum_{i=1}^m \frac{1}{x_i} a_0 + \sum_{i=1}^m \left( \frac{1}{x_i} \right)^2 a_1 = \sum_{i=1}^m \frac{1}{x_i} \frac{1}{f(x_i)} \end{cases} \quad (2.17)$$

para determinarmos  $a_0$  e  $a_1$  e, conseqüentemente  $c = a_1 f_{\max}$ .

### Exemplo 2.15

Considere a seguinte tabela



**Tabela 2.13** Dados

x	1	2	3	4	5	6	7	8
f(x)	3.19	1.71	1.19	0.96	0.79	0.71	0.618	0.585

Construindo a tabela auxiliar

**Tabela 2.14** Dados auxiliares

x	1	2	3	4	5	6	7	8
f(x)	3.19	1.71	1.19	0.96	0.79	0.71	0.618	.585
$\frac{1}{x}$	1	0.3	0.333	0.25	0.2	0.1667	0.1428	0.125

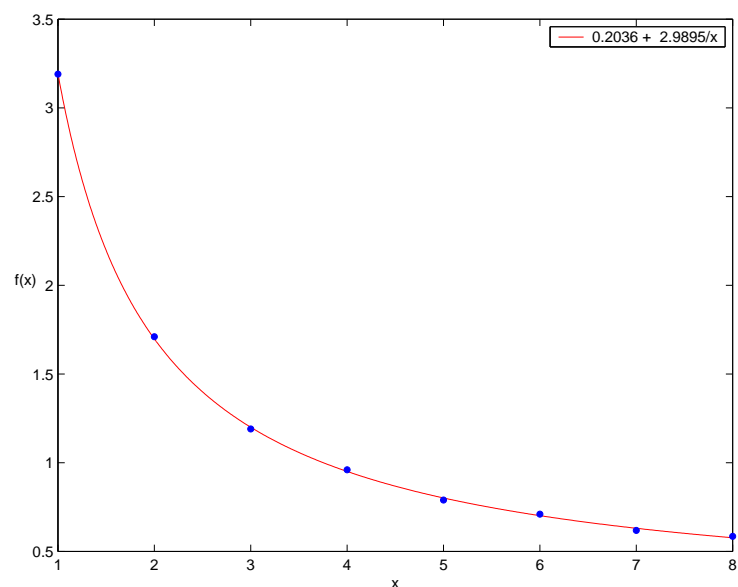
Obtemos o sistema de equações normais e resolvendo-o temos:

$$\begin{cases} 7a_0 + 14a_1 = 49.0930 \\ +14a_0 + 56a_1 = 153.8409 \end{cases}$$

obtemos a solução nos dá  $a_1 = -1.9876$  e  $a_0 = 3.0379$ .

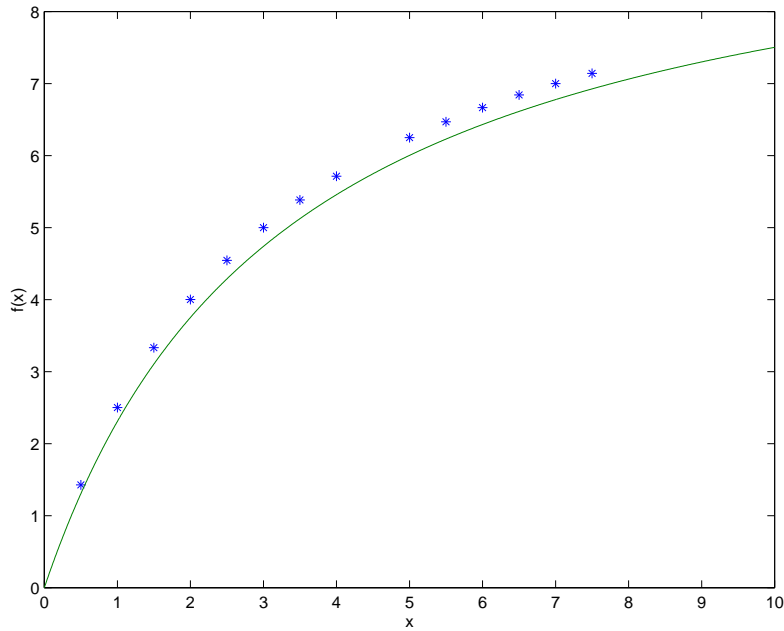
Portanto, temos,

$$g(x) = \frac{1}{1.9876x} + 3.0379$$

**Figura 2.17:** Ajuste hiperbólico de dados do tipo 2

#### 2.7.4 Ajuste Michaelis-Menten

Um outro tipo de ajuste que aparece em algumas aplicações, principalmente em farmacocinética, é o de Michaelis-Menten, como mostra a Figura 2.18:



**Figura 2.18:** Ajuste Michaelis-Menten

Quando os dados estão na forma de uma curva de crescimento assintótico representada por uma função do tipo:

$$g(x) = \frac{f_{\max} x}{c + x} \quad (2.18)$$

em que  $f_{\max}$  é o valor máximo da função  $f$  e  $c$  é a constante de Michaelis-Menten.

Fazendo uma transformação conveniente temos:

$$\frac{1}{g(x)} = \frac{1}{f(x)} \quad (2.19)$$

Com isso, transformamos o problema num caso de ajuste hiperbólico:

$$Z = \frac{1}{g(x)} = \frac{c + x}{f_{\max} x} = \frac{c}{f_{\max}} \frac{1}{x} + \frac{1}{f_{\max}} = a_1 g_1(x) + a_0 g_0(x)$$

para  $x \neq 0$  e  $f(x) \neq 0$ , em que  $a_1 = \frac{c}{f_{\max}}$ ,  $a_0 = \frac{1}{f_{\max}}$  e,  $g_1(x) = \frac{1}{x}$  e  $g_0(x) = 1$

Desta forma, obtemos o sistema de equações normais dado por:

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m \frac{1}{x_i} a_1 = \sum_{i=1}^m \frac{1}{f(x_i)} \\ \sum_{i=1}^m \frac{1}{x_i} a_0 + \sum_{i=1}^m \left(\frac{1}{x_i}\right)^2 a_1 = \sum_{i=1}^m \frac{1}{x_i} \frac{1}{f(x_i)} \end{cases} \quad (2.20)$$

Construindo uma tabela auxiliar 2.15 para obter o sistema de equações normais e resolvendo:

$$\begin{cases} 14 a_0 + 6.4142 a_1 &= 3.3244 \\ 6.4142 a_0 + 6.2724 a_1 &= 2.5235 \end{cases}$$

obtemos a solução  $a_1 = 0.3001$  e  $a_0 = 0.1000$ ,  $c = a_1 f_{\max} = 0.3001 \times 10 = 3.0010$ .

Portanto,

$$g(x) = \frac{10 x}{3.0010 + x}$$

**Tabela 2.15** Dados  $x$ ,  $f(x)$  e dados auxiliares

$x$	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5
$f(x)$	1.428	2.501	3.333	4.001	4.5454	5.0001	5.3845
$\frac{1}{f(x)}$	0.7003	0.3998	0.3000	0.2499	0.2200	0.2000	0.1857
$\frac{1}{x}$	2	1	0.6667	0.5	0.4	0.3333	0.2857
$\frac{1}{x^2}$	4	1	0.4444	0.25	0.16	0.1111	0.0816
$x$	4	5	5.5	6	6.5	7	7.5
$f(x)$	5.7143	6.2500	6.4706	6.6667	6.8421	7.00	7.1429
$\frac{1}{f(x)}$	0.1750	0.1600	0.1545	0.1500	0.1462	0.1429	0.1400
$\frac{1}{x}$	0.25	0.2	0.1818	0.1667	0.1538	0.1429	0.1333
$\frac{1}{x^2}$	0.0625	0.0400	0.0331	0.0278	0.0237	0.0204	0.0178

### 2.7.5 Ajuste Logístico

Um tipo de ajuste que geralmente aparece no estudo da dinâmica populacional, da exploração de recursos naturais e outros é o ajuste logístico, proposto por P. F. Verhust (1804-1849), representado por um gráfico do tipo da Figura 2.19,

$$g(x) = \frac{f_{\max}}{1 + b e^{-\lambda x}} \quad (2.21)$$

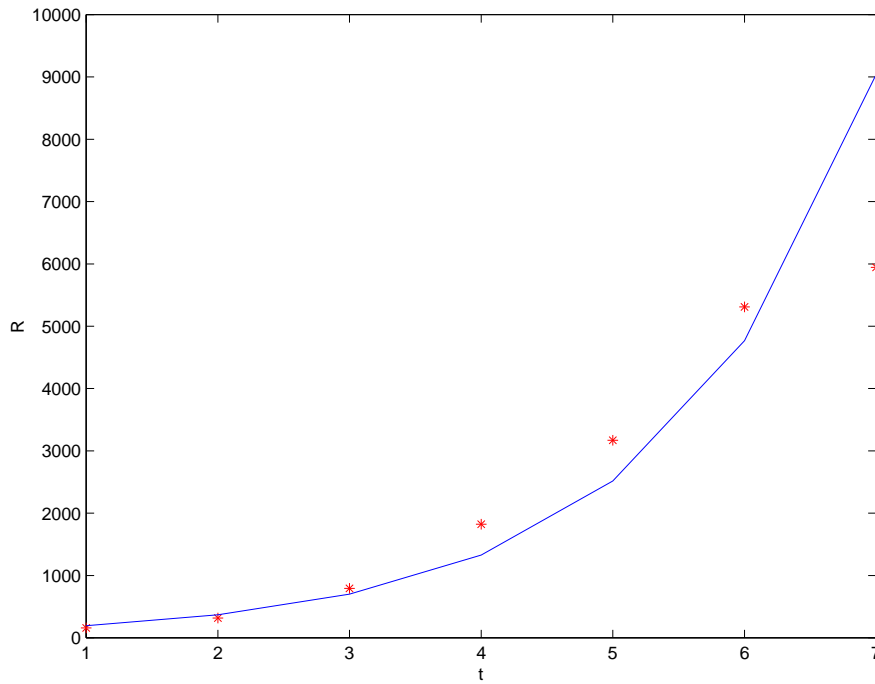
em que  $f_{\max}$  é o valor máximo da função população  $f(x)$ , conforme Figura 2.19

Considere a seguinte transformação

$$g(x) = \frac{f_{\max}}{1 + b e^{-\lambda x}} \approx f(x)$$

Observemos que a curva do ajuste logístico tem um ponto de inflexão em

$$x = \frac{\ln(b)}{\lambda}$$



**Figura 2.19:** Ajuste logístico

com o valor correspondente

$$f\left(\frac{\ln(b)}{\lambda}\right) = f_{\max}/2.$$

Para estimar um valor razoável para o valor máximo da população  $f_{\max}$  é conveniente considerarmos um valor dado acima dos valores da inflexão dela.

Fazendo as seguintes operações

$$f_{\max} = f(x) (1 + b e^{-\lambda x}) \Leftrightarrow \frac{f_{\max}}{f(x)} - 1 = b e^{-\lambda x}$$

obtemos

$$\ln\left(\frac{f_{\max}}{f(x)} - 1\right) = \ln(b) - \lambda x = a_1 g_1(x) + a_0 g_0(x)$$

em que  $a_1 = -\lambda$  e  $a_0 = \ln(b) \Rightarrow b = e^{a_0}$ ,  $g_1(x) = x$  e  $g_0(x) = 1$ .

Para obter os parâmetros  $a_0$  e  $a_1$  temos que resolver o seguinte sistema de equações normais conforme (2.6):

$$\begin{cases} m a_0 + \sum_{i=1}^m x_i a_1 = \sum_{i=1}^m \ln\left(\frac{f_{\max}}{f(x_i)} - 1\right) \\ \sum_{i=1}^m x_i a_0 + \sum_{i=1}^m x_i^2 a_1 = \sum_{i=1}^m x_i \ln\left(\frac{f_{\max}}{f(x_i)} - 1\right) \end{cases} \quad (2.22)$$

e obtemos os parâmetros  $a_0$  e  $a_1$  e consequentemente,  $b = e^{a_0}$  e  $\lambda = -a_1$ .

### Exemplo 2.17

Um conjunto de dados de crescimento de um recurso natural ( $t \times r$ ) é dado na Tabela 2.16. Num primeiro passo, podemos fazer o gráfico do conjunto de pontos dados e observar o comportamento dos mesmos.

Poderíamos fazer várias tentativas de ajustes, entretanto, parece que o comportamento dos dados da tabela 2.16 vistos na Figura 2.19 é similar a um modelo logístico.

**Tabela 2.16** Dados de um recurso natural

$t_i$	$r(t_i)$
1	158
2	317
3	793
4	1823
5	3170
6	5310
7	5944

Em seguida, construímos uma tabela auxiliar completando os dados para ajustar uma função apropriada.

Podemos verificar graficamente o tipo de função mais apropriada para ajustar os dados da tabela ou, testando várias funções e calculando a soma dos quadrados dos erros. Neste caso, a função adequada é uma do tipo logístico dada por

$$r(t) = \frac{r_{\max}}{1 + be^{-\lambda t}},$$

e, para isso, construímos uma tabela auxiliar.

**Tabela 2.18** Dados e cálculos

$t_i$	$r_i$	$r_{\max} - r_i$	$\frac{r_i}{r_{\max} - r_i}$	$z = \ln\left(\frac{r_i}{r_{\max} - r_i}\right)$
1	158	6842	0.0231	- 3.7682
2	317	6683	0.0474	- 3.0484
3	793	6207	0.1278	-2.0576
4	1823	5177	0.3521	-1.0437
5	3170	3830	0.8277	-0.1891
6	5310	1690	3.1420	1.1449
7	5944	1056	5.6288	1.7279

A tabela auxiliar contém os valores necessários para calcular os parâmetros  $b$  e  $\lambda$  da função a ser ajustada, bem como escolher um valor para  $r_{\max}$ .

Escolhendo um valor máximo da Tabela 2.16 para  $r_{\max}$ , digamos  $r_{\max} = 7\,000$  para os dados do ajuste logístico, (que é um valor maior do que todos os valores tabelados, portanto, é maior do que o valor do ponto de inflexão dos dados, que é próximo de 4\,000), obtemos a Tabela auxiliar 2.16 com os dados e alguns cálculos auxiliares.

Escolhendo  $r_{\max} = 7\,000$  e fazendo inicialmente o ajuste linear para  $z = a_1 t + a_0 = -\lambda t + \ln(b)$ , obtemos

$$z = -0.9551t + 4.854$$

cujo gráfico dos dados linearizado e ajustado pode ser visto na Figura 2.19, em que os coeficientes  $\lambda = -0.9551$  e  $\ln(b) = 4.854$ .

Seque que  $b = e^{4.854} \approx 128.2454$  e finalmente a função contínua procurada é

$$r(t) = \frac{r_{\max}}{1 + b e^{-\lambda t}} = \frac{7000}{1 + 128.2524e^{-0.9551 t}}$$

conforme Figura 2.19.

Obtenha e confira passo a passo a equação logística ajustada no gráfico da Figura 2.19 com um dos softwares gráficos indicados explicitando todos os comandos utilizados.

Nesta unidade, apresentamos alguns tópicos de matemática básica necessários para compreensão de conceitos e de modelos ambientais simples.

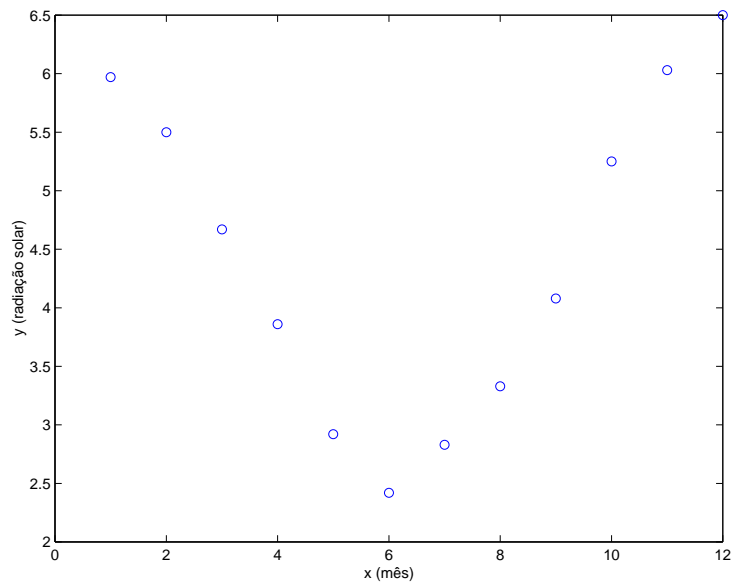
Existem outros tipos de ajustes como os trigonométricos, normais etc. que também podem ser explorados em problemas ambientais.

### 2.7.6 Ajuste trigonométrico

Os fenômenos vibratórios e as oscilações como as frentes de ondas, geralmente são periódicos como a radiação solar nas várias partes da superfície terrestre, e, neste sentido, podem ser representados matematicamente por funções trigonométricas periódicas como senos e cossenos ou por superposição delas.

Dizemos que uma função real  $f(x)$  é periódica em  $\mathbb{R}$ , se existe um número real positivo  $T$ , tal que para todo  $x$ ,

$$f(x + T) = f(x)$$



**Figura 2.20:** Radiação solar mensal média em POA

Podem existir muitos números reais  $T$  com esta propriedade, mas o menor número positivo que satisfaz esta condição é chamado de período fundamental.

Sabemos que as funções  $\sin(\omega x)$  e  $\cos(\omega x)$  possuem período  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ , bem como a função

$$g(x) = a_0 + a_1 \cos(\omega x + \theta) + b_1 \sin(\omega x + \theta) \quad (2.23)$$

que representa uma oscilação mais geral com os parâmetros  $a_0$ ,  $a$ ,  $\omega$  e  $\theta \in \mathbb{R}$ .

Neste caso, o parâmetro  $a_0$  representa o valor médio da função,  $a$  a amplitude ou altura da oscilação,  $\omega$  a frequência angular da oscilação que indica quão frequente os ciclos ocorrem e,  $\theta$  o ângulo ou desvio de fase indicando a extensão em que a função cosseno desvia na horizontal.

O ângulo de fase da função (2.23) pode ser medido com a distância em radianos de  $t = 0$  até o ponto em que a função começa um novo ciclo.

A frequência angular  $\omega$  (radianos/tempo) é relacionada com a frequência  $f$  (ciclos/tempo) pela relação

$$\omega = 2\pi f$$

A frequência  $f$  está relacionada com o período  $T$  (unidade de tempo) através da relação

$$f = \frac{1}{T}$$

Como aparece o ângulo de fase na representação geral da função de oscilação,

podemos escrevê-la na forma de seno ou cosseno, pois:

$$\cos(wx + \theta) = \sin(wx + (\theta - \pi/2))$$

Se estamos interessados em ajustar um conjunto de dados é conveniente escrevermos a função (2.23) como

$$f(x) = a_0 + a_1 \cos(wx) + b_1 \sin(wx) \quad (2.24)$$

em que  $a_1 = a \cos(\theta)$ ,  $b_1 = -a \sin(\theta)$ , o ângulo  $\theta = \arctan(\frac{-b_1}{a_1})$  e a amplitude  $a = \sqrt{a_1^2 + b_1^2}$ .

Uma distribuição de  $m$  pontos  $(x_i, f(x_i))$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  dispostos graficamente com periodicidade  $T$ , pode ser ajustada por uma função trigonométrica do tipo

$$g(x) = a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + b_1 g_2(x)$$

com  $g_0(x) = 1$ ,  $g_1(x) = \cos(wx)$  e  $g_2(x) = \sin(wx)$ .

Utilizando o método dos mínimos quadrados, em que o erro é igual a soma dos quadrados dos erros em cada um dos  $m$  pontos

$$\sum_{i=1}^m (f(x_i) - g(x_i))^2$$

é mínimo, neste caso, queremos o mínimo da função erro

$$E(a_0, a_1, b_1) = \sum_{i=1}^m (f(x_i) - (a_0 + a_1 \cos(wx_i) + b_1 \sin(wx_i)))^2$$

Assim, obtemos o sistema de equações normais para cálculo dos coeficientes  $a_0$ ,  $a_1$  e  $b_1$  correspondente a este ajuste trigonométrico, que é dado por:

$$\begin{cases} \left( \sum_{i=1}^m 1 \right) a_0 + \sum_{i=1}^m \cos(wx_i) a_1 + \sum_{i=1}^m \sin(wx_i) b_1 &= \sum_{i=1}^m f(x_i) \\ \sum_{i=1}^m \cos(wx_i) a_0 + \sum_{i=1}^m \cos^2(wx_i) a_1 + \sum_{i=1}^m \cos(wx_i) \sin(wx_i) b_1 &= \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(wx_i) \\ \sum_{i=1}^m \sin(wx_i) a_0 + \sum_{i=1}^m \cos(wx_i) \sin(wx_i) a_1 + \sum_{i=1}^m \sin^2(wx_i) b_1 &= \sum_{i=1}^m f(x_i) \sin(wx_i) \end{cases} \quad (2.25)$$

Entretanto, quando os dados são igualmente espaçados com intervalo  $\Delta x$  e com período  $T = m \Delta x$  o sistema normal fica muito simples

$$\begin{cases} m a_0 &= \sum_{i=1}^m f(x_i) \\ \frac{m}{2} a_1 &= \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(wx_i) \\ \frac{m}{2} b_1 &= \sum_{i=1}^m f(x_i) \sin(wx_i) \end{cases} \quad (2.26)$$



pois os valores médios a seguir podem ser facilmente calculados,

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \cos(wx_i) &= 0, & \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sin(wx_i) &= 0, & \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sin(wx_i) \cos(wx_i) &= 0 \\ \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \cos^2(wx_i) &= \frac{1}{2} & \text{e} & & \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sin^2(wx_i) &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

e a solução do sistema de equações normais torna-se muito fácil:

$$\begin{cases} a_0 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \\ a_1 = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(wx_i) \\ b_1 = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \sin(wx_i) \end{cases} \quad (2.27)$$

### Exemplo 2.18

A média mensal de radiação solar  $y$  em kWh por dia por  $m^2$  numa área plana da cidade Porto Alegre - RS, situada a latitude sul  $30.04^\circ$  e longitude oeste  $51.20^\circ$ , em função dos  $m = 12$  meses do ano é dada pela Tabela 2.18 e pode ser vista na Figura 2.20.

**Tabela 2.18** Radiação solar média mensal

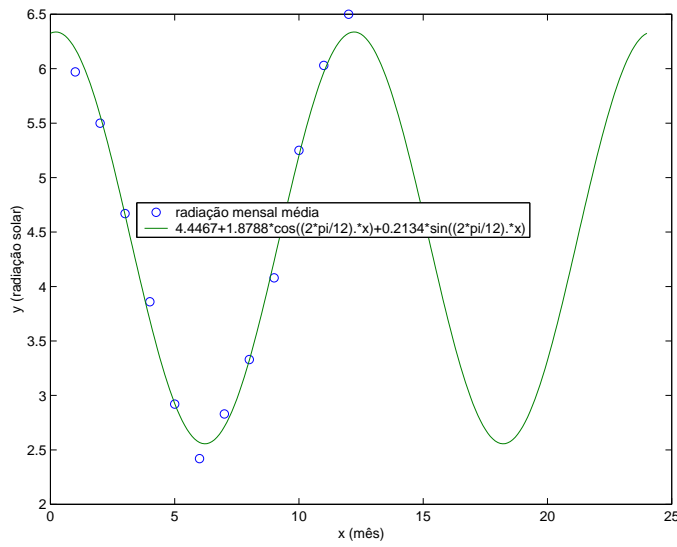
$x$ (mês)	1	2	3	4	5	6
$y$ (kWh)	5.97	5.5	4.67	3.86	2.92	2.42
$x$ (mês)	7	8	9	10	11	12
$y$ (kWh)	2.83	3.33	4.08	5.25	6.03	6.5

No ajuste trigonométrico que consideramos adequado, a solução do sistema de equações normais (2.5) para os dados da Tabela 2.18 torna-se:

$$\begin{cases} a_0 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) = 4.4467 \\ a_1 = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(wx_i) = 1.8788 \\ b_1 = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \sin(wx_i) = 0.2134 \end{cases} \quad (2.28)$$

Assim, obtemos o gráfico da função juntamente com os pontos dados na Figura 2.21 que pode nos levar a uma razoável predição para o ano seguinte.

$$f(x) \approx 4.4467 + 1.8788 \cos\left(\frac{2\pi}{12}x\right) + 0.2134 \sin\left(\frac{2\pi}{12}x\right).$$



**Figura 2.21:** Ajuste trigonométrico

Do mesmo modo, podemos generalizar o modelo de ajuste para uma função do tipo:

$$f(x) \approx a_0 + \sum_{k=1}^m (a_k \cos(kwx) + b_k \sin(kwx))$$

para  $k = 0, 1, 2, \dots, m$ .

Quando os dados são igualmente espaçados com intervalo  $\Delta x$  e o período  $T$  múltiplo de  $\Delta x$ , o sistema normal torna-se bastante simples:

$$\left\{ \begin{array}{ll} m a_0 & = \sum_{i=1}^m f(x_i) \\ \frac{m}{2} a_1 & = \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(x_i) \\ \frac{m}{2} b_1 & = \sum_{i=1}^m f(x_i) \sin(x_i) \\ \vdots & \\ \frac{m}{2} a_k & = \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(kx_i) \\ \frac{m}{2} b_k & = \sum_{i=1}^m f(x_i) \sin(kwx_i) \\ \vdots & \\ \frac{m}{2} a_m & = \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(mwx_i) \\ \frac{m}{2} b_m & = \sum_{i=1}^m f(x_i) \sin(mwx_i) \end{array} \right. \quad (2.29)$$

A solução do sistema de equações normais neste caso, é dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \\ a_1 = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(wx_i) \\ b_1 = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \operatorname{sen}(wx_i) \\ \vdots \\ a_k = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(kwx_i) \\ b_k = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \operatorname{sen}(kwx_i) \\ \vdots \\ a_m = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(mwx_i) \\ b_m = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \operatorname{sen}(mwx_i) \end{array} \right. \quad (2.30)$$

Um caso contínuo de ajuste de uma função periódica na forma de uma série de funções senos e cossenos chamada de Série de Fourier será abordada na Unidade 5.

Nesta unidade, apresentamos alguns tópicos de matemática básica necessários para compreensão de conceitos e de modelos ambientais simples.

Existem outros tipos de ajustes que também podem ser explorados em problemas ambientais, mas que não serão abordados neste texto.

## 2.8 Problemas propostos

1. **Temperaturas:** A temperatura absoluta média  $T$  da superfície terrestre (da sua cidade ou região) nos últimos anos é uma função do tempo  $t$ . Faça uma pesquisa, elabore tabelas e gráficos ( $t \times T$ ) mostrando a temperatura em várias épocas do ano e também compare-as durante vários anos. Encontre uma função que melhor se ajusta aos dados da tabela obtida. A temperatura realmente está aumentando ao longo do tempo no local analisado? Quais são as medidas das temperaturas correspondentes em ( $^{\circ}\text{C}$ ) graus Celsius? A temperatura média  $T$  (em  $^{\circ}\text{C}$ ) numa certa região pode ser modelada por uma função periódica do tempo  $t$  do tipo

$$T(t) = A_0 + A \operatorname{sen}(w(t - \theta))$$

em que  $A_0$ ,  $A$ ,  $w$  e  $\theta$  são constantes reais.

**Temperatura do solo:** Considere a temperatura do solo  $T$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) numa região como função do tempo  $t$  (h) aproximada pela

$$T(t) = 15 + 5 \sin\left(\frac{1}{4}\left(t - \frac{18\pi}{12}\right)\right)$$

durante três dias de observação. Em que horário(s) a temperatura atingiu  $15^{\circ}\text{C}$ ? Em que horário(s) a temperatura atingiu o seu valor máximo nas 72 horas observadas? Qual a taxa de variação instantânea de  $T(t)$  num instante  $t$ ? Qual foi o valor mínimo da temperatura?

2. **Intensidade de terremoto:** Elabore uma tabela e um gráfico  $E \times I$  da função intensidade de um terremoto  $I(E)$  conforme 2.1. Se aumentarmos a intensidade de uma unidade na escala Richter quanto aumentaria a energia  $E$  liberada de um terremoto? Qual foi a energia liberada no último terremoto que ocorreu no Chile em 2010 em que a intensidade foi 8.8?

3. **Intensidade de terremoto:** A Escala de Magnitude de Momento (MMS), introduzida em 1979 por Tomas Haks e Hiroo Kanamori para estimar as magnitudes dos grandes terremotos da atualidade, é uma escala logarítmica dada por  $M_w = -10.7 + 2/3 \log_{10} M_0$ , em que  $M_0$  é o momento sísmico, estimado a partir dos registros de movimento da superfície através dos sismogramas, cuja unidade é  $\text{dina cm}$ . Ela substitui a escala Richter, que é utilizada para medir a intensidade de terremotos em termos da energia liberada. O terremoto de Kobe, que ocorreu no dia 17 de janeiro de 1995 no Japão foi um dos que causaram maior impacto local e na comunidade científica internacional. Ele teve uma Magnitude de Momento  $M_w = 7.3$ . Qual foi o Momento Sísmico  $M_0$  do terremoto de Kobe em  $\text{dina cm}$ ?

4. **Inibição de compostos orgânicos:** Vários compostos orgânicos encontrados em solos e águas subterrâneas em grandes concentrações  $C$  podem ser tóxicos para bactérias. Considere a taxa de inibição  $r$  de substrato utilizado dada por:

$$r = \frac{r_{\max} C}{K_s + C + \frac{C^2}{K_i}}$$

em que  $K_s$  é uma constante real e  $K_i$  é uma constante de inibição.

**a)** Determine a forma do gráfico de  $C \times r$ , atribuindo valores aos parâmetros  $r_{\max}$ ,  $K_s$  e  $K_i$ ;

**b)** Varie os parâmetros  $r_{\max}$ ,  $K_s$  e  $K_i$  e identifique os pontos notáveis da curva  $r(C)$  (pontos extremos, valores extremos, ponto de inflexão, limites

etc.) observando como eles podem variar de um conjunto de dados para outro.

5. **Biorremediação:** Na cinética de biorremediação consideramos um produto biodegradado de acordo com a Tabela 2.19:

- a) Explore uma função que melhor se ajusta aos dados da Tabela 2.19;  
b) Encontre o tempo  $t_{1/2}$  em que a quantidade de material biodegradado é reduzida a metade.

**Tabela 2.19** Tempo x Concentração

t (dias)	0	2	5	7	10	15
C(mg/L)	500	450	375	350	298	215

6. **Radiação solar:** Considere a média mensal de radiação solar  $y$  em kWh por dia por  $m^2$  numa área plana na cidade de São Carlos - SP em função dos meses do ano dada pela Tabela 2.20

**Tabela 2.20** Radiação solar média mensal

$x_i$ (mês)	1	2	3	4	5	6
$y_i = f(x_i)$ (kWh)	5.42	5.42	5.25	4.58	4.22	3.69
$x_i$ (mês)	7	8	9	10	11	12
$y_i = f(x_i)$ (kWh)	4.22	3.44	4.78	5.61	5.61	5.39

Verifique que para fazer um ajuste trigonométrico consideramos a solução do sistema de equações normais (2.5) para o conjunto de dados da Tabela 2.20

$$\begin{cases} a_0 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) = 4.8025 \\ a_1 = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \cos(wx_i) = 0.9080 \\ b_1 = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \sin(wx_i) = 0.1996 \end{cases} \quad (2.31)$$

Escreva a função ajuste e faça seu gráfico juntamente com os pontos dados.

# UNIDADE 3

Modelos com Equações Discretas



### 3.1 Introdução

Nesta unidade apresentaremos alguns modelos matemáticos discretos mostrando a importância da utilização de ferramentas matemáticas simples e de algumas técnicas para simulação do comportamento dinâmico de problemas do meio ambiente.

Os processos discretos são construídos passo a passo e levam em consideração os estados de um sistema dinâmico.

A matemática discreta encontra-se em várias situações de nosso dia a dia e, em diversas áreas como a teoria dos jogos, a teoria das filas, a teoria dos grafos, a criptografia, a otimização linear inteira etc.

Propomos algumas situações que envolvam problemas da dinâmica populacional, da poluição ambiental e outras formuladas com equações discretas. Mostramos que sob determinadas hipóteses obtemos a formulação e a simulação do comportamento de um sistema dinâmico ambiental e a partir das condições iniciais desencadeia um processo indicando direções adequadas a serem tomadas baseadas na validade do modelo matemático adotado.

Os modelos matemáticos discretos utilizam as equações discretas que também são conhecidas como equações de diferenças ou de recorrência.

Alguns conceitos matemáticos são essenciais para a compreensão dos modelos matemáticos tratados nesta unidade como os tópicos de progressão aritmética; progressão geométrica; funções (lineares, quadráticas, exponencial, logarítmica etc.); equações algébricas; equações discretas; inequações; inequações discretas; gráficos; matrizes; determinantes, sistemas lineares e noções de programação computacional.

Num sistema ambiental de grande interesse como a previsão da produção de um recurso natural, do crescimento populacional, da poluição ambiental etc. utilizamos os dados observados, experimentos, o pensamento lógico, racional e as formas de aplicá-lo na pesquisa para a formulação, desenvolvimento e validação do modelo considerado.

#### **Exemplo 3.1**

Consideramos a produção anual de soja no Brasil que na safra de 2007/2008 foi de 60.1 milhões de ton (toneladas) e em 2008/2009 de 64 milhões de ton. Embora a safra tenha crescido exponencialmente num certo período, poderíamos fazer uma hipótese de que a partir desse momento, devido as limitações de áreas



agricultáveis a quantidade de soja será igual a média aritmética da soja produzida nos dois anos anteriores.

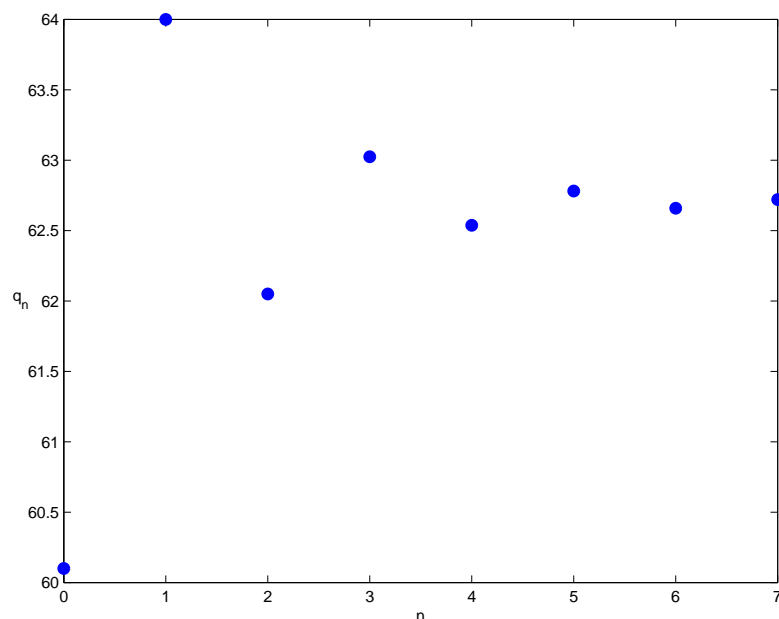
Qual equação nos leva a determinar a quantidade de soja produzida nas safras seguintes como em 2009/2010? E na safra de 2010/2011? Se esta hipótese se mantiver ao longo dos anos qual será a quantidade de soja que teremos na safra de 2029/2030, ou mais geralmente, qual será a produção numa safra  $n$  depois de 2008/2009?

De fato, representando na linguagem matemática por  $q_n$  a quantidade de toneladas de soja produzida na safra  $n$ , teremos que  $q_{n+1}$  e  $q_{n+2}$  representam as respectivas quantidades de toneladas de soja produzidas na safra  $n+1$  e  $n+2$ .

Pela hipótese considerada, um modelo matemático simples pode ser gerado por uma equação discreta linear de segunda ordem como segue:

$$q_{n+2} = \frac{q_{n+1} + q_n}{2}$$

com as condições iniciais  $q_0 = 60.1$  ton na safra  $n = 0$  correspondente a 2007/2008 e,  $q_1 = 64$  ton na safra  $n = 1$  correspondente ao ano 2008/2009.



**Figura 3.1:** Quantidade de soja produzida

Calculando os valores de acordo com o modelo adotado, obtemos

$$q_2 = \frac{q_1 + q_0}{2} = 62.05$$

$$q_3 = \frac{q_2 + q_1}{2} = 63.025 \text{ etc., conforme mostra a Figura 3.1.}$$

Abordamos ainda modelos que estudam a dispersão de poluentes num rio

e numa represa, para análise de ecossistema e do aproveitamento da água, indispensável para nossa sobrevivência.

Os modelos de poluição de rios, lagos e represas com especial referência ao aporte de compostos químicos ricos em fósforo ou nitrogênio numa massa d'água provocando, por exemplo, um aumento excessivo de algas e a diminuição do oxigênio, têm sido investigados do ponto de vista matemático e pela análise da qualidade da água, tratando mais especificamente de modelos de eutrofização.

### 3.2 Modelo discreto de poluição de uma represa

Para modelar um problema do mundo real começamos com o estudo da modelagem matemática de uma situação bem simples. Supomos que uma determinada represa, abastecida por um riacho de águas límpidas com vazão constante, receba acidentalmente uma quantidade de poluentes, proveniente, por exemplo, de um vazamento de uma indústria local.

Num primeiro modelo simplificado podemos desprezar a entrada de água limpa por outros meios como água de chuva etc. e que também não ocorre a degradação da poluição ou evaporação considerável na represa.

Com estas hipóteses simplificadoras a quantidade de água poluída acumulada  $Q_a$  num instante  $n + 1$  é igual à quantidade de água poluída acumulada  $Q_a$  num instante  $n$  mais a quantidade de água poluída  $Q_e$  que entra na represa menos a quantidade de água poluída  $Q_s$  que sai durante o período considerado, conforme Figura 3.2,



**Figura 3.2:** Balanço

No caso mais simples, obtemos uma equação de conservação, ou seja, o balanço de massa, neste caso de água, em que desprezamos possíveis reações no elemento de volume que poderiam gerar suprimentos ou perdas.

Assim, num instante  $t = n + 1$  obtemos

$$Q_a(n + 1) = Q_a(n) + Q_e(n) - Q_s(n)$$

Então, a quantidade de poluição acumulada  $Q_a(n + 1)$  no instante  $n + 1$

é igual a quantidade de poluição acumulada no instante anterior  $Q_a(n)$  mais a quantidade de poluição  $Q_e(n)$  que entrou menos a quantidade de poluição  $Q_s(n)$  que saiu naquele período

Supondo que a represa recebeu uma carga de poluentes e a despoluição ocorra naturalmente pela vazão de sua água poluída com a reposição simultânea de água limpa ou por degradação, várias questões podem ser formuladas para explorar o problema. Por exemplo, como será a evolução do processo de despoluição natural da represa? Quanto tempo levará para obter um nível de poluição de modo que a represa possa recuperar o seu ecossistema ou que a água possa ser tratada e aproveitada para consumo etc.? Como formular matematicamente o problema? É possível fazer uma simulação do problema?

### 3.3 Simulação de poluição numa represa

Supomos que numa represa o poluente esteja diluído homogeneamente nas suas águas e que a quantidade de poluentes diminua em função da vazão da entrada de água limpa e da saída da água poluída, de modo que podemos detectar experimentalmente que o decréscimo da poluição seja, por exemplo, de 25% num certo intervalo de tempo observado, que pode ser de um dia.

Para visualizar os efeitos da poluição numa represa podemos fazer uma simples simulação com um modelo físico. Consideramos um recipiente transparente de um litro e colocamos 90% de água limpa e 10% de um suco de cor escura para representar a quantidade de poluentes, imaginando que em cada litro de água da represa contenha 900 ml (mililitros) de água limpa e 100 ml de poluentes conforme a Figura 3.3.



**Figura 3.3:** Simulação

No recipiente, considerado como modelo físico, supomos que a poluição esteja diluída homogeneamente como na represa e que no instante inicial  $t = 0$ , representando o dia em que a represa recebeu a poluição, temos os 100 ml de poluentes em cada litro de água da represa.

Supondo que, após um intervalo de tempo, digamos um dia, a poluição diminuiu 25%, retiramos uma quantidade de água poluída correspondente a um copo de 250 ml da solução total, e restarão 75% da quantidade original de poluentes. Para simular a entrada de água limpa recolocamos 250 ml de água limpa no recipiente. Repetindo o processo, do mesmo modo que ocorre no segundo dia, retiramos novamente 250 ml da solução restante, correspondente a 25% da poluição total que havia depois de um intervalo de tempo e novamente acrescentamos 250 ml de água limpa.

A sequência da quantidade de poluentes ml (mililitros) por l (litro) d'água pode ser escrita a partir de

$$P(0) = 100 \text{ ml}$$

que é a poluição inicial no momento de lançamento de efluentes na represa e após um intervalo de tempo, dois intervalos de tempo etc. obtemos passo a passo a sequência

$$P(1) = 100 \times (1 - 0.25) \text{ ml} = 75 \text{ ml}$$

$$P(2) = 75 \times (1 - 0.25) \text{ ml} = 56.25 \text{ ml}$$

$$P(3) = 56.25 \times (1 - 0.25) \text{ ml} = 42.1875 \text{ ml}$$

$$P(4) = 42.1875 \times (1 - 0.25) \text{ ml} = 31.6406 \text{ ml}$$

⋮

$$P(10) = 7.508468628 \times (1 - 0.25) \text{ ml} = 5.631351471 \text{ ml}$$

$$P(11) = 5.631351471 \times (1 - 0.25) \text{ ml} = 4.223513603 \text{ ml}$$

e para o n-ésimo intervalo de tempo temos a seguinte equação discreta:

$$P(n) = P(n - 1) \times (1 - 0.25), \quad n \in \mathbb{N} \quad (3.1)$$

A solução da equação discreta (3.1) é a sequência  $\{P_n\}$  de valores reais:

$$100, 75, 56.25, 42.1875, 31.6406, \dots$$

A sequência  $\{P_n\}$  que representa a quantidade de poluentes na represa depois de transcorrido n intervalos de tempo, ou seja, a solução da equação discreta (3.1) é dada pelos termos da progressão geométrica de termo inicial  $P(0) = 100$  e razão  $q = 0.75 < 1$ , portanto decrescente.

$$P(n) = 100 \times (1 - 0.25)^n = 100 \times 0.75^n \quad (3.2)$$

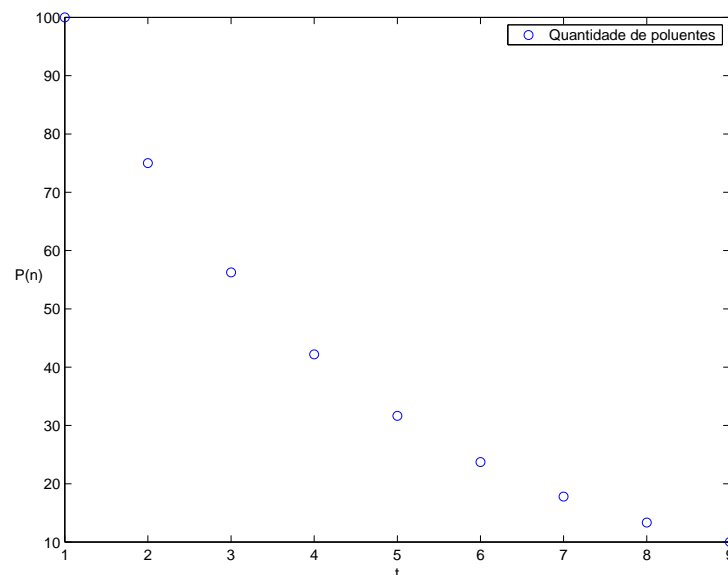
É importante o acompanhamento da evolução da quantidade de poluentes para elaborar e validar um modelo matemático.

Lembremos que as quantidades de poluentes medidas  $P(n)$ , em mililitros, da simulação anterior podem ser tabeladas em cada intervalo observado, como a exibida na Tabela 3.1 a seguir.

**Tabela 3.1** Registro dos dados obtidos pelo modelo de poluição

n	0	1	2	3	4	5	...	N
$P(n)$ (ml)	100	75	56.25	42.1875	31.640625	23.73046875	...	?

Alguns modelos matemáticos ambientais discretos necessitam ou tornam-se mais fáceis de serem explorados quando utilizamos as ferramentas numéricas e métodos computacionais adequados. Podemos utilizar softwares computacionais como o Octave<sup>1</sup>, apresentado na Unidade 7, para explorar o modelo, gerar a sequência  $\{P_n\}$  para desenhar o gráfico da solução do problema anterior como na Figura 3.4.



**Figura 3.4:** Tempo  $\times$  quantidade de poluentes

Para estabelecer o modelo matemático anterior partimos de alguns dados observados tais como: a quantidade inicial de poluentes (concentração) em um litro de água, a taxa média de decaimento da quantidade de poluentes e uma hipótese sobre a continuidade do decaimento na mesma razão. Para validação do modelo, podemos observar na simulação que a cor da água com o suco vai se tornando cada vez mais clara, e a quantidade de suco no recipiente vai diminuindo, assim como a poluição na represa deverá diminuir de acordo com o modelo.

<sup>1</sup> <http://www.gnu.org/software/octave>

Em modelos matemáticos de sistemas dinâmicos aparecem as razões de proporcionalidade, as taxas de variações como taxa de decaimento ou de crescimento, velocidade, aceleração, crescimento ou decaimento relativo, velocidade de reação etc. A principal característica da modelagem matemática de um sistema dinâmico é obter a relação entre as quantidades envolvidas, as razões de proporcionalidade e as suas taxas de variações para chegarmos à evolução do mesmo.

### Exemplo 3.2

A taxa de variação relativa da quantidade de poluentes do problema anterior com relação a uma unidade de tempo é igual a

$$r = \frac{p_1 - p_0}{p_0} = \frac{75 - 100}{100} = \frac{56.25 - 75}{75} = \dots = -0.25 = -25\%$$

O sinal negativo indica que a quantidade de poluentes está decaindo.

No modelo de simulação de poluição abordado supomos que a quantidade de poluentes num instante é proporcional a quantidade de poluentes no instante anterior.

Ao analisarmos a Figura 3.4 podemos questionar qual é o tempo necessário para que um certo limite da quantidade de poluentes seja aceitável na água da represa.

Tomamos como exemplo, uma ETA (Estação de Tratamento e Abastecimento de Água) que deseja tratar a água da represa considerada a fim de poder distribuí-la para a população.

Para compensar o tratamento de purificação, só é viável iniciar a operação a partir de um limite máximo aceitável da quantidade de poluentes contida nela.

Supondo que a concentração (ou porcentagem) da quantidade inicial de poluentes admitida para iniciar o tratamento deve ser menor do que 0.05, ou seja, 5% do total da poluição inicial, quantos dias após o acidente a ETA poderia voltar a captar água?

De fato, se cada litro de água da represa contém inicialmente 100 ml de poluentes, podemos determinar o instante em que a poluição diminui para menos de 5 ml por litro de água utilizando uma tabela gerada pelo modelo, analisando detalhadamente a solução gráfica ou, calculando o instante utilizando a solução (3.2) que é o próprio termo geral da progressão geométrica, resolvendo a inequação algébrica:

$$P(n) < 5 \quad \Leftrightarrow \quad 100 \times (0.75)^n < 5 \quad \Leftrightarrow \quad (0.75)^n < 0.05 \quad (3.3)$$

Aplicando a função logaritmica em ambos os lados da inequação exponencial (3.3) a desigualdade se mantém, já que a função logaritmica é crescente e, utilizando as propriedades do logaritmo, obtemos:

$$n \log(0.75) < \log(0.05) \Leftrightarrow n < \frac{\log(0.05)}{\log(0.75)} \approx 10.4133436,$$

donde segue que  $n < 10.4133436$  dias.

Portanto, a empresa poderia voltar a captar água para tratamento cerca de 10 dias e 10 horas após o acidente.

Se a cidade tivesse somente esta represa para abastecimento local, como ficaria a população dependente da água neste período?

Se algumas cidades vizinhas pudessem ceder uma parte da quantidade de água tratada para ser transportada por caminhões tanques com custos distintos de cada uma delas, teríamos um problema de otimização dos custos com o transporte, problema este que poderá ser abordado com o conteúdo da Unidade 6 em que tratamos modelos ambientais com otimização linear.

Isto nos mostra a importância de trabalharmos com modelos matemáticos ambientais e nos mostra que mesmo com ferramentas matemáticas simples podemos obter uma estimativa dos resultados de uma catástrofe ambiental.

Os modelos ambientais que tratam de variáveis discretas, como esse da poluição de uma represa, nos mostram a importância de um estudo mais detalhado das equações discretas.

### 3.4 Equações discretas

As equações discretas são encontradas especialmente na resolução numérica de equações diferenciais discretizadas, já que o domínio do tempo (e/ou espaço) é discretizado, ou seja, a variável dependente é determinada numericamente em alguns pontos discretos do seu domínio.

No modelo da simulação da poluição da represa visto anteriormente obtivemos a equação discreta linear de primeira ordem  $P_n = 0.75 P_{n-1}$ , em que  $n = 1, 2, 3, \dots$  com a condição inicial  $P(0) = 100$ .

Consideramos o conjunto dos números naturais  $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$  e  $\mathbb{X}$  um subconjunto do conjunto dos números reais  $\mathbb{R}$ .

Uma **equação discreta** de ordem  $k$  é definida por:

$$x(n) = f(n, x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_{n-k}), \quad k, n \in \mathbb{N} \quad (3.4)$$

em que a incógnita é uma função inteira  $x(n)$  e

$$x : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{X}$$

e  $f$  é uma função

$$f : \mathbb{N} \times \mathbb{X}^k \rightarrow \mathbb{X}.$$

Assim, uma equação discreta é uma relação entre os termos de uma sequência, e para simplificar a notação escrevemos  $x(n) = x_n$ .

Uma equação discreta realmente tem característica recursiva e, encontrar uma solução de uma equação discreta do tipo (3.4) para um determinado valor de  $n$ , significa calcularmos o valor de  $x_i$  para todos os valores de  $i \leq n$ .

A solução da equação discreta de primeira ordem

$$x_n = f(n, x_{n-1})$$

com uma condição inicial  $x(0) = x_0$ , é uma sequência  $\{x_n\}$ ,  $n \in \mathbb{N}$  cujos elementos são

$$x_0, x_1 = f(1, x_0), x_2 = f(2, x_1), \dots$$

No exemplo dado pela equação (3.1) temos que  $x_n = f(n, x_{n-1}) = 0.75 x_{n-1}$ .

Podemos afirmar que uma equação discreta representa um sistema dinâmico discreto que, de um modo geral, representa o conjunto de todos os estados possíveis conhecendo uma lei ou função que determina o estado atual em termos do(s) anterior(es).

Como veremos mais adiante, existem algumas técnicas que permitem calcular a forma geral do termo de ordem  $n$  sem ter que calcular todos os termos anteriores. No caso do exemplo da equação (3.1), o termo geral é escrito como  $P_n = (0.75)^n P_0$ .

As equações discretas podem ser mais gerais, no entanto, em modelagem matemática aparecem em alguns casos específicos, como uma equação discreta **autônoma** definida por

$$x_n = f(x_{n-1}), n \in \mathbb{N}$$

em que a função  $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$  não depende explicitamente de  $n$ .

Neste caso, a solução desta equação discreta autônoma pode ser escrita



como uma sequência  $\{x_n\}$  cujos elementos são:

$$\begin{aligned}x_0, \\x_1 &= f(x_0), \\x_2 &= f(x_1) = f(f(x_0)) = f^{(2)}(x_0), \\x_3 &= f(x_2) = f(f(x_1)) = f(f(f(x_0))) = f^{(3)}(x_0), \\&\vdots \\x_n &= f^{(n)}(x_0)\end{aligned}$$

Observemos que  $f^{(2)}(x_i)$  representa a função composta de  $f$  com ela mesma aplicada no ponto  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , ou seja,  $(f \circ f)(x_i) = f(f(x_i)) = f^{(2)}(x_i)$  para todo  $x_i$  e  $f(x_i)$  no domínio de  $f$ .

### Exemplo 3.3

Uma aplicação de equação discreta autônoma é a equação  $x_n = q x_{n-1}$ , com  $n \in \mathbb{N}$  e  $q$  uma constante real não nula.

A solução desta equação autônoma com uma condição inicial  $x_0$  é uma sequência  $\{x_n\}$  conhecida como **Progressão Geométrica** de razão  $q$ , cujos elementos são:

$$\begin{aligned}x_0, \\x_1 &= q x_0, \\x_2 &= q x_1 = q^2 x_0, \\x_3 &= q x_2 = q q^2 x_0 = q^3 x_0 \\&\vdots\end{aligned}$$

Escrevendo  $x_n$  em função de  $n$  e  $x_0$  obtemos

$$x_n = q^n x_0, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Esta é uma representação da equação discreta em que a expressão do termo geral  $x_n = g(n)$ ,  $n \in \mathbb{N}$  pode ser escrita diretamente em função da variável  $n$ .

No modelo da simulação da poluição da represa anterior obtivemos a equação discreta  $P_n = 0.75 P_{n-1}$ ,  $n \in \mathbb{N}$  com termo inicial  $P_0 = 100$ , cuja solução é uma progressão geométrica decrescente de razão  $q = 0.75$ , que em função de  $n$  é dada por

$$P_n = 100 \times (0.75)^n$$

Nesta forma, chamamos esta equação discreta de **funcional**, pois  $P_n$  depende apenas de  $n$ .

Uma equação discreta funcional do tipo da progressão geométrica anterior, em que a razão  $0 < q < 1$ , pode representar vários modelos simples de de crescimento geométrico como o decaimento de um elemento químico radioativo, decaimento da quantidade de poluentes no ar, num rio ou no solo, decaimento de temperatura, decaimento de drogas no organismo etc.

Na equação do exemplo 3.3 se a taxa  $q > 1$ , a sequência solução é uma progressão geométrica crescente e pode representar o crescimento de uma população humana ou de outros indivíduos, de poluição ou de recursos naturais.

### 3.5 Métodos de resolução de equações discretas lineares

Para obter a solução de uma equação discreta linear podemos utilizar os métodos de resolução teórico, numérico ou gráfico dependendo do interesse e do resultado que queremos mostrar.

#### Método teórico

Para resolver as equações discretas pelo método teórico procuramos transformar a equação discreta numa **equação funcional** e obter os valores da sequência real  $\{x_n\}$ :

$$x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$$

em função de  $n$  e do valor inicial  $x_0$ .

Observe no Exemplo 3.3, a equação discreta definida por  $x_n = q x_{n-1}$ ,  $n \in \mathbb{N}$  em que  $q$  é uma constante real não nula com a condição inicial  $x_0$  que de fato  $x_n = q^n x_0$  é a sua solução.

Para verificar que  $x_n = q^n x_0$  satisfaz identicamente a equação (3.3) substituímos  $x_n = q^n x_0$  nela obtendo a identidade:

$$x_n = q x_{n-1}, \quad q^n x_0 = q q^{n-1} x_0 \Leftrightarrow q^n x_0 = q^n x_0$$

Por outro lado, um modo de resolver uma equação discreta linear deste tipo é análogo ao processo de resolução de uma equação diferencial ordinária (BOYCE & DIPRIMA, 1999).

De fato, para resolvermos uma equação discreta do tipo  $x_n = q x_{n-1}$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , em que  $q$  é uma constante não nula, podemos supor que esta tenha uma solução geral do tipo potência

$$x_n = \lambda^n \tag{3.5}$$

com o parâmetro real  $\lambda$  não nulo, caso contrário, a solução seria nula.

Substituindo na equação discreta  $x_n = q x_{n-1}$ , obtemos uma **equação característica** ou **equação auxiliar** associada como segue:

$$\lambda^n = q \lambda^{n-1} \Leftrightarrow \lambda^{n-1} (\lambda - q) = 0$$

com duas possíveis soluções  $\lambda = 0$  e  $\lambda = q$ .

E, como  $\lambda \neq 0$ , temos que  $\lambda = q$ . Além disso, como a equação discreta é linear, se  $q^n$  é uma solução geral, então  $x_n = c q^n$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  também é uma solução geral em que  $c$  é uma constante.

Esta constante pode ser determinada conhecendo-se um valor inicial  $x_0$ . De fato, fazendo  $n = 0$ , obtemos  $x_0 = c q^0 \Rightarrow x_0 = c$  e, portanto, a solução de  $x_n = c q^n$  torna-se:

$$x_n = x_0 q^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

### Exemplo 3.4

Consideremos agora a equação discreta linear de segunda ordem

$$x_{n+2} - 10.2 x_{n+1} + 2 x_n = 0$$

cujas equação característica associada, obtida ao substituirmos  $x_n = \lambda^n$  é dada por:

$$\lambda^{n+2} - 10.2 \lambda^{n+1} + 2 \lambda^n = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 - 10.2 \lambda + 2 = 0$$

Como supomos  $\lambda \neq 0$ , a equação característica anterior é facilmente reconhecida, uma vez que seus coeficientes são exatamente os coeficientes da equação discreta quando substituímos  $x_n = \lambda^n$ .

As suas duas soluções são  $\lambda_1 = 0.2$  e  $\lambda_2 = 10 > 1$ .

Segue que a solução geral da equação discreta é

$$x_n = c_1 0.2^n + c_2 10^n$$

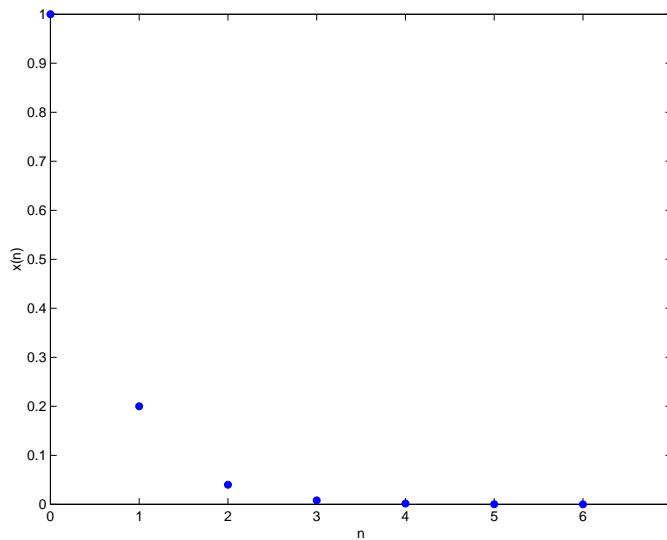
para  $n = 1, 2, 3, \dots$  com  $c_1$  e  $c_2$  constantes.

Com as condições iniciais  $x_0 = 1$  e  $x_1 = 0.2$ , substituindo na solução geral, obtemos o sistema de equações lineares:

$$\begin{cases} x_0 = a_1 0.2^0 + a_2 10^0 \Leftrightarrow 1 = a_1 + a_2 \\ x_1 = a_1 0.2^1 + a_2 10^1 \Leftrightarrow 0.2 = 0.2 a_1 + 10 a_2 \end{cases} \quad (3.6)$$

cujas solução é  $a_1 = 1$  e  $a_2 = 0$ , logo a solução da equação discreta é dada por

$$x_n = 0.2^n$$



**Figura 3.5:** Solução Estável

conforme mostra a Figura 3.5.

Um fato importante a considerar na solução de um determinado problema modelado por uma equação discreta é a **estabilidade** da solução.

De fato, considerando uma pequena perturbação dos valores iniciais para a equação discreta linear homogênea anterior, como por exemplo,  $x_0 = 1.000001$  e  $x_1 = 0.20001$ , teremos agora a solução perturbada

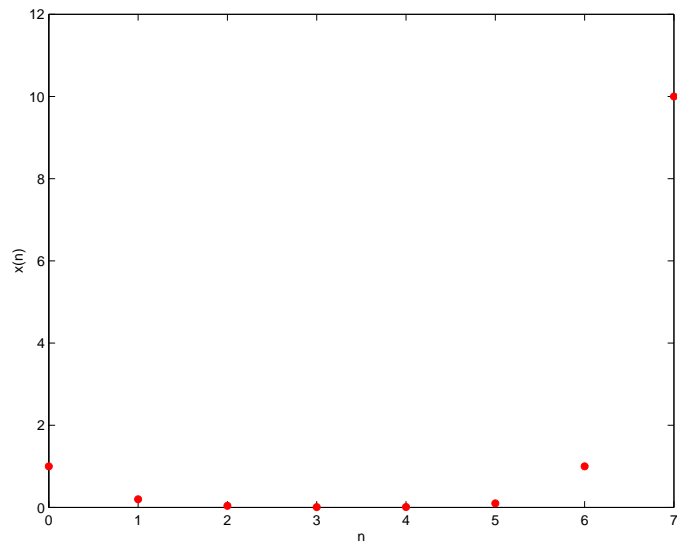
$$x_n = 0.2^n + 0.1 \times 10^{-5} \times 10^n$$

representada na Figura 3.6 de modo que para valores grandes de  $n$ , a solução obtida difere bastante da anterior e torna-se divergente.

Dizemos que a solução da equação discreta linear de ordem  $n$  que envolve as raízes  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  de seu polinômio característico  $p(\lambda) = 0$  é **estável** (ou bem condicionada numericamente) se todas as suas raízes  $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, n$  da equação característica associada são tais que

$$|\lambda_i| < 1, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Esse fato é muito importante quando a equação provem de um modelo discreto ou da discretização de uma equação diferencial em que estamos interessados na convergência da solução numérica.



**Figura 3.6:** Solução instável

### Método numérico

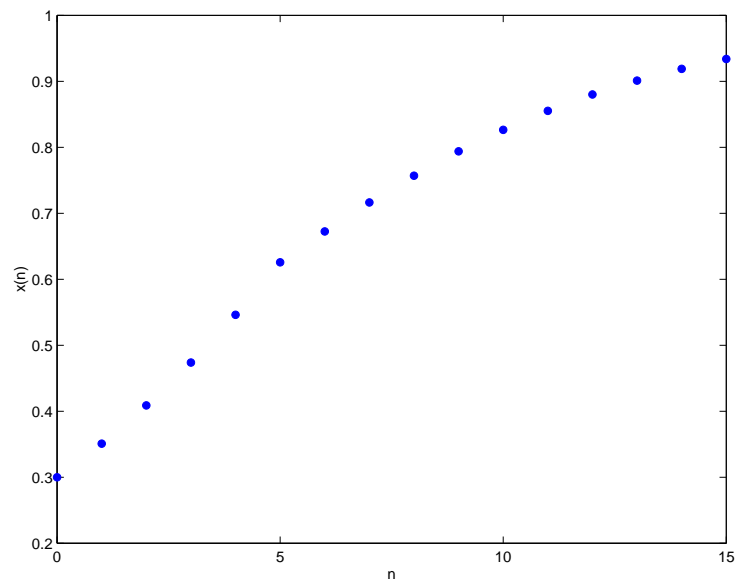
O método numérico para resolução de equações discretas consiste em obter os termos da sequência solução conhecendo-se uma ou mais condições iniciais.

### Exemplo 3.5

Dada a equação discreta logística

$$x_n = x_{n-1} + 0.2 x_{n-1} \left(1 - \frac{x_{n-1}}{2}\right)$$

com a condição inicial  $x_0 = 0.3$ .



**Figura 3.7:** Solução logística

A solução numérica pode ser obtida à medida que fazemos as iterações e obtemos a sequência:

$$x_0 = 0.3$$

$$x_1 = x_0 + 0.2 x_0 \left(1 - \frac{x_0}{2}\right) = 0.3 + 0.2 \times 0.3 \times \left(1 - \frac{0.3}{2}\right) = 0.3510$$

e, da mesma forma, obtemos os demais termos da sequência solução

$$x_2 = 0.4089, x_3 = 0.4739, x_4 = 0.5463, x_5 = 0.6257 \dots$$

Neste caso, uma calculadora ou um simples programa no computador facilita a obtenção dos valores da sequência solução.

### Método gráfico

O método gráfico representa os valores da função discreta  $x_n$  num sistema de coordenadas cartesianas, escolhendo a variável natural  $n$  no eixo das abscissas (horizontal) e a variável dependente  $x_n$  no eixo das ordenadas (vertical) conforme as figuras 3.5, 3.6 e 3.7.

Vale lembrar que o Método de Newton (ARENALES & SALVADOR, 2009) para o cálculo numérico de zeros de uma função contínua e derivável  $f(x)$  é dado por uma equação discreta

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})} \quad (3.7)$$

com  $k = 1, 2, 3 \dots$  em que calculamos uma aproximação  $x_k$  da raiz da equação  $f(x) = 0$  utilizando uma aproximação inicial  $x_0$ , os valores de  $f$  e os de sua derivada  $f'$  (quando distinta de zero) calculados no ponto  $x_{k-1}$ . Além disso, os problemas de valores iniciais e ou de contornos envolvendo equações diferenciais e condições iniciais e ou de contorno que não possuem solução analítica podem ser transformados em equações discretas para obtenção da solução numérica conforme veremos nas próximas unidades 4 e 5.

### Exemplo 3.6

O Método de Newton para calcular a raiz quadrada de um número  $a$ ,  $a > 0$ , ou seja, o cálculo do zero da função correspondente  $f(x) = x^2 - a$  já era conhecido pelos babilônios e, às vezes, é atribuído a Arquitas (428 – 365 a.C.).

Verifique que o cálculo da  $\sqrt{16}$  pelo Método de Newton nos leva a um processo iterativo dado pela equação discreta

$$x_n = \frac{1}{2} \left( x_{n-1} + \frac{16}{x_{n-1}} \right)$$

Usando a condição inicial  $x_0 = 3$  verifique, por exemplo, quantas iterações são necessárias para obter a raiz  $\bar{x} = 4$  com precisão  $10^{-3}$ . Esboce o gráfico da sequência obtida no plano  $n \times x_n$  com os cinco primeiros valores. Utilizando agora a condição inicial negativa, digamos,  $x_0 = -3$ . O que podemos concluir sobre o valor encontrado?

Observe que alguns modelos matemáticos podem levar a várias soluções, sendo que algumas não fazem sentido para o problema abordado. Assim, é de grande importância fazer uma análise dos resultados para verificar qual solução é realmente válida dentre as várias fornecidas pelo método matemático.

Dada uma função real  $f$  definida num intervalo fechado  $I = [x_1, x_2] \subset \mathbb{R}$ , se existe um ponto  $\alpha$  em seu domínio  $I$  tal que  $f(\alpha) = \alpha$ , dizemos que  $\alpha$  é um **ponto fixo** de  $f$ .

O conjunto definido por  $x_0, f(x_0), f^2(x_0), \dots$  é chamado de **órbita** de  $x_0$ .

Observe que a órbita de um ponto fixo  $\alpha$  de  $f$  é a sequência constante  $\{\alpha, f(\alpha) = \alpha, \dots\}$

Dizemos que  $\bar{x}$  é um **ponto de equilíbrio** ou **ponto fixo** de uma equação discreta se

$$x_n = \bar{x}$$

para todo  $n$  quando o valor inicial é  $x(0) = \bar{x}$ , ou seja, uma solução constante para a equação discreta.

No método gráfico de uma equação discreta autônoma

$$x_n = f(x_{n-1}), \quad n \in \mathbb{N},$$

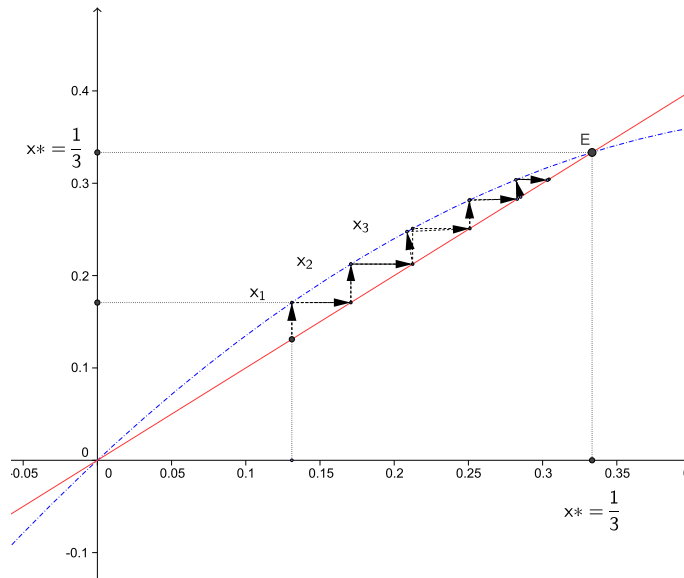
escolhemos uma condição inicial  $x_0$  sobre a diagonal principal do sistema cartesiano  $n \times x_n$ .

Esta é uma maneira útil de visualizar a órbita de um sistema dinâmico unidimensional via iteração gráfica.

Sobrepomos o gráfico da curva  $y = f(x)$  correspondente a função iterativa e a diagonal principal sobre o mesmo gráfico.

Assim, partindo do valor inicial  $x_0$  no eixo horizontal e subindo verticalmente até encontrar um ponto de  $f(x)$  obtemos o valor  $x_1 = f(x_0)$  sobre o gráfico de  $f(x)$ . Daí, voltando ao gráfico da diagonal por um segmento de reta paralelo ao eixo horizontal encontramos o valor correspondente de  $x_1$ . Seguindo verticalmente obtemos o valor  $x_2 = f(x_1) = f(f(x_0)) = f^{(2)}(x_0)$  sobre o gráfico de  $f$  e voltamos ao gráfico da diagonal por um segmento de reta paralelo ao eixo horizontal obtendo

$x_3$  e, assim sucessivamente, obtemos vários pontos da sequência solução da equação discreta, órbita de  $x_0$ .



**Figura 3.8:** Teia de aranha e o ponto de equilíbrio na diagonal

O resultado é uma configuração conhecida como teia de aranha, mostrada na Figura 3.8, ligando os pontos  $(x_0, 0)$ ,  $(x_0, f(x_0)) = (x_0, x_1)$ ,  $(x_1, x_1)$ ,  $(x_1, f(x_1)) = (x_1, x_2)$  etc.

Se a equação discreta tiver um ponto de equilíbrio  $\bar{x}$  de modo que  $\bar{x} = x_n = f(x_{n-1})$  para algum  $n$ , este ponto de equilíbrio estará sobre a diagonal principal do sistema cartesiano  $x_n \times f(x_n)$ .

O conjunto definido por  $x_0, f(x_0), f^2(x_0), \dots$  solução da equação autônoma é chamado de **órbita** do ponto  $x_0$ .

Uma solução de equilíbrio de uma equação discreta está na interseção do gráfico de  $y = x_n$  com a reta  $y = x$ .

Seja  $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}$  e uma função contínua  $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$  e  $x_n = f(x_{n-1}), n \in \mathbb{N}$ . Se existe um inteiro  $m > 1$  tal que

$$f^{(m)}(a) = a$$

dizemos que  $a \in \mathbb{X}$  é um **ponto periódico** da função  $f(x)$ .

O menor inteiro positivo  $m$  tal que isso acontece é chamado período principal do ponto  $a$ . Evidentemente, os pontos fixos de uma função são pontos periódicos de período 1.

Assim, a órbita de uma função  $f(x)$  por um ponto  $x = a$  de período  $m$  é a



sequência

$$\begin{aligned} & a \\ & x_1 = f(a) \\ & x_2 = f(x_1) = f(f(a)) = f^{(2)}(a) \\ & \vdots \\ & x_{m-1} = f^{(m-1)}(a) \end{aligned}$$

Uma solução  $x_n$  de uma equação discreta é chamada periódica se para algum inteiro  $m$ ,  $x_{n+m} = x_n$  para todo  $n$ .

O menor inteiro  $m$  tal que esta relação ocorre é denominado período da solução  $x_n$ .

### Exemplo 3.8

Consideremos a equação discreta linear homogênea de segunda ordem,

$$x_{n+2} = x_n$$

para  $n = 1, 2, \dots$ . Ela é incompleta uma vez que não aparece o termo de ordem  $n + 1$ .

Podemos resolvê-la separadamente para  $n$  par e para  $n$  ímpar. Conhecendo-se  $x_0$  obtemos os termos de ordem par  $x_2, x_4, \dots$  que são todos iguais a  $x_0$ . Resta o valor arbitrário para  $x_1$  que é igual a todos os termos de ordem ímpar. Uma vez conhecido também o valor de  $x_1$  obtemos toda a sequência solução.

Assim, especificando os valores de  $x_0$  e  $x_1$  obtemos a única solução, que pode ser escrita como

$$x_n = \left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right) + (-1)^n \left(\frac{x_0 - x_1}{2}\right)$$

Se  $x_0 = -2$  e  $x_1 = 2$ , a solução é dada por  $x_n = -2 \times (-1)^n$  para todo  $n \in \mathbb{N}$  pois:

$$x_{n+2} = -2 \times (-1)^{n+2} = -2 \times (-1)^n \times (-1)^2 = -2 \times (-1)^n = x_n$$

Esta solução tem período 2, pois os termos de ordem par são iguais:  $x_0 = x_2 = x_4 = \dots = -2$ . Da mesma forma, os termos de ordem ímpar são todos iguais:  $x_1 = x_3 = x_5 = \dots = 2$ . Observe que embora  $x_0 = x_4$ , 2 é o menor número natural em que isto acontece, portanto 2 é o período da solução de  $x_n$ .

### 3.6 Crescimento geométrico de uma população

O estudo da dinâmica populacional que visa a descrição do número de indivíduos de uma população ao longo do tempo é uma variável discreta, embora em certas circunstâncias possa ser considerada contínua, e também um fator de grande importância para o estudo demográfico dos impactos ambientais que vem ocorrendo em nosso planeta.

Para formulação de hipóteses para elaboração de um modelo matemático que descreva a evolução de uma população no tempo, a partir de um dado inicial, são extremamente importantes as informações biológicas sobre as taxas de variação da população.

O objetivo de um modelo matemático populacional discreto é determinar uma função discreta

$$p : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$$

em que  $p(n)$  representa o número total de indivíduos da população no instante  $n$ , um número natural que, por exemplo, pode representar o número de anos (meses ou dias).

Quando uma população animal ou vegetal vive num ambiente favorável, livre de influências de outras espécies ou fatores que limitem o seu crescimento contendo as condições climáticas favoráveis, recursos ilimitados etc. ocorre um crescimento exponencial com uma taxa de crescimento específico (potencial biótico da população) que depende de alguns fatores como a estrutura etária e as condições do meio em que a população se encontra.

O economista britânico Thomas Malthus (1766 – 1834) acreditava que o excesso populacional era a causa de todos os males da sociedade. Acreditava que enquanto a produção de alimentos para subsistência de uma espécie se dava numa progressão aritmética, o crescimento populacional dela ocorria de acordo com uma progressão geométrica.

Em 1798, ele propôs uma hipótese simples de crescimento para uma população supondo que, a taxa de variação da população era proporcional a quantidade de indivíduos da população existente em cada instante, ou seja, considerou a hipótese biológica de que o número de nascimento menos o número de mortes era proporcional ao número de indivíduos da população.

Inicialmente consideramos o crescimento discreto de uma população de determinada espécie para períodos limitados de tempo e sem restrições. Conside-

ramos ainda que o número de nascimentos de indivíduos de uma população num ano é uma fração  $\nu$  ( $\nu > 0$ ) e o número de mortos neste mesmo período, uma fração  $\mu$  ( $\mu > 0$ ) da população existente  $p(n)$ .

Para estabelecer uma equação discreta representando a população  $p(n+1)$  num instante  $n+1$  (ano) em função da população  $p(n)$  no instante  $n$  (ano anterior), dos parâmetros  $\nu$  e  $\mu$  e da população inicial  $p(0)$  no instante correspondente a contagem do tempo  $n=0$ , podemos considerar que o número de nascimentos e o número de mortos dependam do tamanho do intervalo de tempo  $\Delta n$  considerado e do tamanho da população  $p(n)$ .

Escrevemos o número de nascimentos igual a  $\nu p(n) \Delta n$ , e o número de mortes igual a  $\mu p(n) \Delta n$ .

Assim, é natural propor uma equação de balanço para a população nos mostrando que a taxa de crescimento populacional simples no intervalo de tempo  $\Delta n$  é igual ao número de nascimento menos o número de mortes

$$p(n + \Delta n) - p(n) = \nu p(n) \Delta n - \mu p(n) \Delta n$$

Neste modelo representado pela equação discreta anterior é bom atentar para o fato de desprezarmos os processos de migração e emigração de indivíduos da população.

Colocando o intervalo de variação do tempo como um ano, por exemplo, temos  $\Delta n = 1$  obtemos a equação discreta para um ano  $n$  descrevendo o comportamento da população por

$$p(n + 1) = (1 + \nu - \mu) p(n)$$

Escrevendo  $1 + \nu - \mu = r$ , o modelo matemático pode ser descrito pela equação discreta:

$$p(n + 1) = r p(n) \quad (3.8)$$

em que  $n$  é o instante de tempo,  $p(n)$  é a população no instante  $n$  e  $r > 0$  é a taxa de crescimento da população, conhecida como potencial biótico.

Observemos que se  $r < 0$  teríamos um decaimento da população, ou seja o número de mortos seria maior do que o número de nascimentos.

Conhecendo-se a população  $p(0) = p_0$  num instante inicial  $t = n = 0$ , podemos determinar univocamente o número de indivíduos da população num

instante discreto  $t = n$  (dia, mês, ano etc.) De fato, escrevemos:

$$\begin{aligned} p(1) &= r p(0) \\ p(2) &= r p(1) = r r p(0) = r^2 p(0) \\ p(3) &= r p(2) = r r^2 p(0) = r^3 p(0) \\ &\vdots \\ p(n+1) &= r^{n+1} p(0) \end{aligned}$$

sequência que mostra a solução teórica da equação discreta autônoma (3.8) conhecendo-se a população inicial  $p(0) = p_0$  e o potencial biótico  $r$ .

A partir do conhecimento da evolução de uma população podemos prever vários problemas ligados aos impactos ambientais que poderão surgir, portanto, podemos indicar direções para tomada de posições que possam amenizar os impactos. Reveja, por exemplo os exercícios 3 e 4 da Unidade 1.

### Exemplo 3.9

Considerando que a população da terra no ano de 1 650 era de 600 milhões de habitantes e que ela cresceu sem restrições a uma taxa proporcional a população até o ano de 1 950, quando atingiu 2 500 milhões, podemos verificar que a taxa de crescimento relativa da população, conhecendo a população entre vários períodos de tempo, pode ser obtida resolvendo a equação discreta

$$p(n+1) = p(0) r^{n+1}$$

Como a taxa populacional bastante utilizada é a taxa de crescimento relativa  $r$  que pode ser obtida conhecendo os valores da população em dois instantes consecutivos por:

$$r = \frac{p_{n+1} - p_n}{p_n} \quad \text{ou} \quad p_{n+1} = (1 + r) p_n$$

Para calcular a taxa  $r$ , consideramos a população em dois instantes de tempo distintos como  $p(0) = 600$  e  $p(300) = 2 500$ . Assim

$$p(300) = p(0) r^{300}$$

$$2 500 = 600 r^{300}$$

$$r^{300} = \frac{2 500}{600} \Leftrightarrow 300 \ln(r) = \ln\left(\frac{2 500}{600}\right)$$

$$\ln(r) = \frac{\ln\left(\frac{2 500}{600}\right)}{300} \Leftrightarrow r \approx 0.004757054$$

Assim, a sequência

$$p(0) = 600$$

$$p(1) = (1 + r) p_0 = (1 + 0.004757054) 600 \approx 602.854$$

$$p(2) = 603.08089 (1 + 0.004757054) = 600 (1 + 0.004757054)^2 \approx 605.722$$

...

$$p(300) = (1 + 0.004757054)^{300} 600 \approx 2\,491.555$$

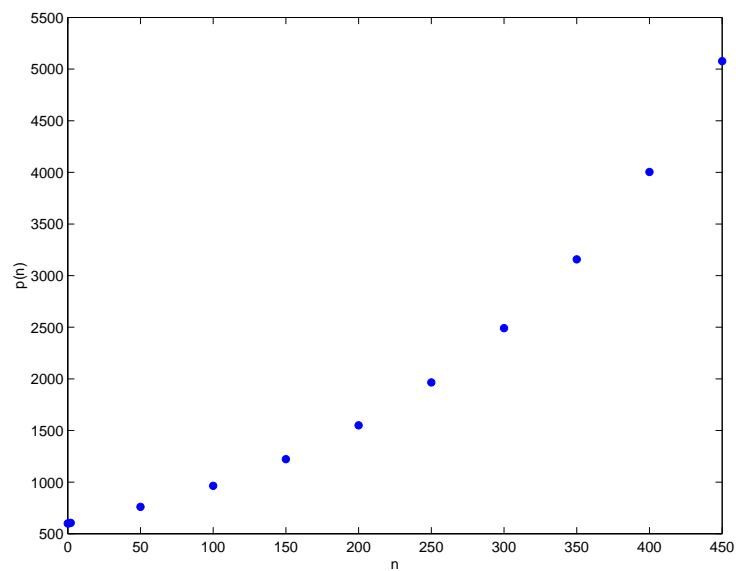
...

$$p(450) \approx 5\,077.269$$

...

$$p(550) = 600 (1 + 0.004757054)^{550} \approx 8\,160.873$$

nos dá o crescimento da população com o tempo, como mostra a Figura 3.9.



**Figura 3.9:** Crescimento populacional

Se a contagem inicial começou em 1 650, e se a população terrestre continuasse crescendo da mesma forma, a Terra teria cerca de 6 bilhões de pessoas só no ano de 2 136, e cerca de 8 bilhões de pessoas no ano de  $2\,196 = 1\,650 + 546$ , depois de 546 anos após o início da contagem.

Observamos que o valor previsto de acordo com o modelo para o ano  $n = 300$  não deu exatamente o valor dado  $p(300) \approx 2\,491$  em consequência das aproximações utilizadas para o cálculo da taxa  $r$ . Além disso, o modelo adotado foi muito simples, e muitos fatores ocorridos neste período não foram levados em conta.

### 3.7 Equações discretas não autônomas

As equações discretas não autônomas de primeira ordem são do tipo

$$x_n = f(x_{n-1}) + y(n), \quad n \in \mathbb{N}$$

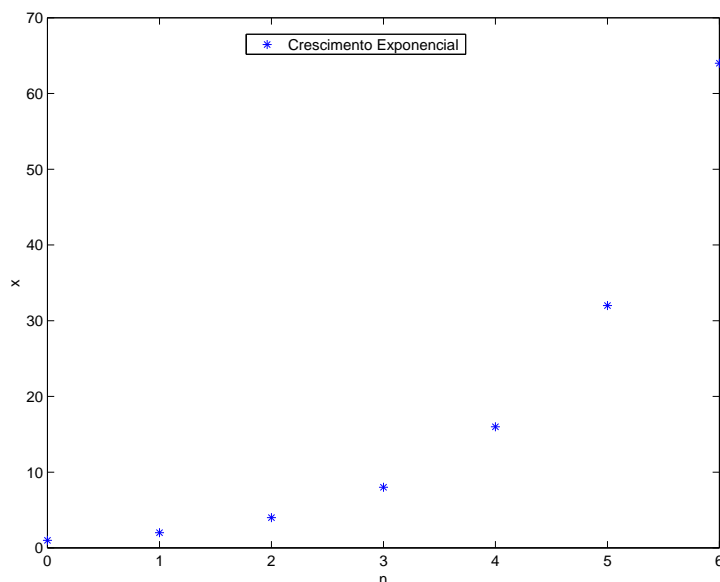
em que a função  $y$  depende somente de  $n$ , um caso particular de  $x_n = f(n, x_{n-1})$ .

#### Exemplo 3.10

Uma equação discreta **não autônoma** bem simples é a equação discreta linear de primeira ordem dada por:

$$x_{n+1} = x_n + b_n, \quad n \in \mathbb{N},$$

em que  $b_n$  é uma sequência conhecida.



**Figura 3.10:** Crescimento exponencial

Com uma condição inicial  $x_0$  obtemos a solução

$$x_0$$

$$x_1 = x_0 + b_0$$

$$x_2 = x_1 + b_1 = x_0 + b_0 + b_1$$

$$x_3 = x_2 + b_2 = x_0 + b_0 + b_1 + b_2$$

...

$$x_n = x_0 + \sum_{i=0}^{n-1} b_i, \quad n \geq 1.$$

### 3.8 Equações discretas lineares com coeficientes constantes

Uma família importante de equações é a das equações discretas lineares com coeficientes constantes de ordem  $k$ , do tipo:

$$x_n = a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2} + \dots + a_{k-1} x_{n-(k-1)} + a_k x_{n-k} + y_n, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (3.9)$$

em que  $a_i, i = 1, 2, \dots, k$  são coeficientes que independem de  $n$  e os valores  $x_i$  são conhecidos para  $i = 1, 2, \dots, n-1$ .

Se  $y_n = 0$ , temos uma equação discreta linear **homogênea** de ordem  $k$ .

O exemplo da equação (3.1) é um caso particular de (3.9) com os valores de  $k = 1, a_1 = 0.75$  e  $y_n = 0$ .

Uma sequência  $\{s_n\}$  é solução da equação discreta linear (3.9) com condições iniciais

$$s_0 = x_0 \quad s_1 = x_1, \dots, s_{k-1} = x_{k-1},$$

se

$$s_n = a_1 s_{n-1} + a_2 s_{n-2} + \dots + a_{k-1} s_{n-(k-1)} + a_k s_{n-k} + y_n,$$

para todo  $n \geq k$ .

A teoria das soluções de equações discretas lineares com coeficientes constantes é semelhante à das equações diferenciais ordinárias com coeficientes constantes (BOYCE & DIPRIMA, 1999) obtidas em termos de seus valores característicos ou autovalores.

A diferença de duas soluções quaisquer de uma equação discreta linear também é uma solução da equação homogênea correspondente.

Para encontrar uma solução de uma equação discreta linear homogênea

$$x_n - a_1 x_{n-1} - a_2 x_{n-2} - \dots - a_{k-1} x_{n-(k-1)} - a_k x_{n-k} = 0 \quad (3.10)$$

supomos que a solução é da forma  $x_n = \lambda^n$  com  $n$  inteiro e  $\lambda$  um parâmetro a ser determinado.

Assim, se  $\lambda \neq 0$ , obtemos a equação característica associada à equação discreta (3.10)

$$\lambda^n - a_1 \lambda^{n-1} - a_2 \lambda^{n-2} - \dots - a_{k-1} \lambda^{n-(k-1)} - a_k \lambda^{n-k} = 0 \quad (3.11)$$

e a solução geral

$$s_n = p_1(n) \lambda_1^n + p_2(n) \lambda_2^{n-1} + \dots - p_{r-1}(n) \lambda^{n-(r-1)} + p_r(n) \lambda^{n-k},$$

em que  $\lambda_i$  são raízes da equação (3.11) e  $p_i(n)$  são polinômios de grau menor ou igual a  $n$ ,  $i = 1, 2, \dots, r$ ,  $r \leq n$  dependendo da multiplicidade das raízes da equação característica.

**Teorema 3.1 Resultados sobre as soluções de uma equação discreta:**

Sejam  $\lambda_1^n$  e  $\lambda_2^n$  são duas soluções gerais distintas de uma equação discreta linear do tipo (3.10), então:

1.  $c \lambda_1^n$ , em que  $c$  é uma constante é uma solução de (3.10);
2. Uma combinação linear  $c \lambda_1^n + d \lambda_2^n$ , com  $c$  e  $d$  constantes também são soluções de (3.10), ou seja, vale o princípio da superposição das soluções da equação discreta homogênea.

**Prova:**

De fato, para mostrar que vale o item 1, seja  $\lambda_1^n$  uma solução de (3.10). Substituindo  $c \lambda_1^n$  na equação (3.10) obtemos

$$c\lambda_1^n - a_1c\lambda_1^{n-1} - a_2c\lambda_1^{n-2} - \dots - a_{k-1}c\lambda_1^{n-(k-1)} - a_kc\lambda_1^{n-k} = 0,$$

Desta forma, obtemos:

$$c(\lambda_1^n - a_1\lambda_1^{n-1} - a_2\lambda_1^{n-2} - \dots - a_{k-1}\lambda_1^{n-(k-1)} - a_k\lambda_1^{n-k}) = c \times 0 = 0.$$

o que mostra que  $c \lambda_1^n$  também é solução de (3.10).

Para mostrar o item 2, consideramos duas soluções  $\lambda_1^n$  e  $\lambda_2^n$  de (3.10). Desta forma, escrevemos

$$\lambda_1^n - \sum_{i=1}^k a_i \lambda_1^{n-i} = 0 \quad (3.12)$$

e

$$\lambda_2^n - \sum_{i=1}^k a_i \lambda_2^{n-i} = 0 \quad (3.13)$$

Logo, das equações anteriores (3.12) e (3.13) segue que:

$$\begin{aligned} c \lambda_1^n - \sum_{i=1}^k a_i c \lambda_1^{n-i} + d \lambda_2^n - \sum_{i=1}^k a_i d \lambda_2^{n-i} &= \\ (c \lambda_1^n - c \sum_{i=1}^k a_i \lambda_1^{n-i}) + (d \lambda_2^n - d \sum_{i=1}^k a_i \lambda_2^{n-i}) &= \\ c(\lambda_1^n - \sum_{i=1}^k a_i \lambda_1^{n-i}) + d(\lambda_2^n - \sum_{i=1}^k a_i \lambda_2^{n-i}) &= 0 \end{aligned}$$



Portanto,  $c \lambda_1^n + d \lambda_2^n$  é uma solução geral de (3.10).

Assim, as soluções de uma equação discreta linear homogênea formam um subespaço vetorial (POOLE, 2004).

Em todo espaço vetorial podemos definir a independência linear entre os vetores.

Dizemos que duas soluções  $\lambda_1^n$  e  $\lambda_2^n$  de uma equação discreta são LI (linearmente independentes) se uma combinação linear delas  $a \lambda_1^n + b \lambda_2^n = 0$ ,  $\forall n$  implica que  $a$  e  $b$  devem ser nulos.

Neste caso o determinante Casoratiano das soluções

$$C_n = \det \begin{bmatrix} \lambda_1^n & \lambda_2^n \\ \lambda_1^{n+1} & \lambda_2^{n+1} \end{bmatrix}$$

é diferente de zero para todo  $n$  se as funções  $\lambda_1^n$  e  $\lambda_2^n$  são LI.

Assim, para mostrar que duas ou mais soluções de uma equação discreta são linearmente independentes basta mostrar que o determinante Casoratiano é não nulo para um valor de  $n$ .

A equação característica associada a uma equação discreta linear de ordem  $n$  é uma equação algébrica de grau  $n$  com  $n$  raízes, que podem ser reais simples, reais com multiplicidade e/ou complexas conjugadas com ou sem multiplicidade.

### Caso 1: Raízes simples da equação característica

Sejam  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  as raízes da equação característica 3.11 associada a equação discreta linear homogênea (3.10).

Se cada  $\lambda_i$  é uma raiz simples da equação característica (3.11) associada a equação discreta (3.10), então os polinômios  $p_i(n)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  da solução geral

$$s_n = p_1(n) \lambda_1^n + p_2(n) \lambda_2^n + \dots + p_k(n) \lambda_k^n$$

assumem valores constantes  $p_1, p_2, \dots, p_n$  e, a solução geral de (3.10) torna-se:

$$x_n = p_1 \lambda_1^n + p_2 \lambda_2^n + \dots + p_k \lambda_k^n$$

### Exemplo 3.11

A equação  $x_{n+3} = 3 x_{n+2} + 6 x_{n+1} - 8 x_n$  é uma equação discreta linear de ordem 3 com coeficientes constantes, pois o termo da sequência solução depende de 3 termos anteriores.

As soluções não nulas da equação característica associada  $\lambda^{n+3} - 3 \lambda^{n+1} - 6 \lambda^{n+1} + 8 \lambda^n = 0$  são  $\lambda_1 = 1$ ,  $\lambda_2 = -2$  e  $\lambda_3 = 4$ .

Uma solução geral da equação discreta é  $x_n = c_1 + c_2 \times (-2)^n + c_3 \times 4^n$  com  $c_1, c_2$  e  $c_3$  constantes.

Considerando os valores iniciais  $x_0 = 1$ ,  $x_1 = 2$  e  $x_2 = 3$  obtemos a solução:

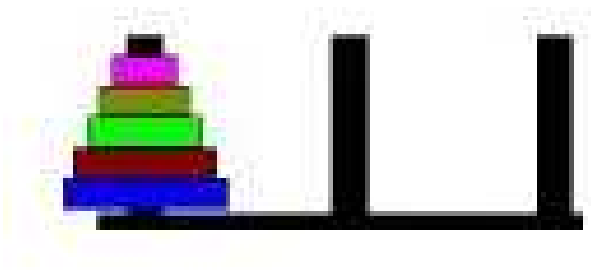
$$x_n = 1 + \frac{1}{6} \times (-2)^n + \frac{1}{6} \times 4^n$$

### Exemplo 3.12: A equação discreta da Torre de Hanói

Um problema interessante é o Jogo da Torre de Hanói estabelecido pelo matemático francês Édouard Lucas (1882) que nos leva a uma equação discreta.

O jogo consiste em um conjunto de discos com diâmetros distintos, furados no centro e encaixados no primeiro dos três pinos dispostos sobre uma base, como na Figura 3.11.

A transferência dos discos do primeiro pino para o terceiro deles deve respeitar a regra de que um disco de diâmetro menor nunca pode ficar abaixo de um disco de diâmetro maior, podendo utilizar o segundo pino como auxiliar.



**Figura 3.11:** Torre de Hanói

Conforme a Figura 3.11, vemos que a transferência dos discos do primeiro pino para o terceiro deles respeitando a regra de que um disco de diâmetro menor nunca pode ficar abaixo de um disco de diâmetro maior, devemos utilizar o segundo pino como auxiliar.

Imaginemos que temos um único disco,  $n = 1$ , logo ele pode ser movido em uma única vez do primeiro pino diretamente para o terceiro.

Se tivermos  $n = 2$  discos no primeiro pino, movemos o menor para o pino auxiliar do meio e o maior para o terceiro, em seguida, o menor do segundo para o terceiro pino, num total de 3 movimentos.

E se tivermos 3 ou mais discos no primeiro pino? Quantos movimentos no mínimo seriam necessários para transferirmos todos eles para o último disco, mantendo a regra de que um disco de diâmetro menor nunca pode ficar abaixo de um disco de diâmetro maior?

Elabore uma tabela com o número de discos e o número mínimo de jogadas para a transferência de  $n$  discos. É possível estabelecer uma equação discreta que relacione o número mínimo de jogadas  $h_j$  com o número  $j$  de discos dados  $j = 1, 2, \dots$  <sup>2</sup>

De fato, a equação discreta linear de primeira ordem com coeficientes constantes

$$h_j = 2 h_{j-1} + 1,$$

para  $j = 1, 2, \dots$

Isto se deve ao fato de que poderíamos mover  $j - 1$  discos para o segundo pino em  $h_{j-1}$  movimentos, e daí moveríamos o  $j$ -ésimo disco maior para o terceiro pino. Em seguida, moveríamos os  $j - 1$  discos do segundo para o terceiro pino com o mínimo de  $h_{j-1}$  movimentos novamente. Portanto, o número mínimo de movimentos  $h_j$  para deslocar  $j$  discos deve ser  $2 h_{j-1} + 1$ .

Esta equação discreta tem como solução uma sequência começando com o valor inicial  $h_1 = 1$  e estabelece o número mínimo de movimentos necessários para que a pilha de  $j$  discos da Torre de Hanói, em ordem decrescente de diâmetro, seja transferida do lado esquerdo para o direito utilizando uma posição intermediária dos três pinos suportes, de modo a movimentar apenas um disco de cada vez e com o cuidado de não sobrepor em nenhuma movimentação um disco maior sobre um menor conforme a regra.

A solução da equação discreta  $h_j = 2 h_{j-1} + 1$  é dada por  $h_j = 2^j - 1$ , em que  $j = 1, 2, \dots$  é o número mínimo de discos utilizados no jogo da Torre de Hanói com  $j$  discos.

De fato, podemos resolver a equação escrevendo cada termo do segundo

---

<sup>2</sup><http://www.ime.usp.br/leo/imatica/programas/hanoi/index.html>

membro em função do anterior:

$$\begin{aligned}
 h_j &= 2h_{j-1} + 1 \\
 &= 2(2h_{j-2} + 1) + 1 = 2^2h_{j-2} + 2^1 + 1 \\
 &= 2^2(2h_{j-3} + 1) + 2^1 + 2^0 = 2^3h_{j-3} + 2^2 + 2^1 + 2^0 \\
 &\dots \\
 &= 2^{j-1} + \sum_{i=0}^{j-2} 2^i = 2^{j-1} + (2^{j-1} - 1) \\
 &= 2^j - 1
 \end{aligned}$$

Observe que a soma da progressão geométrica  $\sum_{i=0}^{j-2} 2^i = 2^{j-1} - 1$  pois, basta fazer a diferença  $2S - S$  em que

$$S = \sum_{i=0}^{j-2} 2^i = 2^0 + 2^1 + 2^2 + \dots + 2^{j-2}$$

e

$$2S = 2 \sum_{i=0}^{j-2} 2^i = 2^1 + 2^2 + 2^3 + \dots + 2^{j-1}.$$

### Exemplo 3.13: A equação discreta de Fibonacci

Leonardo de Pisa (1175 – 1250) conhecido como Fibonacci, filho de Bonacci introduziu a notação Hindu-Árábica para os números tal como os representamos atualmente. Ele estabeleceu uma equação discreta linear homogênea de segunda ordem com coeficientes constantes muito conhecida:

$$f_{n+2} - f_{n+1} - f_n = 0,$$

para  $n \geq 0$ , com  $f_0 = 1$  e  $f_1 = 1$ .

Nesta equação discreta os números  $f_{n+2}$  da sequência solução são definidos em termos dos números anteriores  $f_{n+1}$  e  $f_n$ . Ela gera a famosa sequência de números de Fibonacci 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, ... como solução.

Esta equação ficou muito conhecida como um problema do Liber Abace (livro dos Ábacos) de Fibonacci para designar a evolução populacional de uma criação de coelhos, embora tenha muitas outras aplicações na natureza.

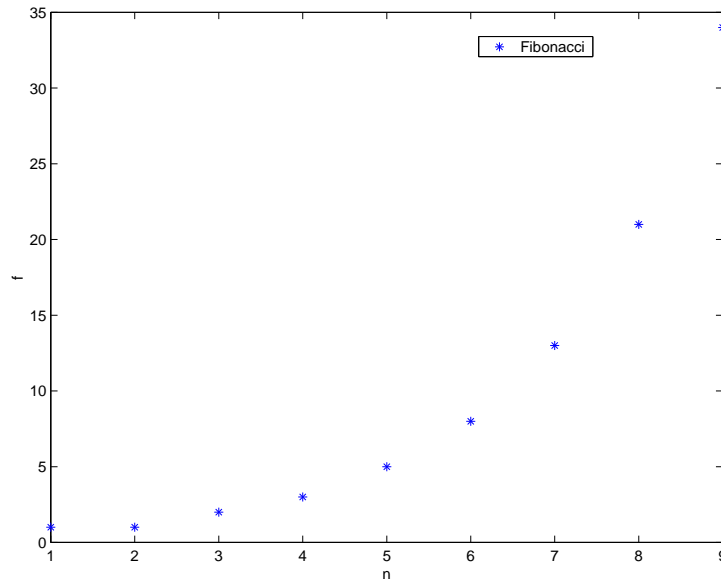
A ideia da sequência de Fibonacci veio de um modelo matemático para descrever a população de casais de coelhos, considerando a hipótese de que em cada mês, cada casal de coelhos adultos gera um novo casal de filhotes. Cada casal de filhotes também começava procriar após 2 meses de idade. (Será que um casal de coelhos naquela época só gerava um casal de filhotes cada vez?)

Começando com um casal de coelhos adultos, observamos que a sequência de Fibonacci, com tal modelo, gera o número de casais de coelhos em  $n$  meses.

A solução da equação de Fibonacci, com as condições iniciais  $f_0 = 1$  e  $f_1 = 1$  é obtida em termos das duas raízes reais distintas

$$\lambda_1 = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \quad \text{e} \quad \lambda_2 = \frac{1 - \sqrt{5}}{2}$$

da sua equação característica associada  $\lambda^2 - \lambda - 1 = 0$ , correspondente à suposição de que a solução é do tipo  $f_n = \lambda^n$  e substituída na equação de Fibonacci. A solução está representada graficamente na Figura 3.12.



**Figura 3.12:** Números de Fibonacci

A solução geral da equação discreta de Fibonacci é do tipo

$$f_n = c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n = c_1 \left( \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^n + c_2 \left( \frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)^n$$

em que  $c_1$  e  $c_2$  são constantes que podem ser determinadas pelas condições iniciais.

Com as condições iniciais  $f_0 = 1$  e  $f_1 = 1$  obtemos o sistema linear

$$\begin{cases} 1 = c_1 + c_2 \\ 1 = c_1 \left( \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^1 + c_2 \left( \frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)^1 \end{cases}$$

cuja solução é dada por  $c_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \left( \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)$  e  $c_2 = -\frac{1}{\sqrt{5}} \left( \frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)$ .

Segue que a solução da equação discreta de Fibonacci

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{5}} \left( \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^{n+1} - \frac{1}{\sqrt{5}} \left( \frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)^{n+1}$$

Observamos que na equação discreta de Fibonacci obtivemos uma única solução, quando especificamos as duas condições iniciais  $f_0 = 1$  e  $f_1 = 1$ , correspondente a ordem da equação discreta, igual ao grau do polinômio característico da mesma.

É muito interessante notar que a solução da equação de Fibonacci é formada por uma combinação de números irracionais, entretanto gera uma sequência de números inteiros.

A segunda raiz  $\lambda_2 = \frac{1-\sqrt{5}}{2} < 0$ , enquanto que a primeira é igual ao número áureo  $\phi = \lambda_1 = 1.61803 > 1$ , o que implica que a sequência de Fibonacci é uma sequência crescente e não limitada, portanto divergente.

Uma propriedade importante da sequência de Fibonacci é que a razão de seus termos consecutivos nos dá uma sequência convergindo para o número áureo  $\phi$ . De fato,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f_{n+1}}{f_n} = \phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 1.61803$$

Observemos que  $\lambda_1 = \phi$  é a raiz positiva da equação  $\lambda^2 - \lambda - 1 = 0$ , ou seja, da equação equivalente,

$$\phi - 1 = \frac{1}{\phi}$$

para  $\phi \neq 0$ .

Observe que  $\frac{1}{\phi} = 0.6180355123$  é a seção áurea ou a divina proporção que aparece na divisão de um segmento  $\overline{AB}$ , e satisfaz à proporção  $\frac{\overline{AB}}{\overline{AC}} = \frac{\overline{AC}}{\overline{CB}}$ .

Um retângulo áureo tem a propriedade de ser subdividido em infinitos retângulos áureos, e aparece com frequência na natureza, nas medidas de várias partes do corpo humano, nas obras de arte e na arquitetura clássica, neoclássica e renascentista caracterizando a beleza e o equilíbrio.

O próprio Leonardo da Vinci (1452 – 1519) usou a razão áurea em diversas obras, como na representação de Mona Lisa.

### **Caso 2: Raízes múltiplas da equação característica**

No caso da equação característica (3.11) ter só duas raízes iguais  $\lambda_1 = \lambda_2$ , ou seja, uma raiz com multiplicidade 2, então teremos uma solução  $\lambda_1^n$  e outra do tipo  $n \lambda_1^n$ . Assim, as soluções de (3.10) são as sequências  $\{x_n\}$  da forma

$$x_n = p_1(1 + n) \lambda_1^n + p_3 \lambda_3^n + \dots + p_n \lambda_n^n$$

em que  $p_i$ ,  $i = 1, 3, 4, \dots, n$  são constantes.

Observamos que se uma das raízes  $\lambda$  da equação característica é de multiplicidade  $s$ , temos uma solução da equação discreta do tipo

$$(c_1 + c_2 n + c_3 n^2 + \dots + c_{s-1} n^{s-1}) \lambda^n$$

com as constantes  $c_1, c_2, c_3, \dots, c_{s-1} \in \mathbb{R}$ .

Sejam as raízes  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r$  da equação característica (3.11) com multiplicidade  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r \in \mathbb{N}$  respectivamente, de modo que a soma delas é igual a ordem da equação, ou seja,

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_r = n$$

então as soluções de (3.10) são as sequências  $\{x_n\}$  da forma

$$x_n = p_1(n) \lambda_1^n + p_2(n) \lambda_2^n + \dots + p_r(n) \lambda_r^n$$

em que  $p_i(n)$  são polinômios de grau  $\alpha_i - 1$ , para  $1 \leq i \leq r$ .

### Exemplo 3.14

A equação  $x_n - 4x_{n-1} + 4x_{n-2} = 0$ ,  $n \geq 2$  é discreta linear homogênea de segunda ordem e possui equação característica associada  $\lambda^2 - 4\lambda + 4 = 0$ , obtida ao supormos uma solução do tipo  $x_n = \lambda^n$ , com  $\lambda \neq 0$ . Ela possui duas raízes reais iguais  $\lambda_1 = \lambda_2 = 2$ . Logo, a solução geral da equação discreta considerada é dada por:

$$x_n = (c_1 + c_2 n) 2^n$$

Com as condições iniciais  $x_0 = 0$  e  $x_1 = 1$ , obtemos as constantes reais  $c_1$  e  $c_2$ :

$$\begin{aligned} x_0 &= (c_1 + c_2 \times 0) 2^0 & 0 &= c_1 \\ x_1 &= (c_1 + c_2 \times 1) 2^1 & 1 &= (0 + c_2 \times 1) 2^1 \Rightarrow c_2 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

e, a solução da equação discreta com as condições iniciais dadas torna-se:

$$x_n = \frac{1}{2} n 2^n, \quad \text{ou seja,} \quad x_n = n 2^{n-1}.$$

### Caso 3: Raízes complexas da equação característica

Caso a equação característica associada a uma equação discreta linear com coeficientes reais tenha raízes complexas conjugadas do tipo

$$\lambda_1 = a + bi = \rho e^{i\theta} \quad \text{e} \quad \lambda_2 = a - bi = \rho e^{-i\theta}$$

com  $a, b$  constantes reais,  $\rho = \sqrt{a^2 + b^2} \in \mathbb{R}$  e  $0 < \theta < 2\pi$  então, a solução da equação discreta homogênea correspondente pode ser escrita como:

$$s_n = c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n = \rho^n (c_1 e^{in\theta} + c_2 e^{-in\theta})$$

e, utilizando a fórmula de Euler

$$e^{in\theta} = \cos(n\theta) + i \sin(n\theta) \quad \text{e} \quad e^{-in\theta} = \cos(n\theta) - i \sin(n\theta)$$

escrevemos a solução em termos das funções trigonométricas:

$$s_n = \rho^n (c_1 (\cos(n\theta) + i \sin(n\theta)) + c_2 (\cos(n\theta) - i \sin(n\theta)))$$

com  $c_1$  e  $c_2$  constantes.

$$s_n = \rho^n ((c_1 + c_2) \cos(n\theta) + i (c_1 - c_2) \sin(n\theta))$$

Denotando  $d_1 = c_1 + c_2$  e  $d_2 = i(c_1 - c_2)$  obtemos

$$s_n = \rho^n (d_1 \cos(n\theta) + d_2 \sin(n\theta))$$

Se as raízes complexas conjugadas  $\lambda_1 = a + bi$  e  $\lambda_2 = a - bi$  são repetidas  $r$  vezes, então temos uma solução do tipo

$$\rho^n \left( (c_1 + c_2 n + \dots + c_{r-1} n^{r-1}) \cos(n\theta) + (d_1 + d_2 n + \dots + d_{r-1} n^{r-1}) \sin(n\theta) \right)$$

com  $c_i$  e  $d_i$  constantes e,  $i = 1, 2, \dots, r-1 \in \mathbb{N}$ .

### Exemplo 3.15

Considere a equação discreta  $x_n + 9 x_{n-2} = 0$ , cujas raízes da equação característica  $\lambda^2 + 9 = 0$ , são os números complexos conjugados escritos como  $\lambda_1 = 3i = 3e^{i\frac{\pi}{2}}$  e  $\lambda_2 = -3i = 3e^{-i\frac{\pi}{2}}$  e, portanto a sua solução geral é dada por:

$$x_n = 3^n d_1 \cos\left(n\frac{\pi}{2}\right) + 3^n d_2 \sin\left(n\frac{\pi}{2}\right)$$

Admitindo as condições iniciais  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = 1$  obtemos as constantes  $d_1 = 0$  e  $d_2 = \frac{1}{3}$  e a solução correspondente:

$$x_n = 3^{n-1} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right).$$

## 3.9 Equações discretas lineares não homogêneas

Consideremos equações discretas não homogêneas de ordem  $k$  com coeficientes constantes do tipo da equação (3.9) escrita como

$$A_I x_{n+I} + A_{I-1} x_{n+I-1} + \dots + A_0 x_n = y_n, \quad n \in \mathbb{N},$$

em que  $A_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, I$  são sequências constantes independentes de  $n$ .



Podemos transformá-la numa equação discreta homogênea quando retrocedemos a equação, escrevendo-a para os termos anteriores e substituindo-os na parte não homogênea em função desses obtendo uma equação homogênea.

Outra ideia é encontrar a solução da equação não homogênea como a soma da solução da equação homogênea  $x_n^H$  mais uma solução particular  $x_n^P$  da equação não homogênea, ou seja,  $x_n = x_n^H + x_n^P$ , imitando o raciocínio que utilizamos para encontrar a solução de uma equação diferencial não homogênea (BOYCE & DIPRIMA, 1999).

No caso de  $y_n$  ser uma função polinomial, exponencial ou produto de polinomial por exponencial, a solução particular a ser procurada deve ser do mesmo tipo.

Se  $y_n = c k^n$  e a constante  $k$  não é solução da equação característica associada, ou seja,  $k^n$  não é solução da equação homogênea, devemos procurar uma solução particular da equação não homogênea do tipo  $x_n^P = \alpha k^n$ , que substituída na equação discreta não homogênea possa determinar os valores da constante  $\alpha$  e, assim uma solução particular.

Se  $y_n = c k^n$  e a constante  $k$  é uma solução simples da equação característica associada, ou seja,  $k^n$  já é uma solução da equação homogênea, devemos procurar uma solução particular de (3.9) do tipo  $x_n^P = \alpha_0 + \alpha_1 n k^n$ , que substituída na equação discreta não homogênea nos dê uma solução particular.

Se  $y_n = c k^n$ , com  $c$  constante e  $k$  é solução da equação característica associada com multiplicidade  $r$ , ou seja, as funções  $k^n, n k^n, n^2 k^n, \dots, n^{r-1} k^n$  já são soluções da equação homogênea, devemos procurar uma solução particular da equação não homogênea do tipo  $x_n^P = (\alpha_0 + \alpha_1 n + \dots + \alpha_{r-1} n^{r-1} + \alpha_r n^r) k^n$ , que substituída na equação discreta não homogênea nos dê uma solução particular.

Outro método que pode ser usado na resolução de equações ou sistemas de equações discretas é o da Transformada Z (FARLOW, 1999) análogo ao das Transformadas Integrais de Laplace ou de Fourier (BOYCE & DIPRIMA, 1999) usada na resolução de equações diferenciais lineares, que não abordaremos neste texto.

### Exemplo 3.16

Considere a equação discreta linear não homogênea de segunda ordem  $x_n - 5x_{n-1} + 6x_{n-2} = 3^n$ .

A solução da equação discreta homogênea associada é  $x_n^H = c_1 2^n + c_2 3^n$ .

Observamos que a parte não homogênea é uma exponencial do tipo  $3^n$  e, como  $k = 3$  já é uma raiz da equação característica,  $3^n$  é solução simples da equação discreta homogênea, então procuramos uma solução particular da equação não homogênea do tipo  $x_n^P = a n 3^n$ , com a uma constante a ser determinada. De fato, substituindo na equação não homogênea, obtemos:

$$a n 3^n - 5 a (n-1) 3^{n-1} + 6 a (n-2) 3^{n-2} = 3^n$$

$$3^2 a n - 15 a (n-1) + 6 a (n-2) = 3^2,$$

o que implica que  $a = 3$ .

Assim, a solução geral da equação  $x_n - 5 x_{n-1} + 6 x_{n-2} = 3^n$  é

$$x_n = x_n^H + x_n^P = c_1 2^n + c_2 3^n + 3 n 3^n,$$

ou seja,

$$x_n = c_1 2^n + c_2 3^n + n 3^{n+1},$$

Observemos que se a parte não homogênea  $y_n$  da equação (3.9) satisfaz uma equação discreta homogênea com coeficientes constantes

$$B_I y_{n+I} + B_{I-1} y_{n+I-1} + \dots + B_0 y_n = 0$$

em que  $B_0, B_1, B_2, \dots, B_I$  são constantes, podemos reduzir a equação não homogênea em uma equação homogênea. De fato, observamos que

$$\begin{aligned} & B_I (A_k x_{n+I+k} + A_{k-1} x_{n+I+k-1} + \dots + A_0 x_{n+I}) + \\ & B_{I-1} (A_k x_{n+I+k-1} + A_{k-1} x_{n+I+k-2} + \dots + A_0 x_{n+I-1}) + \\ & \vdots \\ & + B_0 (A_k x_{n+k} + A_{k-1} x_{n+k-1} + \dots + A_0 x_n) = 0 \end{aligned}$$

é uma equação homogênea de primeira ordem com coeficientes constantes.

Uma equação discreta linear não homogênea de primeira ordem com coeficientes constantes de acordo com (3.9) é do tipo

$$x_n = a_1 x_{n-1} + y_0$$

em que  $a_1$  e  $y_0$  são constantes reais.

Conhecendo-se um valor inicial  $x_0$  podemos obter  $x_n$  para  $n = 1, 2, 3, \dots$  usando a ideia do Exemplo 3.17.

Do mesmo modo que diferenciando uma equação diferencial ordinária não homogênea podemos transformá-la numa equação diferencial homogênea de

grau maior (BOYCE & DIPRIMA, 1999), com um pouco de criatividade podemos resolver uma equação discreta não homogênea transformando-a numa equação homogênea como a do exemplo a seguir.

### Exemplo 3.17

Considere a equação discreta linear não homogênea de primeira ordem

$$x_n - 4 x_{n-1} = 3$$

Podemos transformá-la numa equação discreta homogênea escrevendo o termo de ordem  $n - 1$  da equação,

$$x_{n-1} - 4 x_{n-2} = 3$$

E, em seguida, isolamos a parte não homogênea, neste caso, o valor 3 na equação anterior para o termo de ordem  $n - 1$  e o substituímos na equação original, reescrevendo-a como

$$x_n - 4 x_{n-1} = x_{n-1} - 4 x_{n-2}$$

A equação dada é transformada numa equação discreta linear homogênea de segunda ordem:

$$x_n - 5 x_{n-1} + 4 x_{n-2} = 0$$

que pode ser resolvida facilmente.

A equação característica associada à equação homogênea obtida é dada por:

$$\lambda^2 - 5\lambda + 4 = 0.$$

Como as raízes distintas da equação característica são  $\lambda_1 = 1$  e  $\lambda_2 = 4$ , a solução geral da equação discreta é  $x_n = c_1 1^n + c_2 4^n$ , ou seja

$$x_n = c_1 + c_2 4^n$$

Observamos que a mesma solução seria obtida se procurássemos a solução geral do tipo  $x_n = x_n^H + x_n^P$ .

Com uma condição inicial, por exemplo,  $x_0 = 0$ , obtemos  $x_1 = 3$  e desta forma temos:

$$\begin{cases} x_0 = c_1 + c_2 4^0 & 0 = c_1 + c_2 \\ x_1 = c_1 + c_2 4^1 & 3 = c_1 + 4c_2 \end{cases}$$

Resolvendo o sistema obtemos  $c_2 = -c_1 = 1$ .

Assim, a solução da equação não homogênea com a condição inicial  $x_0 = 0$  é igual a  $x_n = -1 + 4^n$ , ou seja,

$$x_n = 4^n - 1.$$

### Exemplo 3.18

Considere a equação discreta linear não homogênea de primeira ordem  $x_{n+1} = 4x_n + 3^{n+1}$  com  $x_0 = 0$ .

Para transformá-la numa equação homogênea, podemos escrever o termo de ordem  $n$  da equação como  $x_n = 4x_{n-1} + 3^n$ , ou seja:

$$3^n = x_n - 4x_{n-1}$$

E reescrevendo a equação inicial como

$$x_{n+1} = 4x_n + 3 \times 3^n$$

e, em seguida substituindo o valor de  $3^n$  pelo valor obtido anteriormente da equação dada para o termo de ordem  $n - 1$ , transformamos a equação dada em uma equação discreta linear homogênea de segunda ordem

$$x_{n+1} = 4x_n + 3(x_n - 4x_{n-1}), \quad \text{ou seja,} \quad x_{n+1} - 7x_n + 12x_{n-1} = 0$$

A equação característica associada é  $\lambda^2 - 7\lambda + 12 = 0$ , com duas raízes distintas  $\lambda_1 = 3$  e  $\lambda_2 = 4$ . Portanto, a solução geral da equação discreta é uma combinação de  $3^n$  e  $4^n$  dada por  $x_n = c_1 3^n + c_2 4^n$ , com  $c_1$  e  $c_2$  constantes.

Usando a condição inicial  $x_0 = 0$  e observando que da equação original segue que o valor de  $x_1 = 4 \times 0 + 3^{0+1} = 3$ , temos:

$$\begin{aligned} x_0 &= c_1 3^0 + c_2 4^0 & 0 &= c_1 + c_2 \\ x_1 &= c_1 3^1 + c_2 4^1 & 3 &= 3c_1 + 4c_2 \end{aligned}$$

Resolvendo o sistema linear obtido temos que  $c_1 = -3$  e  $c_2 = 3$ .

Assim, a solução da equação com a condição inicial  $x_0 = 0$  é igual a

$$x_n = -3 \times 3^n + 3 \times 4^n$$

ou,

$$x_n = 3(4^n - 3^n).$$

### 3.10 Equações de diferenças

As equações discretas lineares que são casos particulares de (3.7) e do tipo das não autônomas que podem ser escritas como

$$x_{n+1} = x_n + g(n), \quad n \in \mathbb{N},$$

são denominadas **equações de diferenças**.

Observe que, neste caso podemos escrever a parcela  $g(n)$  como uma diferença entre dois termos consecutivos da sequência  $x_n$ .

$$x_{n+1} - x_n = g(n)$$

Uma equação de diferenças bastante simples é a equação discreta  $x_{n+1} = x_n + r$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , em que  $r$  é uma constante.

De fato, com a condição inicial  $x_0$  obtemos como solução uma sequência conhecida como progressão aritmética:

$$x_0,$$

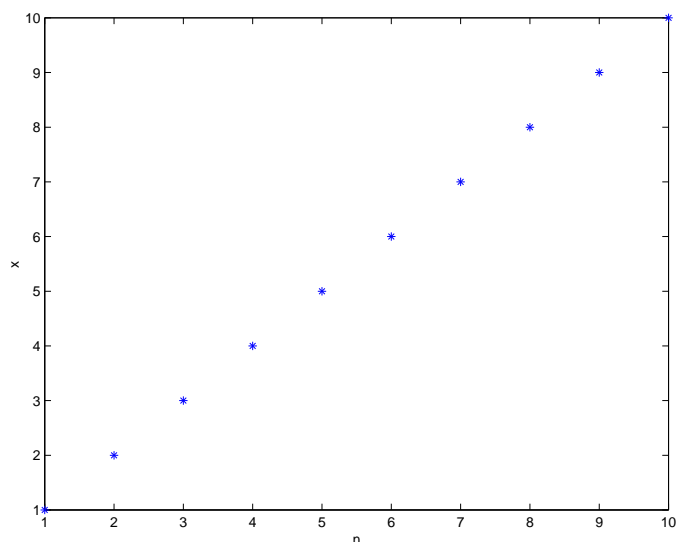
$$x_1 = x_0 + r,$$

$$x_2 = x_1 + r = x_0 + 2r,$$

$$x_3 = x_2 + r = x_0 + 2r + r = x_0 + 3r,$$

$$\vdots$$

$$x_n = x_0 + nr.$$

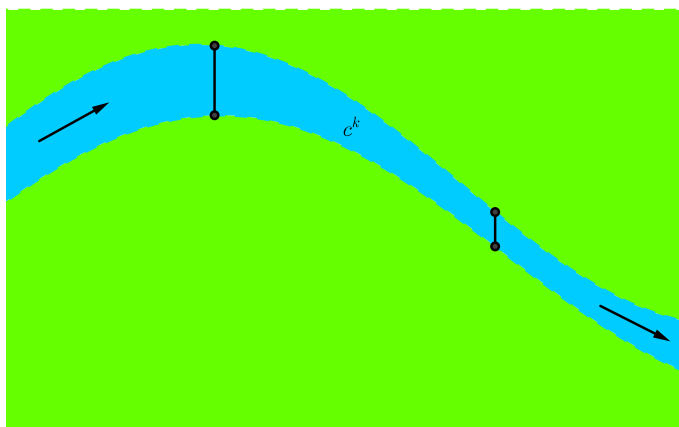


**Figura 3.13:** Equação discreta da progressão aritmética

Exemplo deste tipo de equação de diferenças é o do crescimento de produção dos alimentos, como acreditava Malthus, considerando  $r = 1$ , e  $x_0 = 1$  obtemos a solução gráfica mostrada na Figura 3.13.

### 3.11 Modelo de poluição de rios

Uma equação de balanço simples que descreve o modelo de poluição em rios pode ser descrita supondo que a quantidade de poluentes contida num certo compartimento de um rio num instante  $t = k + 1$ ,  $k \in \mathbb{N}$  seja igual à quantidade de poluentes que já havia no compartimento do rio no instante  $t = k$  mais a quantidade de poluentes de outras regiões contíguas que entra no compartimento (a montante, lateralmente etc.) as fontes poluidoras.



**Figura 3.14:** Compartimento do rio

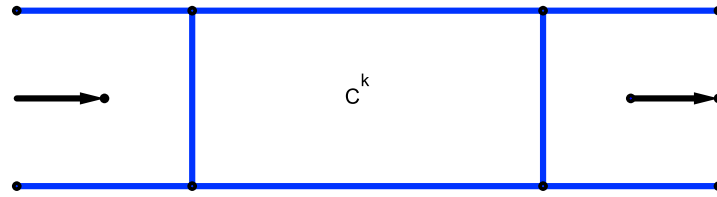
Além disso temos que considerar a quantidade que sai de poluentes que é levada pelo fluxo (para jusante, lateralmente etc.), a quantidade de poluentes degradada e a que passa para outros locais como as suas margens, ambiente aéreo, sedimento, biota etc.

Entretanto, os rios estão poluídos e, assim, podemos elaborar modelos matemáticos para representar a evolução da poluição neles. Quais são as variáveis e os parâmetros mais importantes que podemos considerar para elaborar um modelo matemático razoável?

No caso de obtermos os dados sobre a quantidade de poluentes medidos em intervalos regulares de tempo (e não continuamente) podemos utilizar modelos constituídos de equações discretas.

### 3.12 Poluição num compartimento do rio

Um primeiro modelo simples pode ser obtido supondo que um trecho ou compartimento de um rio está recebendo certa quantidade de poluentes.



**Figura 3.15:** Esquema da quantidade de poluição num compartimento do rio

Seja  $\phi_L$  a quantidade de poluentes que é levada do compartimento pelo fluxo,  $\delta_L$  é a quantidade de poluentes que é degradada e a fonte  $q_L$  é a quantidade de poluentes que é lançada no compartimento do rio por um período de tempo, por exemplo hora, dia etc.

Supondo que no compartimento do rio a quantidade de poluentes  $C^{k+1}$  no período  $k + 1$  seja igual à quantidade de poluente  $C^k$  que havia no período anterior  $k$ , acrescida da quantidade oriunda das fontes poluidoras locais  $q_L$  menos o fluxo  $\phi_L C^k$  e a quantidade degradada  $\delta_L C^k$  que deixam de afetar o compartimento do rio como em (ALVES, 2009)<sup>3</sup> e ALVES & MEYER (2009).

Desse modo, obtemos a equação de balanço discreta,

$$C^{k+1} = C^k + q_L - \phi_L C^k - \delta_L C^k$$

que pode ser escrita como

$$C^{k+1} = q_L + (1 - \phi_L - \delta_L) C^k. \quad (3.14)$$

Se o compartimento do rio é percorrido pela mancha de poluentes em  $\tau_L$  unidades de tempo, a cada uma destas unidades de tempo  $\frac{1}{\tau_L} = \phi_L$  que representa numa primeira aproximação o fluxo de poluentes naquela parte do rio, consequentemente a mancha de poluente que sai do compartimento do rio considerado, levada pelo do fluxo natural do rio.

Da mesma forma, o parâmetro  $\delta_L$  indica o percentual de poluente por unidade de tempo que degrada e, portanto deixa de afetar o compartimento do rio. A quantidade  $C^{k+1} - C^k$  representa a variação da quantidade de poluentes por período ou unidade de tempo.

<sup>3</sup><http://libdigi.unicamp.br/document/?code=000439623>, acesso em 10/02/2011

Dados os valores de  $C^0$ ,  $q_L$ ,  $\phi_L$ , e  $\delta_L$  podemos substituí-los na equação 3.14 para obter a quantidade de poluentes no período seguinte  $C^1$ , conhecendo  $C^1$  obtemos  $C^2$  e, a partir de  $C^2$  obtemos  $C^3$  e assim sucessivamente.

Numa análise qualitativa preliminar, observamos que quando o tempo  $t$  tende ao infinito,  $C^{k+1}$  tende a um valor assintótico  $C^*$ , e escrevemos a equação:

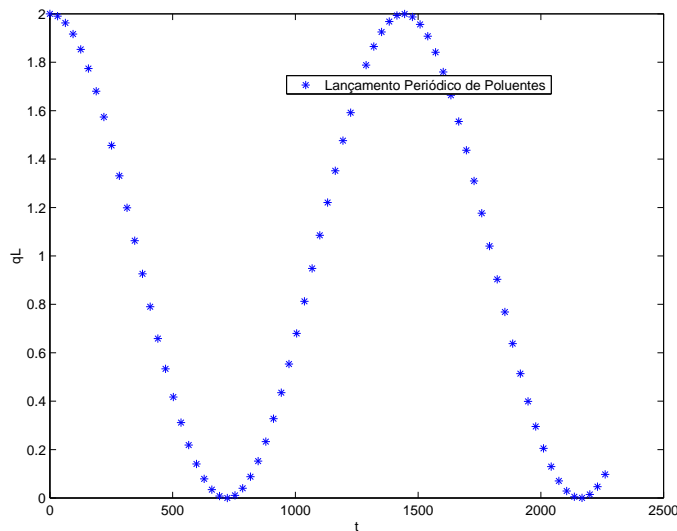
$$C^* = (1 - \phi_L - \delta_L) C^* + q_L$$

Segue que a quantidade de poluentes  $C^*$  tende a um valor estacionário

$$C^* = \frac{q_L}{\phi_L + \delta_L}.$$

Esta relação nos mostra que a poluição no compartimento do rio decresce quando o aporte  $q_L$  diminui, ou mesmo quando o fluxo  $\phi_L$  e/ou a degradação  $\delta_L$  aumentam.

### 3.13 Emissão periódica de poluentes



**Figura 3.16:** Fonte de emissões periódicas

A emissão de poluentes em muitos casos é uma função periódica, digamos com intervalos de um dia = 24 h = 1 440 min (minutos), dada por

$$q_L = q + \frac{\alpha}{2} \cos\left(\frac{2\pi t}{1440}\right) = q + \frac{\alpha}{2} \cos\left(\frac{\pi t}{720}\right),$$

em que  $q$  representa a quantidade média de poluentes lançada no compartimento do rio por uma fonte poluidora e  $\alpha$  é a amplitude média entre os valores máximo e mínimo de poluentes que chegam ao rio conforme a Figura 3.16.



Deste modo, a equação de diferenças (3.14) torna-se:

$$C^{k+1} = q + \frac{\alpha}{2} \cos\left(\frac{\pi t}{720}\right) + (1 - \phi_L - \delta_L) C^k.$$

Podemos generalizar mais o modelo, supondo que além das quantidades já consideradas levamos em conta a quantidade de poluentes que vem da parte imediatamente a montante  $M$ , transportada pelo rio como um fluxo de poluentes  $\phi_k C^k$  que, somado ao aporte local  $q_L$  do próprio compartimento nos dá a seguinte equação

$$C^{k+1} = \phi_k C^k + q_L + (1 - \phi_L - \delta_L) C^k.$$

### 3.14 Crescimento logístico discreto

O modelo de crescimento geométrico abordado anteriormente na seção 3.6 nos dá uma descrição inicial da sua evolução, enquanto uma população se mantém homogênea em relação às hipóteses mais simples consideradas, apontado que o crescimento geométrico da população tende para infinito com o tempo.

Observamos que no modelo de crescimento geométrico abordado na seção 3.6, uma cultura começando com uma célula de *Escherichia Coli* (*E. Coli*) encontrada no intestino humano ou, se cultivada em laboratório, com crescimento a uma taxa de 0.41 por hora poderia atingir um número de células da ordem de  $10^{83}$ , em apenas 23 dias, maior do que o número de átomos estimado do universo  $10^{80}$ , o que mostra as limitações do modelo de crescimento geométrico para muitos períodos de tempo. Além desse modelo simples de crescimento exponencial da população regido pela Lei de Malthus, temos outros como um modelo de crescimento mais geral e realista, cuja representação geométrica possui uma forma sigmoidal, chamado de crescimento logístico.

De fato, as populações com o mesmo número de indivíduos geralmente são heterogêneas quanto às taxas de natalidade e mortalidade. Como observamos anteriormente, a Lei de Malthus não leva em consideração vários fatores que podem influenciar na dinâmica populacional, pois nas condições normais, numa população mais jovem, geralmente, a taxa de natalidade é maior e a quantidade de mortes é menor do que uma população mais idosa, além de outros fatos não contemplados pela Lei de Malthus.

O modelo logístico para a evolução de uma população inicialmente foi proposto por P. F. Verhulst (1804–1849) considerando que as populações não podem crescer ilimitadamente e que dependem fortemente do suprimento de alimentos,

do espaço físico, geralmente limitado, bem como de outros fatores que a longo prazo podem desacelerar ou mesmo por fim ao crescimento.

Verhulst propôs que a taxa de crescimento da população  $r$  também dependia da população em cada instante e estabeleceu a equação logística, que na forma discreta pode ser escrita como:

$$P(n+1) - P(n) = r(P(n)) P(n) \quad (3.15)$$

em que  $P(n)$  é a população no instante  $n$  e  $r(P(n))$  é a taxa de crescimento da população, que era constante no modelo de Malthus, mas agora depende do número de indivíduos da própria população no instante  $n$ .

Para descrever um crescimento rápido da população  $P(n)$  quando ela é pequena, a função  $r(P(n))$  é escolhida de modo que a taxa de crescimento fique igual a uma constante  $r_0 > 0$ , ou seja, de modo que o limite da sequência:

$$\lim_{P(n) \rightarrow 0} r(P(n)) = r_0,$$

indicando que o limite de  $r(P(n))$  tende a  $r_0$  quando a população é pequena, e (3.15) se comportaria como a lei de Malthus.

Por outro lado, à medida que a população  $P(n)$  aumenta, queremos que a taxa  $r(P(n))$  decresça, ou seja,

$$\lim_{P(n) \rightarrow P_{\max}} r(P(n)) = 0,$$

indicando que o limite da taxa de crescimento  $r(P(n))$  tende a zero, ou seja, quando a população cresce muito e vai se estabilizando e convergindo para um valor máximo  $P_{\max}$ , ou seja, tendo um comportamento assintótico atingindo como valor o limite  $P_{\max}$ .

Uma função  $r(P(n))$  mais simples que satisfaz estas propriedades é a função linear de  $P(n)$  do tipo

$$r(P(n)) = r_0 - \alpha P(n),$$

em que  $\alpha$  é uma constante positiva.

Se admitimos que o limite de  $P(n)$  é um valor  $P_{\max}$ , quando  $n$  é muito grande, temos que

$$r_0 - \alpha P_{\max} = 0 \quad \Rightarrow \quad P_{\max} = \frac{r_0}{\alpha}.$$

A expressão anterior proposta para  $r(P(n))$ , descreve satisfatoriamente as hipóteses biológicas consideradas anteriormente e a equação logística discreta

torna-se:

$$P(n+1) - P(n) = (r_0 - aP(n)) P(n) = r_0 \left(1 - \frac{a}{r_0} P(n)\right) P(n)$$

que pode ser escrita como:

$$P(n+1) = (1 + r_0) P(n) - r_0 \frac{P(n)^2}{K}$$

em que  $K = P_{\max}$ .

Evidentemente que esta equação discreta é não linear e encontrar a sua solução diretamente não é tão simples. Na maioria das vezes, analisa-se qualitativamente tais equações por meio de seus pontos de equilíbrio, que veremos mais adiante.

Entretanto, uma sugestão para simplificar a equação logística é fazermos uma suposição sobre a parte quadrática aproximando um dos fatores  $P(n)$  da parcela quadrática  $P(n)^2$  por  $P(n+1)$ , ou seja, considerarmos

$$P(n)^2 = P(n+1) P(n)$$

tornando-a numa equação discreta mais simples de se resolver analiticamente.

De fato, na equação obtida ao substituírmos  $P(n)^2$  por  $P(n+1) P(n)$  obtemos

$$P(n+1) = (1 + r_0) P(n) - r_0 \frac{P(n+1) P(n)}{K}$$

e reescrevemos a equação anterior como

$$P(n+1) = \left(1 + r_0 - \frac{r_0}{K} P(n+1)\right) P(n). \quad (3.16)$$

que continua não linear. Geralmente procuramos uma substituição que a torne mais simples ou linear.

Com uma substituição conveniente do tipo inverso,

$$Q(n) = \frac{1}{P(n)} \quad \text{e, portanto,} \quad Q(n+1) = \frac{1}{P(n+1)}$$

a equação (3.16) torna-se linear:

$$\frac{1}{Q(n+1)} = \left(1 + r_0 - \frac{r_0}{K} \frac{1}{Q(n+1)}\right) \frac{1}{Q(n)}$$

Ou, de outra forma escrevemos a equação discreta linear não homogênea

$$Q(n) = (1 + r_0) Q(n+1) - \frac{r_0}{K} \quad (3.17)$$

Podemos resolver esta equação discreta (3.17) não homogênea de modo análogo a uma equação diferencial, decompondo a solução em duas parcelas:

$$Q(n) = Q^H(n) + Q^P(n),$$

ou seja, decompondo-a na soma da solução da equação homogênea associada  $Q^H(n)$  e de uma solução particular  $Q^P(n)$  da equação não homogênea.

Para a equação homogênea associada a (3.17)

$$Q(n) = (1 + r_0) Q(n + 1) \quad (3.18)$$

que é linear, supomos que a solução é do tipo

$$Q^H(n) = \lambda^n,$$

com  $\lambda \neq 0$ .

Substituindo este valor na equação (3.18), obtemos  $\lambda^n = (1 + r_0) \lambda^{n+1}$ .  
 Onde segue que  $1 = (1 + r_0) \lambda$ , e portanto,  $\lambda = \frac{1}{1 + r_0}$ .

Assim, a solução geral da equação discreta homogênea é igual a

$$Q^H(n) = c_1 \left( \frac{1}{1 + r_0} \right)^n \quad (3.19)$$

em que  $c_1$  é uma constante.

Buscamos agora uma solução particular da equação não homogênea (3.17) do tipo  $Q^P(n) = \alpha$  em que  $\alpha$  é uma constante, já que a parcela não homogênea independe de  $n$ . Substituindo na equação (3.17) obtemos

$$\alpha = (1 + r_0) \alpha - \frac{r_0}{K}$$

ou seja,

$$\alpha = \frac{1}{K}.$$

de modo que a solução particular da equação não homogênea é  $Q^P(n) = \frac{1}{K}$ .

Finalmente a solução geral da equação de (3.17) pode ser escrita como

$$Q(n) = c_1 \left( \frac{1}{1 + r_0} \right)^n + \frac{1}{K}.$$

Utilizando a condição inicial,  $Q(0) = Q_0$  correspondente ao período  $n = 0$ , obtemos o valor da constante  $c_1$ . De fato;

$$Q(0) = c_1 \left( \frac{1}{1 + r_0} \right)^0 + \frac{1}{K},$$

o que implica que

$$Q_0 = c_1 + \frac{1}{K},$$

e assim, determinamos o valor da constante  $c_1$ :

$$c_1 = Q_0 - \frac{1}{K}.$$

A solução de (3.17) pode ser escrita como

$$Q(n) = \left(Q_0 - \frac{1}{K}\right) \left(\frac{1}{1+r_0}\right)^n + \frac{1}{K}.$$

Em razão da transformação inversa temos que  $P_0 = \frac{1}{Q_0}$  e, portanto,

$$Q_0 - \frac{1}{K} = \frac{1}{P_0} - \frac{1}{K} = \frac{K - P_0}{P_0 K}$$

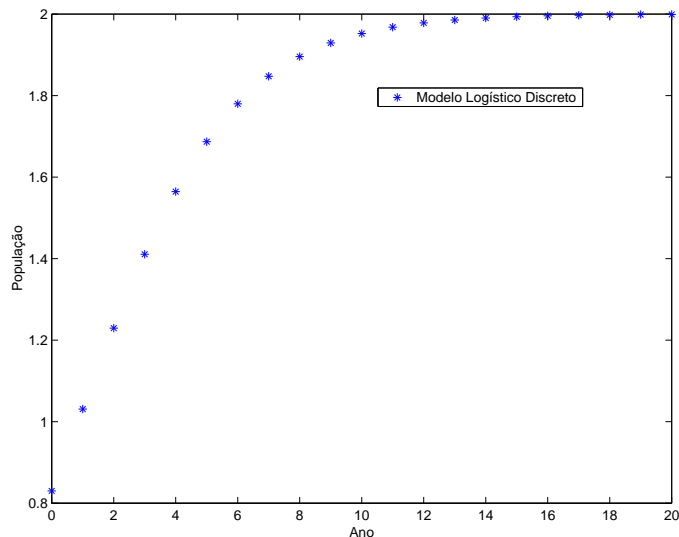
Resolvido o problema para a variável  $Q(n)$ , fazemos a transformação inversa para a variável inicial  $P(n)$ , obtendo a solução da equação logística (3.16):

$$P(n) = \left(\frac{K - P_0}{P_0 K} \left(\frac{1}{1+r_0}\right)^n + \frac{1}{K}\right)^{-1}$$

ou seja,

$$P(n) = \frac{1}{\frac{K - P_0}{P_0 K} \left(\frac{1}{1+r_0}\right)^n + \frac{1}{K}}.$$

Na Figura 3.17 ilustramos a solução da equação discreta logística anterior com os parâmetros  $K = 2$ ,  $P_0 = 0.83$  e  $r_0 = 0.5$  representando o crescimento de um arbusto que atinge no máximo 2 m de altura.



**Figura 3.17:** Crescimento logístico

Observamos que no modelo logístico  $P(n)$  cresce rapidamente no início até não ser sustentada, aí então, a curva solução tende ao limite que é o nível de saturação  $K$ , a máxima população sustentável, dada pelo

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\left(\frac{K-P_0}{P_0 K}\right) \left(\frac{1}{1+r_0}\right)^n + \frac{1}{K}} = K.$$

Existem generalizações do modelo logístico que podem se adequar a vários problemas ambientais.

Dentre outros modelos de crescimento populacional discretos que foram propostos no final do século XX, o modelo de May, R. (MAY, 1976) em que a dinâmica populacional é estabelecida pela equação

$$P_{n+1} = r(P_n) P_n,$$

cujas taxa de crescimento populacional é densidade dependente dada pela função:

$$r(P_n) = P_n e^{(r_0 (1 - \frac{P_n}{K}))}$$

com  $r_0$  e  $K$  constantes.

### 3.15 Sistemas de equações discretas

Quando estamos interessados em acompanhar a mancha de poluentes seguindo o curso do rio, é conveniente tratar o problema considerando vários compartimentos ao longo do mesmo, simultaneamente, o que nos leva a um sistema de equações discretas.

No modelo matemático de um rio discutido nas seções (3.11), (3.12) e (3.13) anteriormente poderíamos considerar também que em vários trechos ocorrem entradas e saídas de poluentes. Seja  $C_j^k$  a quantidade de poluição no compartimento  $j$  no período  $k$ .

Neste caso, um modelo matemático de poluição de um rio considerando vários compartimentos  $j$ ,  $j = 1, 2, 3, \dots, J$ , em que  $J$  é o número de compartimentos pode ser escrito na forma matricial conforme ALVES (2009) dado por:

$$\begin{bmatrix} C_1^{k+1} \\ C_2^{k+1} \\ C_3^{k+1} \\ \dots \\ C_J^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-r_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \phi_1 & 1-r_2 & 0 & & \\ 0 & \phi_2 & 1-r_3 & & \\ 0 & & \dots & \dots & \\ 0 & 0 & \dots & \phi_{J-1} & 1-r_J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^k \\ C_2^k \\ C_3^k \\ \dots \\ C_J^k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ \dots \\ q_J \end{bmatrix}$$

em que  $r_j = \phi_j + \delta_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, J$  é a soma da quantidade que é levada pelo fluxo  $\phi_j$  em razão da degradação  $\delta_j$  ocorrida em cada compartimento  $j$  do rio.

Na diagonal encontram-se  $1 - r_j = 1 - \phi_j - \delta_j$  que são valores entre 0 e 1.

O sistema de equações discretas obtido é um sistema linear de equações e, conhecendo-se as quantidades iniciais de poluentes em cada compartimento do rio

$$\begin{bmatrix} C_1^0 \\ C_2^0 \\ C_3^0 \\ \dots \\ C_J^0 \end{bmatrix}$$

obtemos a solução do problema.

Podemos escrever o sistema linear como

$$C^{k+1} = M C^k + Q \quad (3.20)$$

em que  $M$  é a matriz de transição  $J \times J$ ,  $C^k$  é a quantidade de poluição no período  $k$  e,  $Q$  é a matriz da quantidade média de poluentes lançada no rio por uma fonte poluidora,

A matriz do sistema é uma matriz triangular inferior cujos valores da diagonal são  $m_{jj} = 1 - r_j$  e  $0 \leq m_{jj} \leq 1$ . Se  $|m_{jj}| < 1$  segue que os autovalores  $m_{jj}$  da matriz  $M$  são menores do que 1 e, portanto há convergência da sequência solução do sistema  $C^k$ .

### Exemplo 3.19

Considere um modelo em que é lançado poluentes no primeiro e quarto compartimentos de um rio, cuja matriz  $M$  é dada por

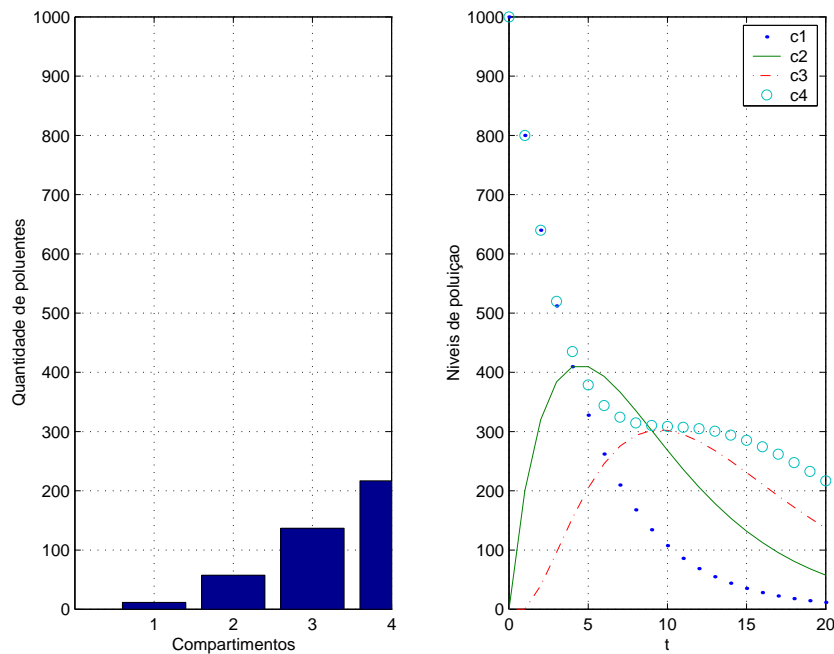
$$M = \begin{bmatrix} 0.8 & 0 & 0 & 0 \\ 0.2 & 0.8 & 0 & 0 \\ 0 & 0.2 & 0.8 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2 & 0.8 \end{bmatrix}$$

com a condição inicial

$$C^0 = \begin{bmatrix} 1000 & 0 & 0 & 1000 \end{bmatrix}^T$$

que representa a entrada da quantidade inicial de poluentes lançada nos compartimentos, onde não tinha poluentes, ou seja,

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$$



**Figura 3.18:** Modelo de 4 Compartimentos

Um modelo de poluição de um rio considerando 4 compartimentos foi simulado com o sistema anterior em que o nível de poluição inicial nos 4 compartimentos são constantes, considerando que só ocorreu uma descarga accidental de poluentes nos compartimentos  $C^1$  e  $C^4$ . A partir daí, a poluição vai passando para os compartimentos seguintes cuja quantidade inicial de poluentes era nula.

Verificamos na Figura 3.18 que no início só os compartimentos  $C_1$  e  $C_4$  receberam poluentes e, em consequência do fluxo do rio, vão diminuindo enquanto vão sendo levados para os compartimentos seguintes. A quantidade de poluentes do compartimento  $C_4$ , que inicialmente está decaindo, apresenta uma oscilação no momento em que recebe poluentes vindo dos compartimentos anteriores e, em seguida, continua decrescendo, pois supomos que não houve mais descargas.

### 3.16 Modelos matriciais discretos de crescimento populacional

Para a evolução das populações heterogêneas Euler generalizou o modelo inicial de Malthus, levando em consideração mais informações biológicas acerca da população como as taxas de natalidade e mortandade que dependiam da distribuição das faixas etárias da população.

Imaginando uma população cujas informações biológicas dependem das



faixas etárias, digamos que a primeira subpopulação  $p_1$  seja constituída de indivíduos com idade entre 0 e  $T_1$ , ou seja, pertencente ao intervalo  $[T_0, T_1)$  a segunda  $p_2$  com indivíduos com idade entre  $T_1$  e  $T_2$ , e a  $i$ -ésima subpopulação  $p_i$  seja constituída de indivíduos com idade entre  $[T_{i-1}, T_i)$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots, I$ .

Considerando os intervalos periódicos de amplitude  $\Delta T = T_i - T_{i-1}$ , o instante  $n + 1$  significa  $\Delta T$  unidades de tempo após o período  $n$ . Assim, no instante  $n + 1$  todos os indivíduos que estavam na  $i$ -ésima faixa etária no instante  $n$ , estarão na  $(i + 1)$ -ésima faixa etária caso não ocorram mortes.

Descrivendo cada subpopulação  $p_i$  por um número de indivíduos  $p_i(n)$  com idades no intervalo  $[T_{i-1}, T_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, I$  temos uma função vetorial

$$P(n) = (p_1(n), p_2(n), \dots, p_I(n))^T$$

satisfazendo um sistema de equações discretas na seguinte forma matricial

$$P(n + 1) = M P(n)$$

em que  $M$  é a matriz de transição, que neste caso, representa o potencial biótico da população.

Aplicando repetidamente a equação matricial anterior partindo de uma condição inicial  $P(0)$  obtemos a solução

$$P(n) = M^n P(0)$$

A matriz de transição  $M$  pode ser obtida utilizando os dados demográficos da população, como os seguintes:

$\nu_i$ : taxa de natalidade dos indivíduos da  $i$ -ésima faixa etária da população num período de tempo unitário  $\Delta T$  ;

$\mu_i$  : taxa de mortalidade dos indivíduos da  $i$ -ésima faixa etária num período de tempo unitário  $\Delta T$  .

Para um grupo de  $p_i(n)$  indivíduos de uma população situados na  $i$ -ésima faixa etária nasceriam  $\nu_i p_i(n)$  indivíduos e morreriam  $\mu_i p_i(n)$  indivíduos após um período  $\Delta T$ .

No modelo de Euler, definimos as funções

$$p_i : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$$

com  $i = 1, 2, \dots, I$  de modo que  $p_i(n)$  representa o número de indivíduos na  $i$ -ésima faixa etária no período  $n$ .

Consequentemente, o número total de indivíduos de toda a população, considerando as  $I$  faixas etárias é dada pela soma das populações de cada faixa etária:

$$P(n) = \sum_{i=1}^I p_i(n)$$

Formulando o modelo matemático para a dinâmica da população, obtemos:

$$\begin{cases} p_1(n+1) = \sum_{i=1}^{I-1} \nu_i p_i(n) \\ p_i(n+1) = (1 - \mu_i) p_i(n) \end{cases}$$

Observe que se  $\nu_1 = 0$  significa que não ocorrem nascimentos na faixa etária infantil e  $\nu_I = 0$  na última faixa etária que é considerada fora do período de reprodução.

Considere uma população com duas faixas etárias modelado pelo sistema de equações discretas acopladas

$$\begin{cases} p_1(n+1) = \nu_1 p_1(n) + \nu_2 p_2(n) \\ p_2(n+1) = (1 - \mu_1) p_1(n) \end{cases}$$

E, como  $P(n) = p_1(n) + p_2(n)$  obtemos a equação discreta de segunda ordem

$$P(n+2) - \nu_1 P(n+1) - \nu_2 (1 - \mu_1) P(n) = 0 \quad (3.21)$$

De fato, aplicando as definições anteriores do modelo,

$$\begin{aligned} p(n+2) &= p_1(n+2) + p_2(n+2) \\ &= \nu_1 p_1(n+1) + \nu_2 p_2(n+1) + (1 - \mu_1) p_1(n+1) \end{aligned}$$

Somando e subtraindo  $\nu_1 p_2(n+1)$  no segundo membro da equação anterior, obtemos

$$\begin{aligned} P(n+2) &= (\nu_1 p_1(n+1) + \nu_1 p_2(n+1)) + \nu_2 p_2(n+1) - \nu_1 p_2(n+1) + \\ &\quad (1 - \mu_1) p_1(n+1) \\ &= \nu_1 P(n+1) + \nu_2 p_2(n+1) - \nu_1 p_2(n+1) + (1 - \mu_1) p_1(n+1) \\ &= \nu_1 P(n+1) + \nu_2 (1 - \mu_1) p_1(n) - \nu_1 (1 - \mu_1) p_1(n) + \\ &\quad (1 - \mu_1) (\nu_1 p_1(n) + \nu_2 p_2(n)) \\ &= \nu_1 P(n+1) + \nu_2 (1 - \mu_1) P(n). \end{aligned}$$

Escrevendo a equação discreta anterior na forma vetorial de primeira ordem, dada pela função vetorial  $P : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}^2$  definida por

$$P(n) = (p_1(n), p_2(n))^T$$

que satisfaz o sistema linear

$$P(n+1) = M P(n)$$

No caso de uma população com duas faixas etárias temos:

$$\begin{bmatrix} p_1(n+1) \\ p_2(n+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \\ 1 - \mu_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1(n) \\ p_2(n) \end{bmatrix}$$

A matriz de transição  $M$  para o caso de duas faixas etárias é dada por

$$M = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \\ 1 - \mu_1 & 0 \end{bmatrix}$$

### Exemplo 3.20

Consideramos uma matriz de transição  $M$  de uma população com duas faixas etárias jovens e adultos dada por:

$$M = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.7 \\ 0.3 & 0.0 \end{bmatrix}$$

E também supondo que as percentagens das respectivas populações iniciais de jovens e adultos sejam  $x[1] = \begin{bmatrix} 0.4 \\ 0.6 \end{bmatrix}$  obtemos após cada período de tempo as seguintes percentagens de distribuição das populações por faixa etária:

$$x[2] = M x[1] = \begin{bmatrix} 0.65 \\ 0.15 \end{bmatrix}$$

$$x[3] = M x[2] = M^2 x[1] = \begin{bmatrix} 0.495 \\ 0.195 \end{bmatrix}$$

$$x[4] = M x[3] = M^3 x[1] = \begin{bmatrix} 0.4335 \\ 0.1485 \end{bmatrix}$$

Será que a evolução da população total começando com 100 elementos como condição inicial dada, sendo 40 jovens e 60 adultos, atingem um estado estacionário com o número de elementos das faixas etárias jovem e de adultos após um certo período?

A origem, ou seja, o vetor  $\bar{X} = 0$  sempre é um ponto de equilíbrio para um sistema de equações discretas homogêneo

$$X_{n+1} = M X_n$$

De fato, um estado estacionário de população  $\bar{X} = 0$  nunca varia.

Em alguns casos existem outros pontos de equilíbrio, que satisfazem a condição

$$\bar{X} = M \bar{X}.$$

Isto nos indica que  $\bar{X}$  é um autovetor da matriz  $M$  com autovalor correspondente igual a unidade. Além disso, se a unidade é um autovalor de  $M$ , qualquer autovetor correspondente é um ponto de equilíbrio do sistema.

Se a unidade não for um autovalor de  $M$ , a origem é o único ponto de equilíbrio do sistema.

Para um sistema de equações discretas não homogêneo

$$X_{n+1} = M X_n + B$$

um ponto de equilíbrio é um vetor  $\bar{X} = 0$  tal que deve satisfazer a condição

$$\bar{X} = M \bar{X} + B \quad (3.22)$$

Este sistema deste tipo pode representar um modelo populacional com imigração, em que a matriz  $B$  representa a imigração.

Se a unidade não é autovalor de  $M$ , então a matriz  $I - M$  é não singular e existe um único ponto de equilíbrio dado por:

$$\bar{X} = [I - M]^{-1} B$$

o que acontece na maioria dos casos de interesse.

Caso a unidade seja um autovalor de  $M$  pode não existir pontos de equilíbrio, ou mesmo, existir um número infinito deles dependendo do sistema (3.21) ser consistente ou não.

O entendimento das ideias apresentadas nos modelos ambientais tratados discretamente são fundamentais para elaboração de modelos discretos mais gerais.

### 3.17 Adimensionalização

Nos modelos matemáticos, as unidades de medidas de cada parcela das equações devem ser consistentes e as medidas das grandezas físicas básicas podem ser escolhidas convenientemente.

Basicamente, o processo de adimensionalização consiste na substituição das variáveis originais do problema por novas variáveis adimensionais (sem uni-

dades). Desse modo, vários problemas são convertidos numa forma adimensional e passa a ser tratado matematicamente da mesma forma.

Modelos matemáticos ambientais, físicos, químicos, econômicos, biológicos e de outras áreas, que aparentemente parecem diferentes, tornam-se matematicamente semelhantes quando adimensionalizados.

A análise dimensional de um problema é muito importante na análise numérica de um modelo matemático, uma vez que a maioria dos programas computacionais é escrita numa forma geral que pode ser utilizada para resolução de problemas distintos que possuem a mesma formulação matemática adimensional.

Geralmente transformamos o problema numa forma padronizada, resolvemos numericamente e transformamos os resultados numéricos de volta para as próprias variáveis ou coordenadas iniciais.

A seguir ilustramos estas transformações considerando uma equação da dinâmica populacional como  $p_{n+1} = \alpha p_n$ , em que  $p_n$  é a população num instante  $n$  e  $\alpha$  uma constante real, a unidade de medida do número de indivíduos da população  $p_n$  pode ser em unidades, milhares ou milhões, mas deve ser a mesma nos dois lados da equação. Neste caso a taxa de crescimento

$$\alpha = \frac{p_{n+1}}{p_n}$$

deve ser uma constante real adimensional de modo que a equação é consistente.

Considerando a medida de contaminação de uma represa, lago ou rio como a concentração  $c$  de poluentes, dada em kg (quilogramas) ou ton (toneladas), o tempo  $t$  em s (segundos), d (dia) ou a (ano) e o fluxo podendo ser dado em termos de  $\frac{\text{ton}}{\text{s}}$ , uma quantidade muito pequena,  $\frac{\text{ton}}{\text{dia}}$  quantidade muito grande ou, então,  $\frac{\text{kg}}{\text{dia}}$ , quantidade razoável adequadas de acordo com o modelo de contaminação adotado.

Consideramos também na equação que descreve um modelo matemático aparecem muitas variáveis e parâmetros que podem ser reduzidas de modo a tornar o problema matemático mais simples de se resolver para a variável dependente que é a incógnita procurada do problema.

Consideremos agora uma equação discreta como

$$p_{n+1} = \alpha p_n e^{-\beta p_n}$$

em que aparecem dois parâmetros reais  $\alpha$  e  $\beta$ .

Considerando  $p^*$  o valor de equilíbrio da variável  $p_n$ , solução da equação

$$p^* = \alpha p^* e^{-\beta p^*}$$

dado por

$$p^* = \frac{\ln(\alpha)}{\beta}.$$

Definimos a nova variável  $\bar{p}_n = \frac{p_n}{p^*}$  de modo que,

$$\frac{p_{n+1}}{p^*} = \frac{\alpha p_n e^{-\beta p_n}}{p^*} = \alpha \frac{p_n}{p^*} e^{-\beta p_n \frac{p^*}{p^*}} = \alpha \frac{p_n}{p^*} e^{-\beta p^* \frac{p_n}{p^*}};$$

$$\bar{p}_{n+1} = \alpha \bar{p}_n e^{-\beta p^* \bar{p}_n} = \alpha \bar{p}_n e^{-\ln(\alpha) \bar{p}_n} = e^{\ln(\alpha)} \bar{p}_n e^{-\ln(\alpha) \bar{p}_n} = \bar{p}_n e^{\ln(\alpha) - \ln(\alpha) \bar{p}_n}$$

$$\bar{p}_{n+1} = \bar{p}_n e^{\ln(\alpha)(1-\bar{p}_n)}$$

E, assim, podemos escrever a equação discreta para a nova variável dependente  $\bar{p}_n$  adimensional envolvendo apenas um parâmetro  $r = \ln(\alpha)$ ,

$$\bar{p}_{n+1} = \bar{p}_n e^{r(1-\bar{p}_n)}$$

que a torna muito mais simples.

### Exemplo 3.20

Considerando um modelo dado por

$$P_{n+1} = 0.5 P_n e^{-0.2 P_n}$$

verifique que podemos adimensionalizá-lo escrevendo-o como:

$$\bar{p}_{n+1} = \bar{p}_n e^{\ln(0.5)(1-\bar{p}_n)}$$

## 3.18 Problemas propostos

1. **Contaminação radioativa:** Apresente um modelo matemático discreto de contaminação radioativa. Pesquise e descubra a taxa de decaimento da radiação do elemento químico  $^{137}\text{Cs}$  (Césio-137) e a meia vida. O elemento Césio emite a partícula  $\beta$  e raios  $\gamma$  transformando-se  $\text{Ba}$  (Bário).
2. **Pontos periódicos de uma função:** Numa análise gráfica, observamos que um ponto periódico de  $f(x)$  de período 2 pode ser representado por um retângulo com dois vértices sobre a diagonal principal e os outros dois vértices sobre o gráfico de  $f(x)$ . Procure exemplos de funções que possuem pontos de período maior do que 2.

3. **Evolução da população terrestre:** Pensemos na população atual da terra e utilizando a modelagem matemática responda as seguintes questões:
- a) Qual é a quantidade de pessoas por  $m^2$  na superfície terrestre?
  - b) Qual é a densidade demográfica de sua cidade?
  - c) A distribuição da população terrestre é homogênea?
  - d) Quais os principais impactos do crescimento populacional? O que isso acarreta para o ambiente?
  - e) Quantas pessoas o nosso planeta Terra poderá suportar e ser ao mesmo tempo sustentável?
  - f) Qual a população do planeta em 2015, se utilizarmos o modelo da seção 3.6?
4. **Resolvendo uma equação discreta:**
- a) Verifique que a equação discreta  $x_{n+1} = x_n + 2^n$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , não autônoma de primeira ordem com a condição inicial em que  $x_0 = 1$  tem como solução  $x_n = 2^n$ ,  $n \in \mathbb{N}$ .
  - b) Encontre a solução de  $x_{n+2} - 4x_{n+1} + 13x_n = 0$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , com a condição inicial em que  $x_0 = 0$  e  $x_1 = 1$ .
  - c) Encontre a solução de  $x_{n+3} + 8x_n = 0$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , com a condição inicial em que  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = 1$  e  $x_2 = 0$ .
  - d) Encontre uma solução geral de  $e^{n+2}x_{n+2} - 5e^{n+1}x_{n+1} + 6e^n x_n = 0$ ,  $n \in \mathbb{N}$ .
5. **Preservação de espécies:** Pesquise o problema de preservação de uma espécie de aves que vive numa região contendo três ilhas vizinhas I, J e K. Considere que na população estável de 35 000 aves, em cada ano 10% das aves que vive na ilha I migra para ilha J, 20% das aves que vive na ilha J migra para ilha K, e 5% das aves que vive na ilha K migra para ilha I. Denotando por  $I_n$ ,  $J_n$  e  $K_n$  as respectivas populações de aves das ilhas I, J e K no  $n$ -ésimo ano antes da migração, qual deve ser o número de aves em cada ilha depois 2 anos se inicialmente as populações eram  $I_0 = 10\,000$ ,  $J_0 = 5\,000$  e  $K_0 = 20\,000$  aves. Será que a população das aves convergirá para um certo número em cada ilha e se estabilizará?
- Sugestão: Escreva o sistema de equações discretas:
- $$I_{n+1} = 0.90I_n + 0.05K_n, \quad J_{n+1} = 0.10I_n + 0.80J_n, \quad K_{n+1} = 0.95K_n + 0.20J_n$$

6. **População com 3 faixas etárias:** Dada a matriz transição  $M$  de uma população com três faixas etárias jovens, adultos e idosos. Se não ocorrer nascimento e todo ano 2% da população jovem fica adulto, 3% da população adulta torna-se idosa. Encontre o estado estacionário destas populações. Sugestão: Resolva o sistema de equações  $X = MX$  em que

$$X_k = \begin{bmatrix} J_k \\ A_k \\ I_k \end{bmatrix} \quad M = \begin{bmatrix} 0.98 & 0.0 & 0 \\ 0.02 & 0.97 & 0 \\ 0.00 & 0.03 & 1 \end{bmatrix}$$

7. **Explorando a torre de Hanoi:** Supondo que cada movimento de um disco da torre de Hanói demorasse apenas  $10^{-1}$  segundos, quanto tempo os monges de um mosteiro levariam para mover os 64 discos de acordo com esta regra? Será que eles viveriam até o final dos tempos?
8. **Sequência de Fibonacci:** Verifique que se escrevermos a equação de Fibonacci na forma matricial

$$X_N = F X_{N-1} \quad (3.23)$$

em que

$$X_N = \begin{bmatrix} f_n \\ f_{n-1} \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

podemos obter as raízes da equação característica associada à matriz  $F$ , calculando o  $\det(F - \lambda I) = 0$ . Obtidas as raízes da equação característica, encontre os autovetores correspondentes.

9. **Identidade de Cassini:** Considerando a sequência de Fibonacci  $f_n$  mostre que

$$F^2 = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad F^n = \begin{bmatrix} f_{n+1} & f_n \\ f_n & f_{n-1} \end{bmatrix}$$

para todo  $n \geq 1$  considerando  $f_0 = 1$  e  $f_1 = 1$ . Em seguida verifique a Identidade de G. D. Cassini (1625 – 1712) dada por

$$f_{n+1} f_{n-1} - f_n^2 = (-1)^n.$$

10. **Sistema de equações discretas:** Resolva o sistema de equações discretas e discuta a sua estabilidade analisando os autovelores da matriz de transição

$$\begin{bmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & -11 & 6 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_n \\ y_n \\ z_n \end{bmatrix}$$



11. **Subespaço vetorial das soluções:** Se considerarmos o espaço vetorial  $V = \mathbb{R}^\infty$  (POOLE, 2004), verifique que o conjunto  $S = \{f_1, f_2, f_3, \dots\} \subset V$  com  $f_{n+2} = f_n + f_{n+1}$  é um subespaço vetorial de  $V$ .
12. **Equação discreta linear não homogênea:** Considere a equação discreta linear não homogênea de segunda ordem  $x_n - 5x_{n-1} + 6x_{n-2} = 1 + n$ . Como a parte não homogênea da equação é um polinômio do primeiro grau em  $n$ , mostre que a solução particular deve ser do tipo  $x_{np} = b_1 + b_2n$ , então encontre os valores das constantes de  $b_1$  e  $b_2$  que a satisfaz.
13. **Biorremediação:** Na cinética de biorremediação considerada no Exercício 2 da Unidade 2 em que um produto biodegradado de acordo com a tabela 3.17.1:

**Tabela 3.17.1** Tempo x Concentração

t (dias)	C(mg/L)
0	500
2	450
5	375
7	350
10	298
15	215

- a) Explore um modelo de degradação com uma equação discreta;
- b) De acordo com o modelo encontre o tempo  $t_{\frac{1}{2}}$  em que a quantidade de material biodegradado é reduzida a metade.
14. **Solução próxima do equilíbrio:** Num modelo ambiental foi observado que o processo dinâmico se propaga de acordo com a equação discreta
- $$4p_n = 3p_{n-1}^2 - 2p_{n-1} + 3, \quad \text{com } n = 1, 2, 3, \dots$$
- a) Explore a equação discreta com uma condição inicial  $p_0$  do modelo e calcule a(s) solução(ões) de equilíbrio  $p^*$ ;
- b) De acordo com o modelo, encontre uma relação linear que leva a uma boa aproximação para solução próxima de uma solução constante.
- Sugestão: Faça  $p_n = p^* + x_n$  com  $x_n$  pequeno.
15. **Equação discreta logística:** Com o valor de  $\lambda = 0.3$  explore a equação discreta  $x_n = \lambda x_{n-1}(1 - x_{n-1})$  a partir de uma semente  $x_0 = 0.123$ .

16. **Modelo de May:** Pesquise e explore o modelo de May. Faça simulações para várias populações alterando os valores dos parâmetros  $r_0$  e  $K$ .
17. **Poluição de um rio:** Estimando os valores de  $q_L$ ,  $\phi_L$ ,  $\delta_L$  e  $C^k$  ou pesquisando tais valores num rio próximo de sua residência, estabeleça o comportamento de poluição no instante  $k + 1$ , em função da poluição num instante inicial. Com os valores obtidos elabore um gráfico de  $C^{k+1}$  em função de  $C^k$ . Analise o gráfico e chegue às suas conclusões.
18. **Modelo de poluição de um rio com compartimentos:** Elabore um modelo de poluição de um rio considerando  $n$ ,  $n \geq 2$  compartimentos. Faça uma simulação e ilustre o nível de poluição nos  $n$  compartimentos admitindo que só ocorreu uma descarga acidental de poluentes no  $i$ -ésimo  $1 \leq i \leq n$  compartimento  $C^i$ .
19. **Números plásticos:** Mostre que a equação discreta  $P(n + 1) = P(n - 1) + P(n - 2)$ , para  $n \geq 3$  linear de ordem com  $P(0) = 1$ ,  $P(1) = 1$ ,  $P(2) = 1$  tem como solução a seqüência de Padovan, dada por  $1, 1, 1, 2, 4, 5, 7, 9, 12, \dots$   
  
Do mesmo modo que o limite da razão entre dois números grandes sucessivos de Fibonacci gera o número áureo, o limite da razão entre dois números sucessivos grandes de Padovan, nos dá o número plástico  $p = 1.324717957$ . Por que a seqüência de Padovan aumenta mais lentamente do que a de Fibonacci? Alguns números, tais como 3, 5 e 21, são ambos Fibonacci e Padovan. Será que tem outros? Se tiver, quantos são? Um número finito ou infinito deles? Alguns números de Padovan, tais como 9, 16 e 49, também são quadrados perfeitos. Será que têm outros? As suas raízes quadradas são 3, 4 e 7, também números de Padovan. É isto uma coincidência ou uma regra geral? Pesquise os números de Padovan e verifique se eles aparecem em alguns problemas ambientais.
20. **Dinâmica populacional:** Elabore um modelo de dinâmica populacional do tipo de Euler constituído de 3 faixas etárias: jovens, adultos e idosos e faça simulações.
21. **Explorando modelos com o Jogo da Vida:** Faça simulações de vida artificial em [www.bitstorm.org/gameoflife](http://www.bitstorm.org/gameoflife) do autor J. Conways ou elabore seu programa com suas hipóteses para simular a evolução de populações ou de recursos naturais.

22. **Classificando um modelo:** Elabore um modelo ambiental e apresente uma discussão justificando se o modelo é: linear ou não linear; estático ou dinâmico; estocástico ou determinístico. Com que ferramenta matemática o modelo pode ser tratado: geometricamente; cálculo algébrico; trigonométrico; equações discretas; equações diferenciais ordinárias ou parciais; otimização controle etc. Você pode resolvê-lo analiticamente ou só numericamente? As equações ou inequações que o representam são consistentes? Ele é robusto, ou seja, pequenas variações dos parâmetros levam a pequenas variações no comportamento do modelo? O modelo se aplica em um ou vários campos? Ele é simplificado ou ambicioso? Ele pode ser mais realista? Ele sugere novas ideias? Ele requer novos conceitos? novas técnicas? Ele requer observações ou experimentos? Você pode estimar os parâmetros envolvidos no modelo? Que aspectos da situação ele explica e o que ele não pode explicar? Quais são suas limitações? Podes elaborar outro modelo da mesma situação? Podes simplificá-lo? Podes generalizá-lo?

# UNIDADE 4

Modelos com EDO



## 4.1 Introdução às Equações Diferenciais Ordinárias

Nesta unidade abordaremos os modelos matemáticos contínuos com equações diferenciais ordinárias (edo). Vimos que o estudo da dinâmica populacional visa a descrição do número de indivíduos de uma população ao longo do tempo, variável esta que é naturalmente discreta como tratada na unidade anterior. Entretanto, em alguns casos podemos considerar o número de indivíduos de uma grande população  $p$  variando continuamente com a variável independente tempo  $t$  pertencente ao conjunto dos números reais.

Neste caso, um modelo matemático da evolução populacional, dependente da variável tempo  $t$ , pode ser elaborado de modo a determinarmos uma função contínua,

$$p : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+,$$

em que  $p(t)$  representa o número total de indivíduos da população no instante  $t$ ,  $\mathbb{R}$  o conjunto dos números reais e  $\mathbb{R}^+$  o conjunto dos números reais não negativos.

Uma função  $p(t)$  pode ser a solução de um problema de valor inicial, constituído de uma equação diferencial ordinária (edo) relacionando a taxa de variação da população com o tamanho da população num instante de tempo, e de uma condição inicial  $p(0)$ , que representa a população ou uma estimativa da população num instante considerado inicial.

Uma generalização deste problema, bem como outros problemas ambientais, que dependem de uma ou mais variáveis espaciais e do tempo, geralmente são modelados por funções contínuas de duas ou mais variáveis reais satisfazendo um problema de valor inicial e condições de contorno. Neste caso, temos uma equação diferencial parcial com valor(es) inicial(is) e condições de contorno que serão abordados na Unidade 5.

Apresentaremos algumas equações diferenciais ordinárias para descrever problemas ambientais. Alguns deles relativos à dinâmica populacional, aos recursos naturais e à poluição que já foram tratados como modelos discretos na Unidade 3.

Os modelos dos problemas básicos que abordaremos podem ser aplicados e generalizados para outros fenômenos e situações semelhantes que ocorrem nas diversas áreas da ciência.

## 4.2 Equação de balanço

As ferramentas matemáticas como o Cálculo Diferencial e Integral que tratam dos elementos infinitesimais, da taxa de variação indicando o crescimento ou decaimento, dos pontos extremos e de equilíbrio, da concavidade, da integração de funções etc. são úteis para a solução de problemas de valor inicial.

A taxa de variação instantânea de uma quantidade, por exemplo, a quantidade de poluentes em uma represa, dada por uma função contínua  $q(t)$ , dependente do tempo  $t$ , é representada pela sua derivada  $\frac{dq(t)}{dt}$  como em (THOMAS et al, 2004). Tal quantidade é essencial no estabelecimento de modelos abordados ambientais que levam à equações diferenciais.

Em geral, uma equação de balanço para uma quantidade  $q(t)$  num certo domínio  $\Omega \in \mathbb{R}^3$  num certo instante  $t$  nos afirma que a taxa de variação de  $q(t)$ ,  $\frac{dq(t)}{dt}$ , é igual a uma quantidade existente  $q_e$  de  $q(t)$  mais alguma fonte  $F$ , que de alguma forma está entrando no domínio  $\Omega$ , menos a quantidade que está saindo  $q_s$  e uma degradação (ou sumidouro)  $S$  que está saindo ou sendo retirada de  $\Omega$  considerada naquele intervalo de tempo.

$$\frac{dq(t)}{dt} = q_e + F - q_s - S$$

Caso a quantidade  $q(t)$  seja o número de indivíduos de uma população o balanço se faz considerando os nascimentos e imigrantes menos o número de mortes e emigrantes. Equações de balanço deste tipo serão utilizadas na abordagem de problemas ambientais descritos nesta unidade.

## 4.3 Modelos de crescimento populacional

Na unidade anterior, vimos a importância de prever o crescimento de uma população numa certa região e agora vamos modelar a dinâmica populacional utilizando variáveis contínuas.

### 4.3.1 Lei de Malthus e o crescimento livre

Se considerarmos que o crescimento populacional obedece a Lei de Malthus, a qual estabelece que a taxa de variação da população num instante  $t$  dada por:

$$\frac{dp(t)}{dt}$$

é proporcional à população  $p(t)$  em cada instante  $t$  obtemos a seguinte equação diferencial ordinária:

$$\frac{dp(t)}{dt} = r p(t) \quad (4.1)$$

para  $t > 0$ , em que a constante de proporcionalidade  $r$ , conhecida como taxa de crescimento específica, representa a diferença relativa entre a quantidade de nascimentos e a quantidade de mortes de indivíduos da população  $p(t)$  no instante  $t$ , negligenciando a imigração e a emigração populacional.

Para verificação da solução de um problema de valor inicial, como o representado pela equação (4.1) com uma condição inicial  $p(t_0) = p_0$ , estabelecemos o seguinte teorema de existência e unicidade de solução de um PVI conforme BOYCE & DIPRIMA (1999):

#### **Teorema 4.1: Existência e unicidade**

Seja  $R = [a, b] \times [c, d]$  uma região retangular do plano  $xy$  que contém o ponto  $(x_0, y_0)$ . Se  $f(x, y)$  e  $\frac{\partial f(x, y)}{\partial y}$  são contínuas em  $R$ , existe algum intervalo aberto  $I_0 = (x_0 - h, x_0 + h)$  com  $h > 0$  contido em  $[a, b]$ , e uma única função  $y(x)$  definida em  $I_0$  que é uma solução do problema de valor inicial

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Uma equação do tipo (4.1) em que  $f(x, y) = \frac{p(x)}{q(y)}$  em que  $p$  e  $q$  são funções contínuas em uma região  $R$  é chamada de equação diferencial de variáveis separáveis.

Para resolver uma equação com variáveis separáveis

$$\frac{dy}{dx} = \frac{p(x)}{q(y)}$$

observamos que a primitiva da função  $q(y)$  pode ser calculada do seguinte modo:

$$\int q(y) dy = \int q(y(x)) \frac{dy}{dx} dx$$

Assim, a equação diferencial com variáveis separáveis pode ser escrita como

$$q(y) \frac{dy}{dx} = p(x)$$

e a solução pode ser obtida pelo **Método de Separação de Variáveis** integrando cada um dos lados com relação a uma das variáveis:

$$\int q(y) dy = \int p(x) dx + c$$



em que  $c$  é uma constante de integração.

Uma solução geral da equação (4.1) pode ser obtida pelo Método de Separação de Variáveis. De fato, separando as variáveis dependente  $p$  e independente  $t$  reescrevemos a equação (4.1) na seguinte forma:

$$\frac{1}{p} dp = r dt$$

em que o primeiro membro representa o índice de crescimento relativo da população.

Integrando membro a membro da equação anterior, o primeiro membro com relação a variável  $p$  e o segundo com relação a variável  $t$ , conforme BOYCE & DIPRIMA (1999), obtemos:

$$p(t) = C e^{rt}$$

em que  $C$  é uma constante de integração que pode ser obtida utilizando a condição inicial.

De fato, fazendo  $t = 0$  na solução geral obtemos o valor da constante de integração  $p(0) = C = p_0$  e, assim, a solução da equação (4.1) com  $p(0) = p_0$  é dada por:

$$p(t) = p_0 e^{rt} \quad (4.2)$$

para  $t > 0$ .

#### Exemplo 4.1

Considere os dados do Exemplo 3.9 da Unidade 3, em que a população da terra era aproximadamente 600 milhões de habitantes no ano de 1 650 e, com a suposição de que ela cresceu a uma taxa proporcional ao tamanho da população em cada instante até 1 950, quando atingiu 2 500 milhões de habitantes, vamos modelar a variação populacional de forma contínua utilizando os conceitos de equações diferenciais ordinárias.

Podemos formular um modelo populacional contínuo consistindo de um problema de valor inicial com a equação (4.1)

$$\frac{dp(t)}{dt} = r p(t)$$

e a condição inicial  $p_0 = 600\,000\,000$  indivíduos no ano de 1 650.

Assim, de acordo com o procedimento descrito anteriormente, obtemos a solução para  $p(t)$  dada por:

$$p(t) = 600\,000\,000 e^{rt}$$

que descreve a população em cada instante  $t > 0$ .

A taxa  $r$  pode ser obtida considerando a população em dois instantes distintos. Como 300 anos depois, o valor da população era dada por  $p(300) = 2\,500\,000\,000$ , obtemos uma equação exponencial na variável  $r$ :

$$2\,500\,000\,000 = 600\,000\,000 e^{r \cdot 300},$$

ou seja,  $\frac{2\,500\,000\,000}{600\,000\,000} = 4.166666667 = e^{r \cdot 300}$ .

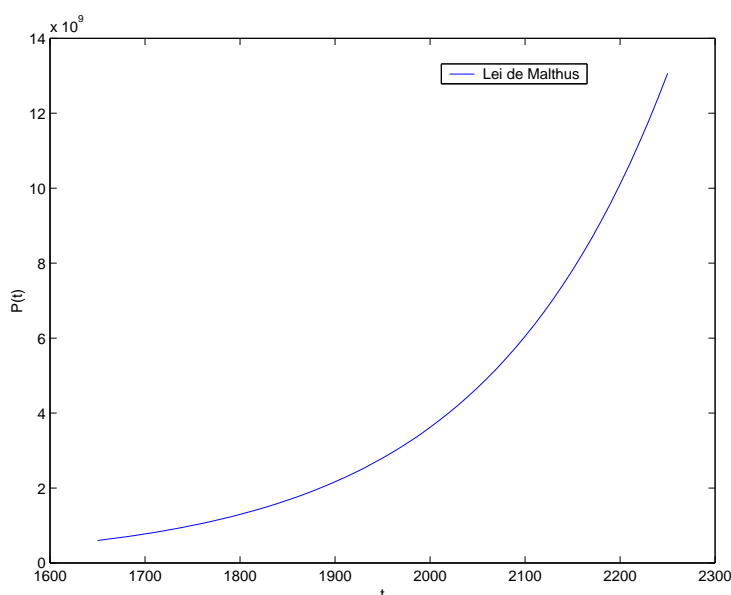
Resolvendo a equação exponencial anterior, aplicando o logaritmo neperiano em cada um dos membros obtemos:

$$\ln(4.166666667) = \ln(e^{r \cdot 300}) \Rightarrow 1.427116356 \approx r \cdot 300 \Rightarrow r \approx 0.004757054520$$

O valor da taxa de crescimento específico da população é  $r = 0.005134816803157$  e, portanto, a solução do problema de valor inicial é a função exponencial

$$p(t) = 600\,000\,000 e^{0.005134816803157(t-1650)}$$

como mostra a Figura 4.1:



**Figura 4.1:** Crescimento exponencial da população

Para um tempo  $t = 100$  anos após o instante inicial, o número de indivíduos da população estimada pelo modelo contínuo de Malthus igual a

$$p(100) = 600\,000\,000 e^{0.005134816803157 \cdot (1750-1650)} \approx 965\,489\,385$$

Isto equivale a afirmar que, no ano de 1750 a população teria quase um milhão de indivíduos.

E, depois de 350 anos, teríamos uma população  $p(350) = 600\,000\,000 e^{0.005134816803157 \cdot 350} = 3\,619\,588\,181$  indivíduos.

Para estimar o ano em que a população atingiria 10 bilhões ( $10^{10}$ ) de indivíduos, de acordo com este modelo basta resolvermos a equação algébrica para um instante específico  $t = T$ , em que  $p(T) = 10^{10}$ .

Desta forma segue que:

$$10^{10} = 600\,000\,000 e^{0.005134816803157 (T-1650)}$$

e assim, obtemos o tempo  $T \approx 1650 + 591$  anos.

O modelo adotado mostrou que, a partir da contagem inicial do ano 1650, se a população continuasse crescendo da mesma forma, teríamos 10 bilhões de pessoas no ano 2241.

Além deste modelo simples de crescimento da população representado graficamente por uma curva exponencial como na Figura 4.1, temos outros modelos mais realistas como o modelo de crescimento logístico e suas generalizações, que levam em consideração outros fatores que a longo prazo podem influenciar a dinâmica populacional.

#### 4.3.2 Crescimento logístico de uma população

Notamos que as populações geralmente não crescem ilimitadamente, caso contrário a população tenderia para o infinito com o tempo  $t$  conforme Figura 4.1.

Uma população em que todo indivíduo é gerado pelos pais, ou seja, não ocorre a geração espontânea de qualquer indivíduo, certamente depende do suprimento de alimentos, do espaço físico, geralmente limitado, bem como de outros recursos que a longo prazo podem desacelerar ou mesmo estagnar o seu crescimento.

No modelo logístico contínuo de Verhulst a taxa de crescimento específico da população  $r(p)$  é uma função da população que em cada instante nos dá a equação logística:

$$\frac{dp}{dt} = r(p) p, \quad (4.3)$$

em que  $p = p(t)$  representa a população num instante  $t$ .

A taxa de crescimento específica  $r(p)$  neste modelo é escolhida de modo a considerar algumas hipóteses biológicas como espaço, alimento etc. de forma que quando a população é pequena o crescimento é rápido até atingir uma certa

quantidade de indivíduos num certo instante e, em seguida, devido as limitações que vão surgindo o crescimento passa a ser mais lento até encontrar um ponto de equilíbrio e se estabilizar.

Para descrever um crescimento rápido quando a população  $p$  é pequena, a função  $r(p)$  representa a taxa de crescimento praticamente igual a uma constante  $r_0$ , ou seja,

$$\lim_{p \rightarrow 0} r(p) = r_0 > 0.$$

Por outro lado, quando esta população aumenta, a taxa de crescimento  $r(p)$  diminui de modo que,

$$\lim_{p \rightarrow p_{\max}} r(p) = 0$$

ou seja,  $p$  assume um comportamento assintótico quando  $p$  cresce conforme seção 3.14.

Uma função mais simples que satisfaz estas propriedades é uma função linear dada por:

$$r(p) = r_0 - \alpha p$$

em que  $\alpha$  é uma constante positiva. Esta expressão para  $r(p)$ , descreve satisfatoriamente as hipóteses biológicas consideradas anteriormente.

A equação logística é muito utilizada, principalmente, quando se trata de modelos de população de animais e de alguns recursos naturais e, como a taxa  $r = r(f(p))$  depende da população, é conhecida como hipótese da dependência da densidade da população, ou seja dos número de indivíduos da população.

Assim, o modelo de Verhulst para o crescimento de uma população com restrições é dado pela equação diferencial ordinária não linear de primeira ordem:

$$\frac{dp(t)}{dt} = (r_0 - \alpha p(t)) p(t) = r_0 p(t) - \alpha p(t)^2 \quad (4.4)$$

Sabemos que a taxa de crescimento  $r_0$  na equação (4.4) é proporcional a percentagem de indivíduos da espécie. Observamos que constante de proporcionalidade  $\alpha \neq 0$  representa o decaimento da população devido a competição interna de pares de indivíduos da mesma espécie que disputam por espaço, alimento etc. ou devido a mortalidade.

Nas equações diferenciais ordinárias não lineares ou mais complexas, como a equação logística, geralmente fazemos uma análise qualitativa das mesmas, ou seja, determinamos os pontos de equilíbrio da solução, ponto em que ela muda de concavidade, o comportamento da assintótico solução no infinito etc.

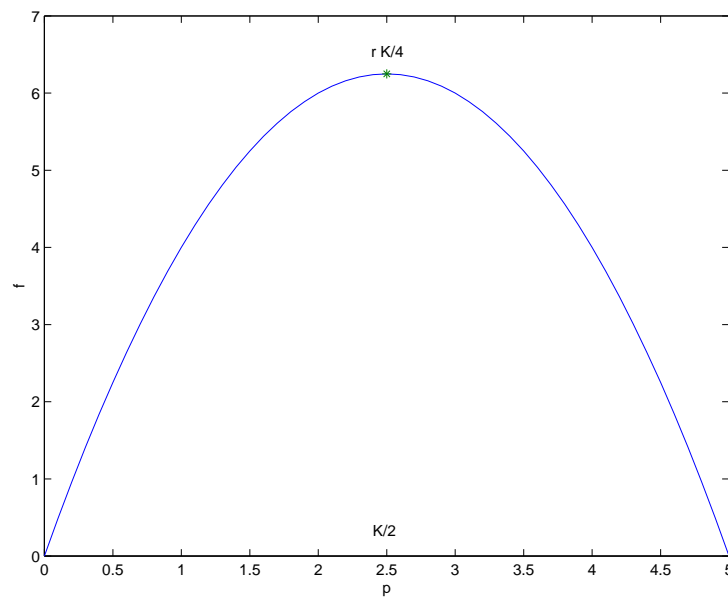
De fato, na equação logística fazendo  $K = \frac{r_0}{\alpha} \neq 0$ , chamada capacidade biótica do meio, ou seja, a capacidade limite da população, uma vez que  $\alpha \neq 0$ , a equação (4.4) torna-se

$$\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t) \left(1 - \frac{p(t)}{K}\right) \quad (4.5)$$

Analisando qualitativamente a equação (4.5), os possíveis pontos de equilíbrio em que a taxa de variação da população é nula, isto é,  $\frac{dp(t)}{dt} = 0$ , são obtidos pelas raízes da função

$$f(p) = r_0 p \left(1 - \frac{p}{K}\right),$$

cujo gráfico é uma parábola côncava, como a mostrada na Figura 4.2 a seguir.



**Figura 4.2:**  $f(p)$  e os pontos de equilíbrio

Observamos que os pontos de equilíbrio, soluções de  $r_0 K p - r_0 p^2 = 0$ , ocorrem quando  $p = 0$  ou quando  $t \rightarrow \infty$ , em que  $p(t)$  satisfaz a relação de saturação:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p(t) = K$$

ou seja, quando a população atinge o máximo de indivíduos  $p_{\max} = K$ .

O valor  $K$ , que é chamado de capacidade de suporte (biótica) de cada população, é determinado pelas condições dos recursos disponíveis do meio ambiente onde ela se encontra.

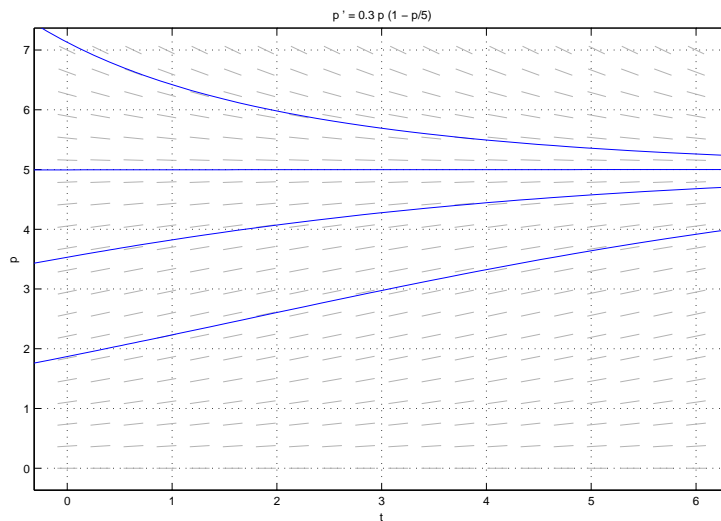
Numa equação diferencial de primeira ordem, a derivada primeira de uma função num ponto representa a inclinação do gráfico da função neste ponto, e

uma equação diferencial de primeira ordem do tipo

$$\frac{dp(t)}{dt} = f(t, p(t))$$

estabelece uma relação entre a inclinação do gráfico da função desconhecida  $p(t)$  e a função  $f(t, p(t))$ . Assim, uma equação diferencial de primeira ordem é geometricamente um campo de direções dado pelas inclinações de  $p(t)$  nos diversos pontos do seu domínio conforme BOYCE & DIPRIMA (1999).

Observamos o campo de direções da equação diferencial logística  $\frac{dp(t)}{dt} = 0.3p(1 - p/5)$  na Figura 4.3 representados no plano  $t \times p$ , em que visualizamos também o comportamento de soluções aproximadas da equação com várias condições iniciais.



**Figura 4.3:** Campo de direções e soluções

Podemos observar ainda na Figura 4.3 que as soluções da equação logística convergem para a assíntota do gráfico, reta que representa a população constante,  $p(t) = K = 5$ .

Considerando o valor inicial da população  $p(0) = p_0$ , a solução do problema não linear de valor inicial dado por

$$\begin{cases} \frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t) \left( \frac{K - p(t)}{K} \right) \\ p(0) = p_0 \end{cases}$$

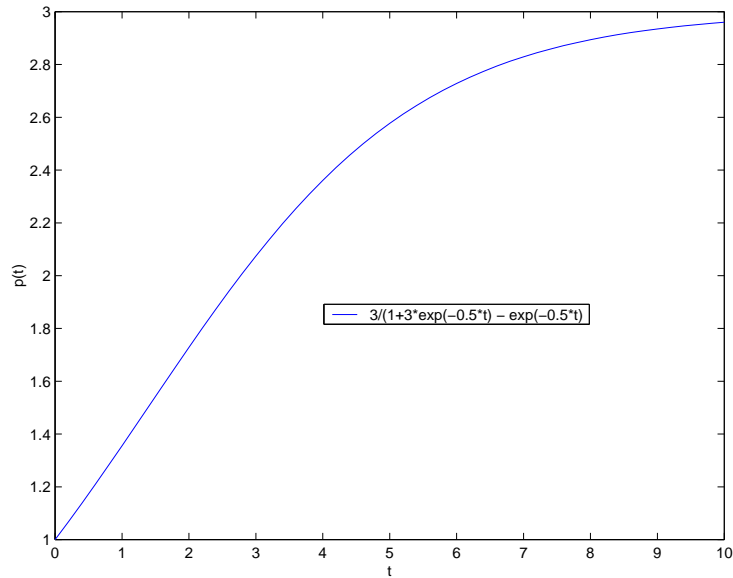
pode ser obtida pelo método de separação de variáveis. De fato, separando as variáveis  $t$  e  $p(t)$  obtemos

$$\frac{dp}{p \left( \frac{K-p}{K} \right)} = r_0 dt$$

Integrando ambos os lados da equação anterior, de um lado com relação a variável  $p$ , decompondo em frações parciais e, de outro lado com relação a variável  $t$ . Levando em consideração a condição inicial obtemos a solução:

$$p(t) = \frac{K p_0}{p_0 + K e^{-r_0 t} - p_0 e^{-r_0 t}} = \frac{K p_0}{p_0 + (K - p_0) e^{-r_0 t}} \quad (4.6)$$

que descreve a população num instante  $t$  segundo o modelo logístico, conforme visto em 2.8.5 no ajuste do modelo logístico.



**Figura 4.4:** Solução da equação logística

#### Exemplo 4.2

Considere um crescimento de uma população (dada em milhares de habitantes) numa região descrito pela equação diferencial logística

$$\frac{d(p(t))}{dt} = 0.5 p(t) \left( 1 - \frac{p(t)}{3} \right),$$

em que  $r_0 = 0.5$ ,  $K = 3$  e  $p_0 = 1$ .

A solução geral deste problema é dada pela função:

$$p(t) = \frac{3 \times 1}{1 + 2 e^{-0.5t}}.$$

O gráfico da solução da equação logística anterior com a condição inicial  $p_0 = 1$  (mil habitantes), é a curva mostrada na Figura 4.4, conhecida como sigmóide.

### 4.3.3 Taxa de crescimento intrínseca de uma população

A maneira como as bactérias surgem na natureza e o que determina sua taxa de crescimento depende de vários fatores, principalmente da energia disponível no ambiente considerado.

Além de afetar o tempo de reprodução de uma dada bactéria, a concentração de nutrientes no meio pode ser um fator controlador da velocidade de crescimento da população, que diminui à medida que a concentração de nutrientes do meio diminui.

#### Exemplo 4.3

Considere que num laboratório encontra-se uma amostra de uma população de bactérias com a quantidade inicial  $p(0) = 1$ . Se a taxa de crescimento intrínseca  $r = 0.31$  de aumento natural da amostra e se a capacidade de suporte do meio onde se encontram as bactérias é  $K = 5$ , o problema de valor inicial é descrito pela equação diferencial logística (4.4) e torna-se:

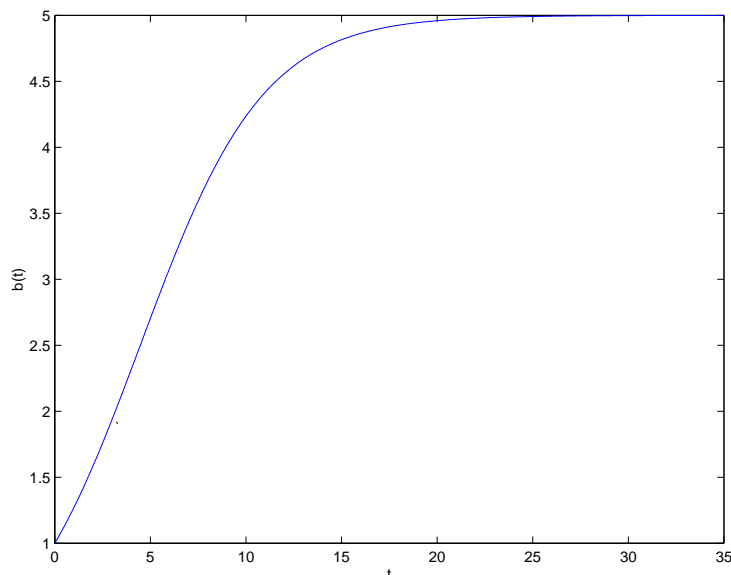
$$\frac{dp(t)}{dt} = 0.31 p(t) \left(1 - \frac{p(t)}{5}\right)$$

e a condição inicial  $p(0) = 1$ .

A solução deste problema é dada por:

$$p(t) = \frac{5}{1 + 4e^{-0.31t}} \quad t \geq 0$$

conforme exibido na Figura (4.5) a seguir:



**Figura 4.5:** Crescimento logístico de bactérias



Podemos observar na Figura 4.5 o crescimento da cultura de bactérias nas primeiras horas. Verificamos que após completar o primeiro dia, a população de bactérias se estabiliza. De fato, percebemos que a população não cresce infinitamente, pois há um fator limitante que, nesse caso, pode ser devido aos recursos alimentares ou energéticos do meio da cultura.

No cálculo do limite da população de bactérias quando  $t$  cresce, obtemos o valor assintótico da solução dado por

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{5}{1 + 4e^{-0.31t}} = 5$$

que é o valor de equilíbrio da população.

#### 4.3.4 Modelos de dinâmica populacional mais gerais

Outros modelos de dinâmica populacional do tipo densidade dependente, isto é, modelos em que a taxa de variação intrínseca da população é densidade dependente dada por:

$$\frac{dp(t)}{dt} = f(p(t)),$$

foram propostos no último século.

A equação anterior nos mostra que a variação do número de indivíduos da população é igual a uma função  $f(p)$ . De um modo geral,  $f(p)$  representa a quantidade ou número de indivíduos da população que nasceram mais os que imigraram menos o número de indivíduos que morreram e os que emigraram, ou seja;

$$f(p(t)) = N + I - M - E$$

em que  $N$  é a taxa de nascimentos,  $I$  a taxa de imigrantes,  $M$  a taxa dos de mortalidade e  $E$  a taxa dos emigrantes. A seguir abordaremos alguns modelos que podem ser utilizados nos problemas ambientais.

#### 4.3.5 Modelo com limiar

Um modelo populacional com um limiar  $L$  em que  $L > 0$  e menor do que o limite de saturação  $K$  é dado, pela equação diferencial ordinária para  $p(t)$ :

$$\frac{dp(t)}{dt} = r \left( 1 - \frac{p(t)}{K} \right) \left( 1 - \frac{p(t)}{L} \right) p(t) \quad (4.7)$$

em que  $r > 0$  é a taxa intrínseca de crescimento.

Neste caso, verifica-se que ocorrem três pontos de equilíbrio  $p(t) = 0$ ,  $p(t) = K$  e  $p(t) = L$ . Com a condição inicial  $p(0) = p_0$ , pode-se analisar e refletir sobre as diversas possibilidades da evolução da solução com o tempo, variando-se a condição inicial temos:

- a)  $p_0 < L$ ;
- b)  $L < p_0 < K$ ;
- c)  $p_0 > K$ .

#### Exemplo 4.4

Considere o problema de valor inicial

$$\frac{dp(t)}{dt} = 0.5 \left( 1 - \frac{p(t)}{5} \right) \left( 1 - \frac{p(t)}{2} \right) p(t)$$

com condições iniciais  $p_0$  distintas do tipo:

- a)  $p_0 < 2$ ;
- b)  $2 < p_0 < 5$ ;
- c)  $p_0 > 5$ .

Com tais condições iniciais observamos o comportamento das soluções, se convergem ou divergem no plano de fase  $t \times p$ , conforme mostrado juntamente com os campos de direções na Figura 4.9.

#### 4.3.6 Modelo de Gompertz

O modelo estabelecido por Gompertz em 1825 propõe uma modificação da equação logística (4.4) de forma que:

$$\frac{dp(t)}{dt} = r p(t) \ln \left( \frac{K}{p(t)} \right) \quad (4.8)$$

em que, as quantidades reais  $r > 0$  e  $K = p_{\max}$  é o valor máximo da população.

Ele é utilizado na investigação de tipos de crescimento ou decrescimento de populações, crescimento de tumores, predição atuarial, entre outros.

Este modelo leva em consideração que a taxa de crescimento não é função linear de  $p(t)$  e nem polinomial, como ocorre no caso da equação logística (4.4) ou com limiar (4.6).

Como acontece com muitas equações diferenciais não lineares, a equação de Gompertz pode ser resolvida analiticamente utilizando uma mudança de variáveis do tipo:

$$q(t) = \ln \left( \frac{p(t)}{K} \right)$$

ou seja,  $p(t) = K e^{q(t)}$  ou  $e^{q(t)} = \frac{p}{K}$  que é conveniente neste caso.

Com esta substituição, obtemos uma equação diferencial linear de primeira ordem para  $q(t)$ ,

$$\frac{dq(t)}{dt} = -r q(t),$$

que é simples de resolver e cuja solução geral é bastante conhecida:

$$q(t) = C e^{-rt}$$

Retornando para a variável inicial  $p(t)$  e utilizando uma condição inicial  $p(0) = p_0$  obtemos a solução da equação de Gompertz dada por:

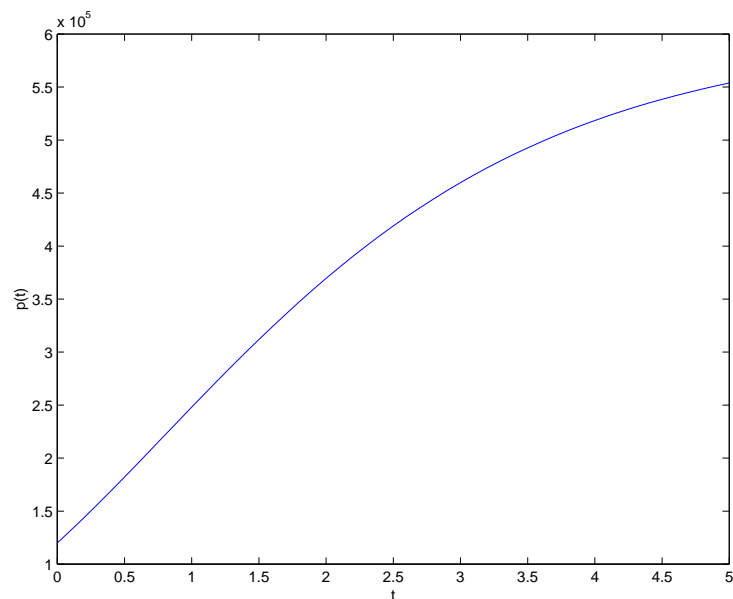
$$p(t) = K e^{\ln\left(\frac{p_0}{K}\right) e^{-rt}}$$

#### Exemplo 4.5

Mostramos que a solução analítica de um problema ambiental em que, a taxa  $r = 0.65$  por ano,  $K = 0.615 \times 10^6$  e  $\frac{p_0}{K} = 0.295$  é dada pela função:

$$p(t) = 0.615 \times 10^6 e^{\ln(0.295) e^{-0.65 t}}$$

cujo gráfico é ilustrado na Figura 4.6.



**Figura 4.6:** Solução do modelo de Gompertz

Verifique que os pontos de equilíbrio do modelo de Gompertz são os mesmos do modelo logístico. Além disso, o crescimento da curva solução do modelo de Gompertz é máximo quando o valor  $p_m = \frac{K}{e}$ , em que  $e \approx 2.7172$  é o número de Euler, a base dos logaritmos neperianos.

#### 4.3.7 Modelo de Montroll, Maitra e Goel

Em 1971 foi introduzido outra modificação do modelo logístico por Montroll, Maitra e Goel de modo que

$$\frac{dp(t)}{dt} = r p(t) \left( 1 - \left( \frac{p(t)}{K} \right)^\alpha \right) \quad (4.9)$$

em que a taxa intrínseca de crescimento da população é igual a  $r > 0$ .

Quando a população  $p(t)$  é pequena e cresce mais, a segunda parcela da taxa influencia dependendo da quantidade  $\alpha > 0$  e do valor máximo da população  $K > 0$ .

Os pontos de equilíbrio deste modelo são os mesmos do modelo logístico, isto é, fazendo  $\frac{dp(t)}{dt} = 0$  na equação anterior, obtém-se  $p(t) = 0$  ou  $p(t) = K$ .

Note que o valor do parâmetro  $\alpha$  é o indicador da posição do ponto de inflexão da solução, ponto em que o gráfico da solução muda de concavidade.

Além disso, quando  $\alpha = 1$  a equação anterior coincide com o modelo logístico e, neste caso, o ponto de inflexão da curva solução ocorre quando ela atinge o valor  $p_m = \frac{K}{2}$ .

Para determinar o ponto  $p_m$  em que o crescimento da população é máximo, ou seja,  $\frac{dp(t)}{dt} = 0$ , é suficiente considerar a derivada segunda da população em função do tempo

$$\frac{d^2p(t)}{dt^2} = 0,$$

isto é,

$$\frac{d}{dt} \left( r p(t) \left( 1 - \left( \frac{p(t)}{K} \right)^\alpha \right) \right) = 0.$$

#### 4.3.8 Mais generalizações da equação logística

Uma generalização da equação logística conhecida como hiperlogística foi introduzida por Blumberg em 1968 dada por:

$$\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t)^\alpha \left( 1 - \frac{p(t)}{K} \right)^\beta \quad (4.10)$$

em que  $\alpha$  e  $\beta$  são constantes reais.

Outra generalização da equação logística foi a introduzida por Tsoularis e Wallace em 2002 dada por:

$$\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t)^\alpha \left( 1 - \left( \frac{p(t)}{K} \right)^\beta \right)^\gamma \quad (4.11)$$

em que  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  são constantes reais.

Ultimamente, uma nova abordagem vem sendo dada aos modelos matemáticos de dinâmica populacional de modo que incluem alguns aspectos de incertezas presentes no fenômeno, o que não é possível através da teoria clássica das equações diferenciais. Esta abordagem utiliza a teoria de Conjuntos Fuzzy (JAFELICE, 2005) e a modelagem por regras fuzzy básicas que não abordaremos neste texto.

#### 4.4 Modelos de evolução de recursos naturais

A exploração dos recursos naturais animais ou vegetais é indispensável à sobrevivência das populações, mas os prejuízos econômicos e perdas humanas decorrentes de desastres naturais aumentaram no último século em razão do crescimento populacional, da urbanização desordenada, da exploração excessiva dos recursos naturais e, provavelmente, dos efeitos da mudança climática.

Neste sentido, a elaboração de modelos matemáticos para analisar o comportamento dos recursos naturais é importante, pois eles podem nos auxiliar na previsão de como populações que dependem deles podem sobreviver ou tender ao desaparecimento.

Com a elaboração de um modelo matemático adequado, podemos simular diversas situações para uma espécie que está sendo explorada e fazer previsões para direcionar a tomada de medidas convenientes para a sua preservação e, assim, contribuir com o desenvolvimento sustentável no planeta.

A quantidade de recursos naturais numa região também pode ser descrita pela equação logística à medida que a quantidade  $p(t)$  desses recursos varia com o tempo.

Nesta seção a variável  $p(t)$  que chamamos de população ou de poluição anteriormente, será referida mais genericamente como quantidade de recursos naturais.

De fato, a equação logística do tipo (4.4) é comumente utilizada também em modelos de recursos naturais (vegetais, minerais, etc.) cuja taxa intrínseca de crescimento  $r$  depende da quantidade  $p(t)$  destes recursos, ou seja  $r = r(p(t))$ .

Supomos que os recursos naturais de uma região sejam capazes de manter uma quantidade máxima fixa  $K$ . Escolhendo uma função  $r(p(t))$ , linear em  $p(t)$  de modo que  $r(0) = r_0$ , com  $r_0 > 0$ , a taxa de crescimento dos recursos naturais e,  $r(K) = 0$  com  $K > 0$  a capacidade de suporte dos recursos naturais.

Podemos aplicar a equação logística na forma (4.5) para exploração de recursos naturais:

$$\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t) \left(1 - \frac{p(t)}{K}\right)$$

Neste caso, supondo que o comportamento de um recurso natural não sofra a intervenção humana, de modo que se comporta logisticamente satisfazendo a equação anterior, obtemos a solução como em (4.5):

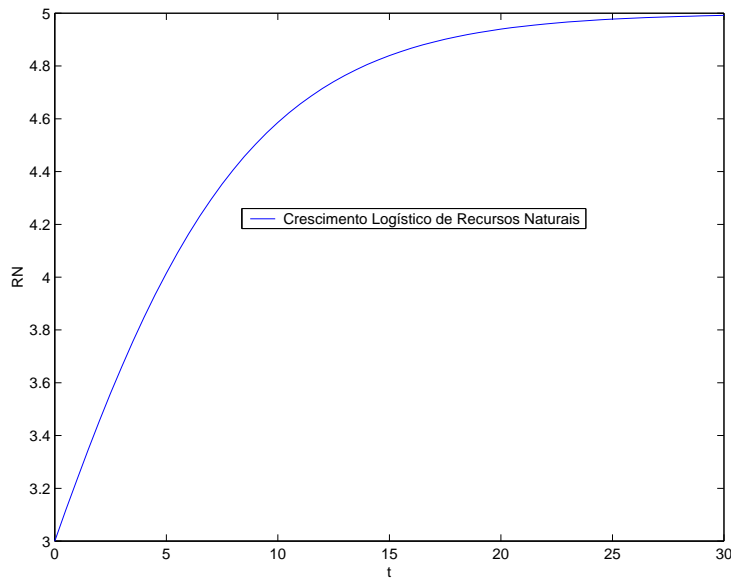
$$p(t) = \frac{K p_0}{p_0 + (K - p_0) e^{-r_0 t}}$$

#### Exemplo 4.6

Considerando os seguintes parâmetros de uma quantidade de um tipo de recurso natural com quantidade inicial  $p_0 = 2$ , a taxa intrínseca de crescimento natural  $r_0 = 0.22$  e a capacidade de suporte do recurso  $K = 15$ , obtemos a solução:

$$p(t) = \frac{15 \times 2}{2 + (15 - 2) e^{-0.22t}} = \frac{30}{2 + 13 e^{-0.22t}}$$

Graficamente temos a solução exibida na Figura 4.7 a seguir:



**Figura 4.7:** Crescimento logístico de recursos naturais

#### 4.4.1 Recursos naturais com exploração

Considere agora um problema em que a retirada do recurso natural seja constante. Neste caso, a equação logística (4.13) é alterada e torna-se mais geral, contendo uma parcela  $q$  representando a retirada constante deste recurso.

De fato, se observarmos que uma determinada quantidade de recurso natural explorado continuamente com uma taxa de retirada de recurso  $q$ , constante, então a equação anterior (4.2) torna-se mais geral conforme segue:

$$\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t) \left(1 - \frac{p(t)}{K}\right) - q \quad (4.12)$$

No equilíbrio, quando  $\frac{dp(t)}{dt} = 0$  não ocorre variação dos recursos naturais, obtemos os zeros da função quadrática  $f(p)$  dada por:

$$f(p) = r_0 p \left(1 - \frac{p}{K}\right) - q \quad (4.13)$$

para  $p > 0$ , cujo gráfico é côncavo conforme Figura 4.8, já que o coeficiente do termo quadrático é estritamente negativo.

As soluções de equilíbrio da equação algébrica (4.14) são as duas raízes de  $f(p)$  definidas por:

$$p_1 = \frac{K}{2} + \frac{\sqrt{r_0(r_0 K^2 - 4qK)}}{2r_0}$$

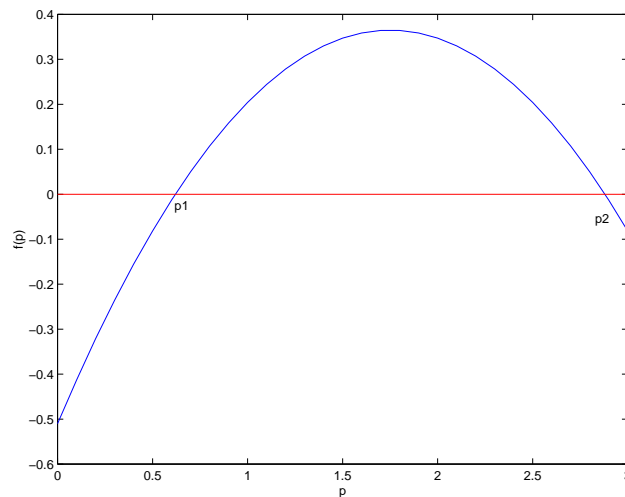
e

$$p_2 = \frac{K}{2} - \frac{\sqrt{r_0(r_0 K^2 - 4qK)}}{2r_0}$$

Quando a taxa de exploração contínua  $q$  é baixa, isto é

$$q < \max(f(p)) = f\left(\frac{K}{2}\right) = \frac{r}{4} K$$

$f(p)$  se anula em dois pontos  $p_1$  e  $p_2$  do intervalo  $[0, K]$ , temos o gráfico conforme segue na Figura 4.8.



**Figura 4.8:**  $f(p)$  concava

Notamos que:

1. Para  $p(t) < p_1$  e  $p(t) > p_2$  o gráfico de  $f(p)$  é negativo e, portanto,  $\frac{dp(t)}{dt} < 0$ , então concluímos que  $p(t)$  decresce nos intervalos  $(0, p_1)$  e  $(p_2, \infty)$ ;
2. Para  $p_1 < p(t) < p_2$ , em que  $f(p)$  é positivo, temos  $\frac{dp(t)}{dt} > 0$  e, consequentemente, os recursos naturais crescem no intervalo  $(p_1, p_2)$ ;

Além disso, se considerarmos uma quantidade de recursos naturais inicial  $p_0 < p_1$ ,  $p(t)$  decresceria para zero, ou seja, tenderia a ser extinta.

Para uma quantidade de recursos naturais inicial  $p_0$ ,  $p_1 < p_0 < p_2$ , esta tende a  $p_2$  (se este for um valor menor do que  $K$ ).

Em outras palavras,  $p_1$  é um ponto de equilíbrio instável e  $p_2$  um ponto de equilíbrio assintoticamente estável (BOYCE & DIPRIMA, 1999) conforme observamos na Figura 4.9.

Diferenciando a equação (4.9) com relação a  $t$  obtemos:

$$\frac{d^2p(t)}{dt^2} = \frac{r_0}{K} \frac{dp(t)}{dt} (-2p(t) + K)$$

Observe que a segunda derivada de  $p(t)$  é nula no valor médio  $p_m = \frac{K}{2}$ , em que a função  $p(t)$  muda de concavidade, como no caso da solução equação logística.

Verificamos que a função  $p(t)$  é côncava quando  $p(t) < p_1$  e  $p(t) > p_2$ , enquanto que, para  $\frac{K}{2} < p(t) < p_2$  a função  $p(t)$  é convexa, conforme Figura 4.9.

Podemos observar também que, quando a população inicial  $p_0$  for menor do que  $\frac{K}{2}$ , a população decrescerá para zero.

Analisando agora um tipo de exploração de recurso natural em que a quantidade explorada  $q$  seja uma função do tempo, por exemplo, proporcional a quantidade de recurso natural em cada instante, ou seja,

$$q(t) = \varepsilon p(t)$$

em que  $\varepsilon > 0$  é a taxa de exploração, uma quantidade pequena de modo que  $\varepsilon < r$ .

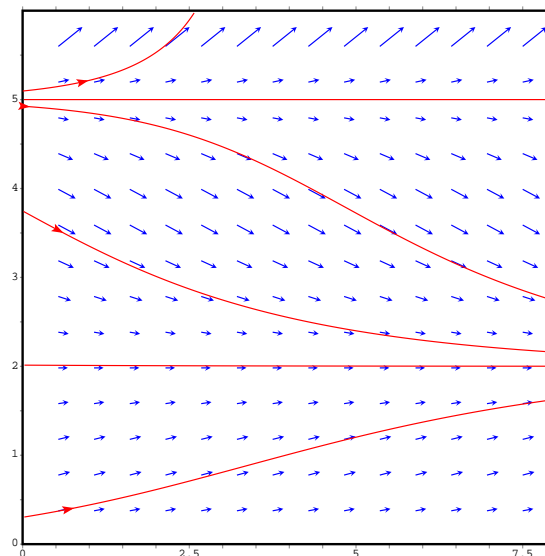
Assim, a equação diferencial ordinária que modela a exploração de recurso natural torna-se:

$$\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t) \frac{K - p(t)}{K} - \varepsilon p(t)$$

e a solução correspondente é dada por:

$$p(t) = \frac{K(r - \varepsilon)}{r + CKr e^{-(r-\varepsilon)t} - CK\varepsilon e^{-(r-\varepsilon)t}}$$





**Figura 4.9:** Soluções assintóticas e de equilíbrio

Notamos que, à medida que  $t$  tende ao infinito,  $t \rightarrow \infty$ , a quantidade de recursos naturais  $p(t)$  tende para o valor de  $K \frac{r - \varepsilon}{r}$ , ou seja,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p(t) = K \frac{r - \varepsilon}{r} = K \left(1 - \frac{\varepsilon}{r}\right)$$

Observe também que, para  $\varepsilon = 0$ , o ponto de equilíbrio do modelo se reduz a  $K$ , exatamente igual ao ponto de equilíbrio do modelo logístico, como era de se esperar.

Além disso, a quantidade explorada  $q$  de recursos naturais pode assumir outras formas matemáticas.

#### 4.5 Aspectos gerais de poluição numa represa

Outros problemas, como a poluição encontrada em quase todas as partes do mundo e que nos afetam, podem ser abordados matematicamente. Entre eles, exploraremos o problema da poluição existente nas águas de uma represa, tratado como um modelo contínuo representado por uma equação diferencial ordinária e uma condição inicial, anteriormente abordado com uma equação discreta na Unidade 3.

Consideramos que numa represa existe um fluxo constante de entrada de água devido a um riacho de águas límpidas.

Algumas hipóteses e parâmetros importantes podem ser considerados num primeiro modelo simples:

1. O volume ou estimativa de água na represa é uma quantidade considerada constante ao longo do tempo  $t$  e igual  $V$  ( $m^3$ );
2. A pequena vazão de entrada e saída de água são consideradas iguais a uma constante  $r$  ( $m^3/h$ ) (metros cúbicos por hora);
3. A água e a quantidade poluição que entram na represa se misturam rapidamente e de maneira uniforme;
4. Os poluentes são retirados da represa somente pelo fluxo devido à vazão da saída;
5. Negligenciamos os efeitos biológicos e climáticos como sedimentação e degradação de poluentes, entrada de água de chuvas, evaporação etc.
6. A quantidade inicial de poluição na represa é igual a  $p(0)$ .

A poluição existente numa represa é visivelmente prejudicial a vida aquática, a recreação, ao aproveitamento da água etc. o que nos leva a buscar modelos matemáticos para prever o tempo de despoluição.

#### 4.5.1 Poluição numa represa: um problema de valor inicial

Consideremos agora que uma indústria poluidora encerrou o processo de lançamento de poluição diretamente numa represa sem tratamento. Sejam  $P(t)$  a quantidade de poluentes na água no instante  $t$  e  $P_0$  a quantidade inicial de poluentes correspondente a  $t_0 = 0$ , instante em que se parou de lançar poluentes na represa.

Assumindo que o volume  $V > 0$  e a vazão  $r$  da represa sejam constantes, podemos fazer a suposição de que a variação da quantidade de poluentes por unidade de tempo é proporcional a quantidade total de poluentes existente na represa em cada instante, e assim, o PVI (**problema de valor inicial**) dado pela equação diferencial ordinária:

$$\frac{dP(t)}{dt} = -\frac{r}{V} P(t) \quad (4.14)$$

com a taxa  $r > 0$  e a condição inicial  $P(t_0) = P_0$ .

Embora a maioria dos problemas de valores iniciais cujas equações diferenciais são oriundas de um problema real tenha uma única solução, é sempre bom verificar se o PVI satisfaz as condições do teorema de existência e unicidade da solução de um PVI.

Como as funções  $f(t, P) = -r \frac{P(t)}{V}$  e  $\frac{dP(t)}{dt}$  da equação 4.14 são consideradas contínuas no intervalo  $(-\infty, \infty)$ , o teorema da existência e unicidade de solução de um problema de valor inicial nos garante a existência e unicidade da solução do mesmo.

Para resolver uma equação diferencial ordinária linear homogênea de primeira ordem usamos o Método de Separação de Variáveis como na seção 4.2.

Podemos também resolver uma equação diferencial ordinária linear de primeira ordem utilizando um fator integrante de modo a transformá-la numa equação diferencial exata (BOYCE & DIPRIMA, 1999).

Neste caso, multiplicamos a equação pelo fator integrante,

$$e^{\int \frac{r}{V} dt} = e^{\frac{r}{V} t}$$

obtendo a equação,

$$e^{\frac{r}{V} t} \frac{dP(t)}{dt} + \frac{r}{V} e^{\frac{r}{V} t} P(t) = 0$$

que pode ser reescrita na forma de uma diferencial exata

$$\frac{d}{dt} \left[ e^{\frac{r}{V} t} P(t) \right] = 0$$

A solução geral de (4.14) é dada por:

$$P(t) = C e^{-\frac{r}{V} t}$$

em que,  $C$  é uma constante de integração.

Assim, substituindo a condição inicial na solução geral, obtemos o valor da constante  $C$ , que é igual a  $P_0$  e, a solução do problema de valor inicial torna-se:

$$P(t) = P_0 e^{-\frac{r}{V} t} \quad (4.15)$$

#### Exemplo 4.7

Considere o volume de uma represa,  $V = 10^6 \text{ m}^3$ , sendo abastecida por um riacho com vazão de  $50 \text{ m}^3/\text{h}$ . Suponha que a fonte poluidora interrompeu suas emissões na represa no momento em que a poluição total era igual a  $P_0$ .

Se a prefeitura local propõe o reaproveitamento da água da represa, mas que só pode iniciar o tratamento quando o ponto de poluição da solução for menor

do que uma fração, por exemplo, a metade da poluição inicial, desejamos saber quanto tempo (em horas) levará para que isto aconteça.

Para resolver este problema utilizamos a solução (4.15) da equação (4.14), pois se trata de encontrar o instante  $t$  em que a poluição é menor do que a metade da poluição inicial, ou seja, quando  $P(t) < \frac{P_0}{2}$ .

Então, necessitamos resolver a inequação

$$P_0 e^{-\frac{r}{V}t} < \frac{P_0}{2}$$

para  $t \in \mathbb{R}$ .

Simplificando a expressão anterior e aplicando o logaritmo neperiano em ambos os lados da equação, a desigualdade se mantém já que a função logarítmica é crescente.

Assim,

$$\begin{aligned}\ln\left(e^{-\frac{r}{V}t}\right) &\leq \ln\left(\frac{1}{2}\right) \\ -\frac{r}{V}t &\leq \ln(1) - \ln(2) \\ t &\geq \frac{\ln(2)}{r} V\end{aligned}$$

Note que o tempo em que a poluição reduz à metade, denotado por  $t_{1/2}$ , segundo o modelo, é diretamente proporcional ao volume de água da represa e inversamente proporcional a vazão, independente do valor inicial da poluição existente na represa.

Substituindo os respectivos valores da vazão  $r$  e do volume  $V$ , temos:

$$t_{1/2} = \frac{\ln(2)}{50} \times 10^6$$

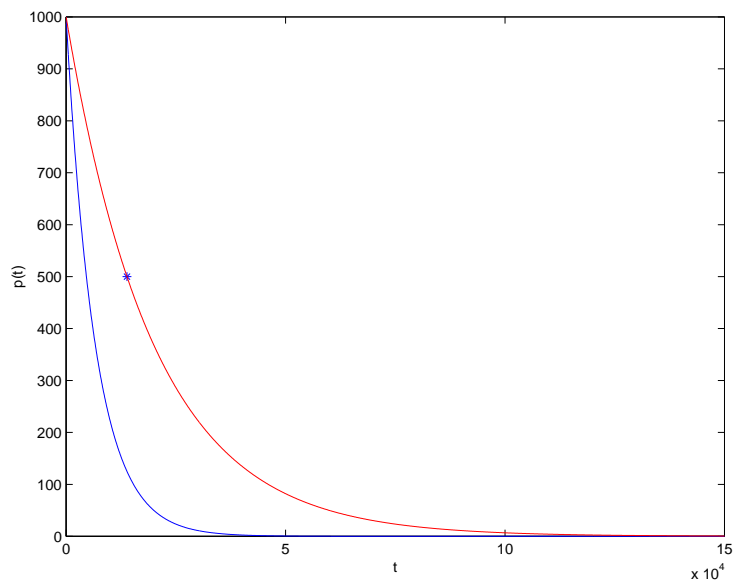
Logo,  $t_{1/2} = 13\,862.9$  horas, que corresponde a 577.6 dias, ou seja, levaria cerca de 1.58 anos para o nível de poluentes reduzir à metade de acordo com o modelo.

Considerando uma poluição inicial de  $P_0 = 10^3$  kg obtemos

$$P(t) = 10^3 \times e^{-\frac{50}{10^6}t}$$

e ilustramos graficamente a função  $P(t)$  e o instante  $t = t_{1/2}$  em que a poluição reduz à metade conforme a Figura 4.10.

Note também que, se não há fonte de poluição o processo de despoluição ocorre de maneira mais rápida no início e vai se tornando cada vez mais lento conforme o tempo vai aumentando ( $t \rightarrow \infty$ ) e a quantidade de poluição tende a zero, ou seja,  $P(t) \rightarrow 0$ .



**Figura 4.10:** Concentração da poluição

Logo, o projeto levaria cerca de 1.5 anos após o fechamento da fonte poluidora para ser iniciado o tratamento da água da represa, caso não fossem tomadas providências no sentido de acelerar o processo de despoluição.

Observe que a despoluição poderia ser acelerada se a vazão  $r$  fosse aumentada. Se aumentássemos, por exemplo, três vezes a vazão, teríamos a seguinte função descrevendo a quantidade de poluição:

$$P(t) = 10^3 e^{-\frac{150}{10^6} t}.$$

Neste caso, em quanto tempo a quantidade de poluição seria reduzida à metade?

Observando os gráficos da figura 4.10 anterior, notamos facilmente que a despoluição ocorre de forma mais acelerada quando a vazão é maior. Neste caso, a poluição está próxima de zero para o tempo  $t$  na vizinhança de 80 000 horas, diferente do que ocorre quando a vazão é menor.

#### 4.5.2 Poluição continuada numa represa

Consideremos um problema de uma indústria que lança poluentes continuamente numa represa. Seja  $q$  uma quantidade constante de poluentes lançada pela indústria por unidade de tempo  $t$ .

Supomos como no modelo anterior que o volume  $V$  da represa permanece constante e  $r$  é a taxa de entrada/saída de água na represa. A taxa de variação da poluição decresce proporcional à poluição existente, mas cresce com a entrada

constante  $q$  de poluentes por unidade de tempo.

A equação diferencial ordinária linear que descreve este problema é não homogênea dada por:

$$\frac{dP(t)}{dt} = -\frac{r}{V} P(t) + q \quad (4.16)$$

com a taxa  $r > 0$  e o volume  $V > 0$ .

Supondo ainda que a poluição inicial  $P(0) = P_0$ , obtemos um problema de valor inicial.

Este problema de valor inicial de primeira ordem satisfaz o teorema da existência e unicidade da solução, pois, a função constante  $q$ , e as funções  $P(t)$  e  $\frac{dP(t)}{dt}$  são contínuas no intervalo  $(-\infty, \infty)$ .

Assim, podemos resolver a equação diferencial ordinária linear escrita como:

$$\frac{dP(t)}{dt} + \frac{r}{V} P(t) = q,$$

utilizando o fator integrante  $e^{\int \frac{r}{V} dt} = e^{\frac{r}{V}t} \neq 0$ , obtendo

$$e^{\frac{r}{V}t} \frac{dP(t)}{dt} + \frac{r}{V} e^{\frac{r}{V}t} P(t) = e^{\frac{r}{V}t} q.$$

Com isso, transformamos o primeiro membro da equação anterior numa diferencial exata, e a reescrevemos como segue:

$$\frac{d}{dt} \left[ e^{\frac{r}{V}t} P(t) \right] = e^{\frac{r}{V}t} q$$

Integrando ambos os lados desta equação, obtemos uma solução geral

$$P(t) = q \frac{V}{r} + k e^{-\frac{r}{V}t}$$

em que  $k$  é uma constante de integração.

Observamos que a solução geral da equação não homogênea (4.16) é igual a soma de uma solução da equação homogênea associada,  $y^H(t) = k e^{-\frac{r}{V}t}$ , e uma solução particular da equação não homogênea,  $y^P(t) = q \frac{V}{r}$ .

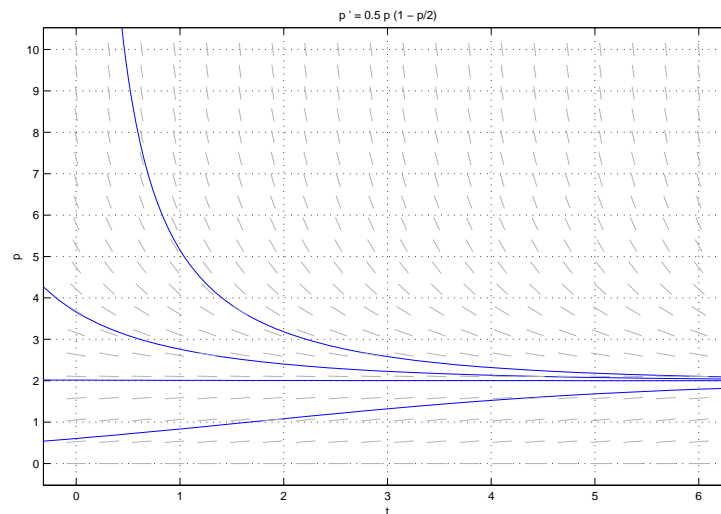
Utilizando a condição inicial  $P(0) = P_0$  na solução geral, obtemos o valor da constante  $C$  e a solução do problema de valor inicial torna-se:

$$P(t) = \left( P_0 - q \frac{V}{r} \right) e^{-\frac{r}{V}t} + q \frac{V}{r} \quad (4.17)$$

Analisando a solução (4.17), observamos que para  $t \rightarrow \infty$ , a solução tende a se estabilizar no ponto de equilíbrio  $q \frac{V}{r}$ , ou seja,  $P(t)$  tende para o nível de equilíbrio da poluição na represa:

$$P^* = \lim_{t \rightarrow \infty} P(t) = q \frac{V}{r}.$$

Com relação ao ponto de equilíbrio obtido em que a poluição se estabiliza, temos três casos a considerar que dependem da quantidade inicial de poluição conforme a Figura 4.11:



**Figura 4.11:** Campo de direções e soluções

**a)** Se  $P_0 < P^*$ , então a quantidade de poluição na represa crescerá até atingir o ponto de equilíbrio  $P^*$ ;

**b)** Se a quantidade inicial de poluição na represa  $P_0 = P^*$ , então a quantidade de poluição na represa permanecerá constante, ou seja, a quantidade de poluição entrando é igual a quantidade de poluição saindo da represa;

**c)** Se  $P_0 > P^*$ , então a quantidade de poluição na represa diminuirá até atingir o ponto de equilíbrio  $P^*$ , e se estabilizará conforme Figura 4.11.

Ilustramos na Figura 4.11 os campos de direções e as soluções obtidas com diferentes condições iniciais como nos casos citados anteriormente.

Notamos mais uma vez que a poluição permanece constante quando a poluição inicial da represa é igual ao valor de equilíbrio  $P^*$ .

Em geral, a poluição inicial é transiente, ou seja, na medida em que  $t$  cresce a poluição acumulada vai tendendo a um limite que é o valor de equilíbrio  $P^*$ . Neste caso, dizemos que a solução é assintoticamente estável (BOYCE & DI PRIMA, 1999).

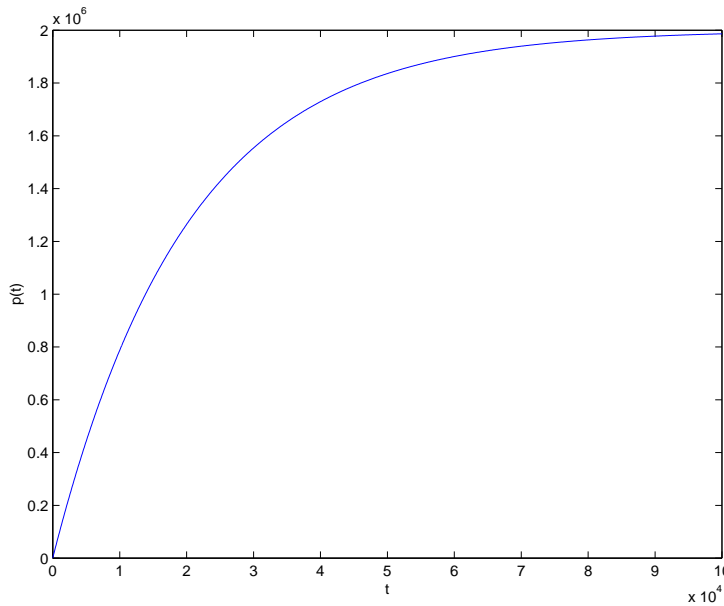
#### Exemplo 4.8:

Considere uma represa com uma poluição inicial  $P_0 = 10^3$  kg. Uma fábrica inicia suas atividades lançando constantemente nesta represa  $q = 100$  kg de

poluição por unidade de tempo. A solução segundo (4.17) é dada por:

$$P(t) = \left(P_0 - q \frac{V}{r}\right) e^{-\frac{r}{V}t} + q \frac{V}{r} = (10^3 - 100 \times 10^6) e^{-\frac{50}{10^6}t} + 100 \frac{10^6}{50} \quad (4.18)$$

que pode ser visualizada conforme a Figura 4.12.



**Figura 4.12:** Quantidade de poluentes

Uma medida da poluição é a concentração, ao invés da massa em kg. Consideramos  $C(t) = \frac{P(t)}{V}$ , então escrevemos (4.17) como:

$$\frac{dC(t)}{dt} = -\frac{r}{V} C(t) + \frac{q}{V},$$

na qual  $r > 0$  e a concentração inicial  $C(0) = C_0$ .

Analogamente, integrando a equação anterior e usando a condição inicial obtemos a solução:

$$C(t) = \frac{q}{r} + \left(C_0 - \frac{q}{r}\right) e^{-\frac{r}{V}t}$$

com  $q$ ,  $r$  e  $V$  são constantes.

#### Exemplo 4.9

Considere que uma represa de  $V = 3 \times 10^6 \text{ m}^3$  de água esteja inicialmente livre de poluição. Na jusante de um riacho que a abastece, pretende-se instalar uma indústria que lançará poluentes mensalmente da ordem de  $25 \text{ kg/m}^3$ . Para a manter condições ambientais toleráveis, a represa pode suportar apenas  $15 \text{ kg/m}^3$ . Por quanto tempo a indústria poderá funcionar sem ultrapassar os limites ambientais toleráveis da represa?



Se a poluição fosse emitida constantemente, poderíamos modelar o problema e obter uma solução do tipo (4.17). Além disso, se o limite de poluentes aceitável for de  $15 \text{ kg/m}^3$ , ou seja, chegaria aproximadamente  $4.5 \times 10^7 \text{ kg}$  de poluentes.

A quantidade  $q$  será a vazão do riacho pela concentração de poluentes que a fábrica lança, ou seja,  $1\,250 \text{ kg/h}$ .

Substituindo estes valores e  $P(0) = 0$  na solução (4.17) obtemos uma equação exponencial para o tempo  $t$ :

$$4.5 \times 10^7 = \left(0 - 1\,250 \frac{3 \times 10^6}{50}\right) e^{-\frac{50}{3 \times 10^6} t} + 1\,250 \frac{3 \times 10^6}{50}$$

cujas soluções são dadas por  $t \approx 54\,977.44$  horas.

Deste modo, se a indústria não tomar providências para reduzir as emissões, poderia ter licença ambiental para funcionar no máximo 6.3 anos, em que o nível de poluição atingiria o nível máximo suportável pela represa.

#### 4.5.3 Poluição contínua e decrescente

Analisaremos os efeitos de uma represa submetida a uma poluição contínua e de forma decrescente, ou seja, imaginamos que uma fábrica está poluindo a represa cada vez menos por unidade de tempo.

Admitindo que a quantidade de poluentes observada inicialmente seja  $q_0$  e que esta decai de acordo com uma função exponencial, isto é,  $q(t) = q_0 e^{-\alpha t}$ , em que  $\alpha$  é um parâmetro de ajuste experimental que mede o decaimento da poluição lançada na represa e, desta forma, teremos a equação diferencial de balanço da poluição da represa dada por:

$$\frac{dP(t)}{dt} = q_0 e^{-\alpha t} - \frac{r}{V} P(t) \quad (4.19)$$

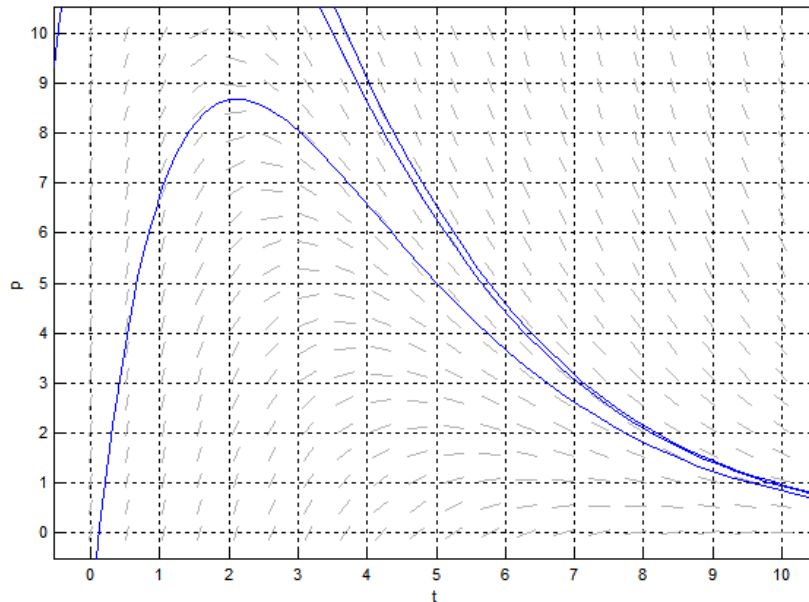
com  $r > 0$ ,  $V > 0$  e uma condição inicial  $P(0) = P_0$  como nos exemplos anteriores.

A primeira parcela do segundo membro representa a poluição que está entrando e a segunda a quantidade de poluição que está saindo da represa.

Considerando que  $\frac{r}{V} \neq \alpha$ , a solução de (4.19) é dada por:

$$P(t) = \frac{q_0}{\left(\frac{r}{V} - \alpha\right)} e^{-\alpha t} + \left(P_0 - \frac{q_0}{\left(\frac{r}{V} - \alpha\right)}\right) e^{-\frac{r}{V} t}, \quad (4.20)$$

conforme Figura 4.13 representando soluções com diferentes condições iniciais e campos de direções.



**Figura 4.13:** Soluções e campo de direções

Se a constante  $\frac{r}{V} = \alpha$ , então a solução é da forma:

$$P(t) = P_0 e^{-\frac{r}{V}t} + q_0 t e^{-\frac{r}{V}t} = (P_0 + q_0 t) e^{-\frac{r}{V}t} \quad (4.21)$$

Nesse caso, ambas as parcelas da solução mostram que quando  $t$  cresce a solução  $P(t)$  tende a zero, ficando evidente que a represa tende a ficar despoluída após algum tempo.

#### Exemplo 4.10

Considere uma indústria que deseja instalar filtros para a diminuição da emissão de poluentes numa represa cujo volume é  $V = 3 \times 10^6 \text{ m}^3$ . No instante inicial da redução de emissão de poluentes, a poluição inicial é igual a  $P_0 = 7.5 \times 10^7 \text{ kg}$ . Usando a equação (4.21) e lembrando que a constante  $\alpha > 0$  e para  $\frac{r}{V} = \alpha$ , temos a solução

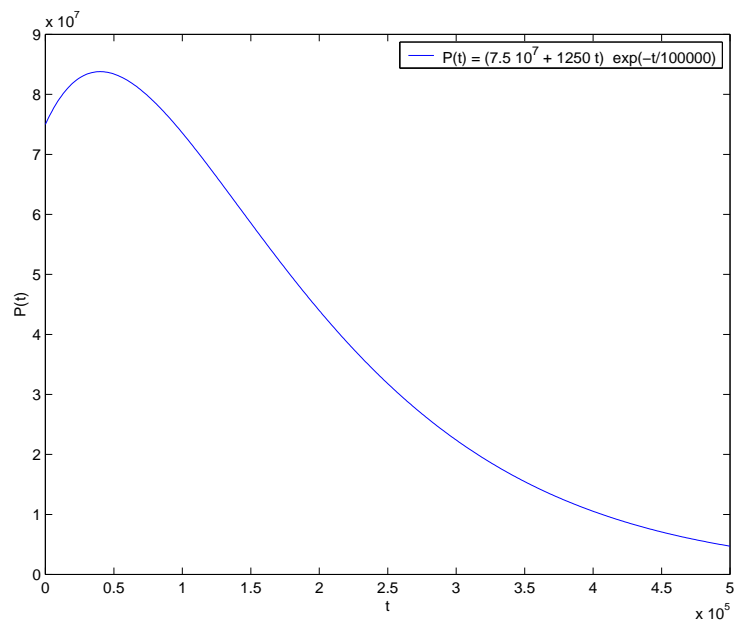
$$P(t) = (7.5 \cdot 10^7 + 1200 t) e^{-\frac{t}{100000}},$$

representada na Figura 4.14.

Note que se a indústria instalar filtros para reduzir a emissão de poluentes, então a represa atingirá um nível de poluição cada vez mais baixo.

Queremos saber qual será o nível de concentração de poluentes na represa, após o primeiro ano de funcionamento da indústria.

Para isso, vamos utilizar a solução (4.20) da equação (4.19) e considerar



**Figura 4.14:** Emissão de poluentes

$T = 8\,760$  h (aproximadamente um ano):

$$P(8\,760) = \left(0 - \frac{1\,250 \times 3 \times 10^6}{50}\right) e^{-\frac{50}{3 \times 10^6} 8\,760} + \frac{1\,250 \times 3 \times 10^6}{50}$$

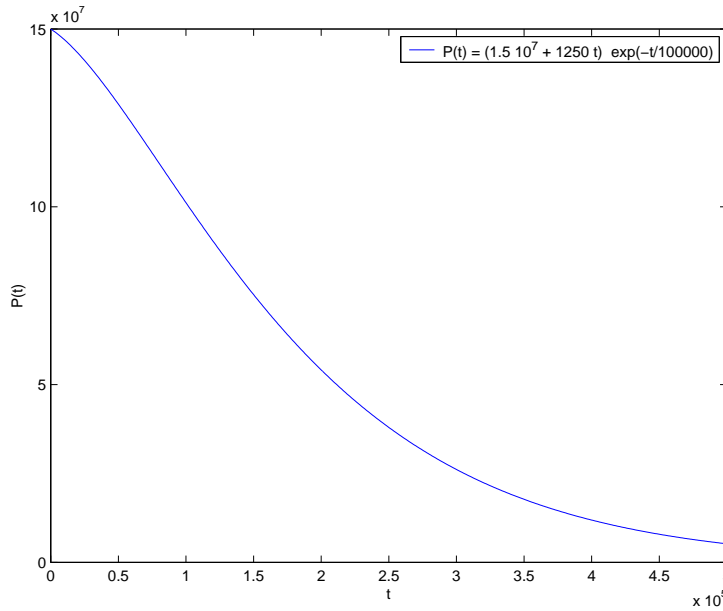
Segue que  $P(8\,760) = 10\,184\,387$  kg de poluição na represa. A concentração é obtida dividindo a quantidade de poluição pelo volume da represa, ou seja,  $\frac{10\,184\,387}{3 \times 10^6}$  kg/m<sup>3</sup> que é aproximadamente 3.4 kg/m<sup>3</sup>.

Utilizaremos os mesmos dados anteriores  $V = 3 \times 10^6$  m<sup>3</sup>,  $r = 50$  m<sup>3</sup>/h,  $q_0 \frac{V}{r} = 7.5 \times 10^7$  kg para mostrar graficamente o comportamento da poluição na represa.

O mesmo acontecerá se na represa a poluição for superior a  $q_0 \frac{V}{r}$ .

No caso em que a represa contenha certa quantidade de poluentes, por exemplo, o dobro do ponto da quantidade de equilíbrio, ou seja, uma poluição da ordem de  $15 \times 10^7$  kg temos graficamente

Novamente podemos notar que, mesmo a represa tendo uma poluição inicial superior ao ponto de equilíbrio, esta tende a se estabilizar atingindo um ponto de equilíbrio com o tempo. Isso ocorre pois a poluição inicial vai diminuindo depois de um tempo  $t$  muito grande, restando apenas a poluição proveniente da fábrica. Portanto, se a vida aquática da represa suportar o ponto de equilíbrio da poluição, então estará em condições ambientais toleráveis.



**Figura 4.15:** Emissao de poluentes com quantidade inicial dobrada

#### 4.5.4 Poluição oscilatória

Supomos agora que uma fábrica tenha um sistema periódico de descargas de poluição numa represa, ou seja, ora mais intenso num certo período e menos intenso em outro período. A fonte periódica de poluentes como em (BASSANEZI & FERREIRA, 1988) pode ser representada por uma função trigonométrica do tipo

$$q(t) = q_0 (1 + \sin(\omega t)),$$

em que  $\omega > 0$  é o coeficiente de ajuste experimental da frequência, que define intervalos de descargas mais curtos ou mais longos conforme a sua variação, e a equação (4.16) torna-se:

$$\frac{d(P(t))}{dt} = q_0 (1 + \sin(\omega t)) - \frac{r}{V} P(t) \quad (4.22)$$

que pode ser reescrita e resolvida utilizando um fator integrante conforme (BOYCE & DIPRIMA, 1999).

Desta forma, obtemos a solução de (4.22) com valor inicial  $P(0) = P_0$  dada por:

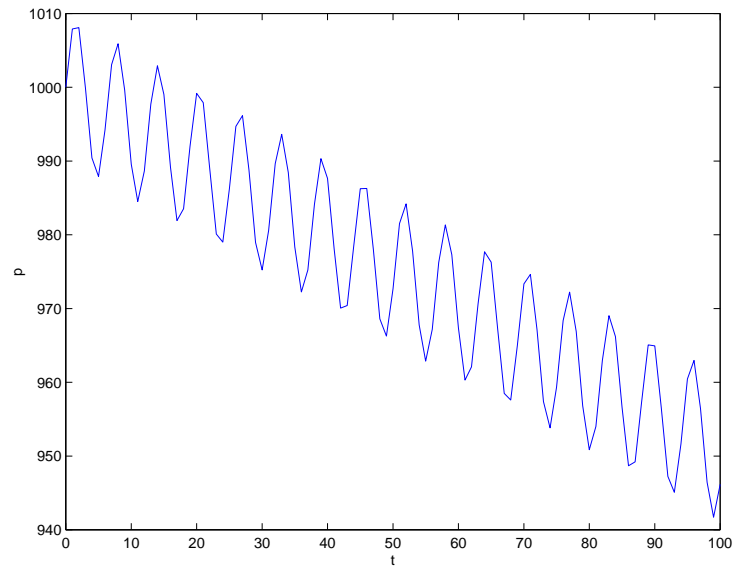
$$P(t) = q_0 \frac{V}{r} + \left( \frac{q_0 \frac{r}{V} \sin(\omega t) - q_0 \omega \cos(\omega t)}{(\frac{r}{V})^2 + \omega^2} \right) + \left( P_0 - q_0 \frac{V}{r} + \frac{q_0 \omega}{(\frac{r}{V})^2 + \omega^2} \right) e^{-\frac{r}{V} t} \quad (4.23)$$

em que, a primeira parcela permanece constante, segunda parcela faz com que a solução oscile em torno de  $q_0 \frac{V}{r}$  e o terceiro termo é transiente e, portanto, vai decaindo a medida que  $t \rightarrow \infty$ .

Assim, esta solução tende para um equilíbrio oscilatório:

$$P^* = q_0 \frac{V}{r} + \left( \frac{q_0 \frac{r}{V} \sin(\omega t) - q_0 \omega \cos(\omega t)}{\left(\frac{r}{V}\right)^2 + \omega^2} \right).$$

No caso em que a fábrica tem um sistema periódico de descarga de poluentes, utilizando a solução da equação (4.21) lembrando que  $\omega > 0$  e, supondo que a represa tenha uma poluição inicial da ordem de  $P_0 = 15 \times 10^7$  kg com  $\omega = 1$ , obtemos a solução de equilíbrio mostrada na Figura 4.16:



**Figura 4.16:** Oscilação de poluentes

A poluição na represa tende ao ponto de equilíbrio  $q_0 \frac{V}{r} = 7.5 \times 10^7$  kg de poluentes, tendo uma variação em torno desse ponto, devido a parcela oscilatória

$$\frac{q_0 \frac{r}{V} \sin(\omega t) - q_0 \omega \cos(\omega t)}{\left(\frac{r}{V}\right)^2 + \omega^2}$$

Observando a Figura 4.16, vemos o gráfico da solução (4.23) num intervalo de tempo relativamente pequeno e observamos a oscilação devido a segunda parcela da solução. Entretanto, numa escala com intervalo de tempo grande poderíamos não visualizar a oscilação.

Atribuindo a  $\omega$  outros valores podemos aumentar ou diminuir os intervalos de descargas dos poluentes para simular conforme a necessidade, pois para valores de  $0 < \omega \leq 1$ , os intervalos de descargas se tornam maiores e para valores de  $\omega > 1$  os intervalos de descargas diminuem.

#### 4.6 Adimensionalização de um pvi

Um problema de valor inicial pode ser adimensionalizado, já que na maioria das vezes ele não aparece nesta forma.

Considerando o problema de uma equação diferencial ordinária tratando da variação de certa quantidade  $p(t)$  de poluentes que está se degradando numa região  $R$  de um rio, lago ou represa no instante  $t$  como a dada pela equação (4.11)

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{r}{V} p(t)$$

com

$$p(0) = p_0$$

com  $r, V \in \mathbb{R}$  e  $p_0$  um valor inicial real conhecido.

Como o problema envolve a variável dependente  $p$ , a variável independente  $t$  e os parâmetros  $r$  e  $V$ , vamos transformá-lo num problema na forma adimensional.

Evidentemente numa equação todas as parcelas devem ter a mesma dimensão. Neste caso, escrevemos:

$$\frac{1}{p(t)} \frac{dp(t)}{dt} = -\frac{r}{V} \quad (4.24)$$

e podemos verificar que isto é consistente.

Como não existe um conjunto de regras precisas para definir as novas variáveis e parâmetros adimensionais, geralmente seguimos a nossa intuição física tentando várias possibilidades.

Para isso, considerando o problema anterior introduzimos as novas variáveis adimensionais,  $P$  a poluição adimensional;  $r$  a taxa; e,  $\tau$  o tempo adimensional.

Escolhemos uma nova variável dependente  $P$  definida em função da variável anterior como:

$$P(t) = \frac{p(t) - p_0}{p_0}$$

que é adimensional, ou seja, não tem unidade, já que ela é um quociente de diferenças das quantidades de poluentes em qualquer medida, por exemplo se considerarmos a medida de poluentes em ppm (partes por milhão), teremos o quociente  $\frac{\text{ppm}}{\text{ppm}}$  que é adimensional.

Neste caso, a nova condição inicial do problema correspondente a  $p(0) = p_0$  torna-se:

$$P(0) = 0$$

A solução do problema neste caso será dada por:

$$p(t) = p_0 + p_0 P(t)$$

Também para a variável temporal  $t$ , não é fácil de introduzir um tempo adimensional de modo que a constante  $\frac{r}{V}$  desapareça da equação diferencial, ou seja, de modo que  $\frac{r}{V} = 1$ .

Tentamos uma transformação do tipo  $\tau = \frac{V}{r}$ , que pode ser chamada de constante de drenagem da poluição porque o volume de água  $V$  levaria um tempo  $\tau$  para escoar a uma taxa  $r$ . Definindo a nova variável,

$$\bar{t} = \frac{t}{\tau},$$

e, usando a regra da cadeia, calculamos a derivada

$$\frac{dP}{d\bar{t}} = \frac{1}{p_0} \frac{dp}{dt} \frac{dt}{d\bar{t}} = \tau \frac{1}{p_0} \frac{dp}{dt} = \frac{dP}{d\bar{t}}$$

Assim,

$$\frac{dP}{d\bar{t}} = \tau \left(-\frac{r}{V}\right) P = -\left(\frac{\tau r}{V}\right) P = -P$$

e a equação adimensionalizada nas novas variáveis torna-se:

$$\frac{dP}{d\bar{t}} = -P.$$

Consideramos agora a equação logística

$$\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t) (p_{\max} - p(t)) \quad (4.25)$$

contendo dois parâmetros constantes  $r_0$  e  $p_{\max}$ .

Observamos que se  $p^2(t)$  é pequeno de modo que pode ser negligenciado, a equação anterior torna-se

$$\frac{1}{p(t)} \frac{dp(t)}{dt} = r_0 p_{\max}, \quad (4.26)$$

teremos o crescimento exponencial cujo tempo de duplicação da população é

$$t_2 = \frac{\ln(2)}{r_0 p_{\max}}.$$

Utilizando este valor para escalonar o tempo  $t$  e  $p_{\max}$  para escalonar  $p$ , definimos:

$$\bar{t} = \frac{t}{t_2}$$

e

$$\bar{p} = \frac{p}{p_{\max}}$$

Temos que

$$\frac{d\bar{p}}{d\bar{t}} = \frac{1}{p_{\max}} \frac{dp}{d\bar{t}} = \frac{1}{p_{\max}} \frac{dp}{dt} \frac{dt}{d\bar{t}} = \frac{1}{p_{\max}} t_2 r p \frac{dp}{dt} = \frac{1}{p_{\max}} t_2 r p (p_{\max} - p)$$

$$\frac{d\bar{p}}{d\bar{t}} = t_2 r \bar{p} (p_{\max} - p) = t_2 r p_{\max} \bar{p} \left(1 - \frac{p}{p_{\max}}\right) = t_2 r p_{\max} \bar{p} (1 - \bar{p})$$

Obtemos a equação logística adimensionalizada

$$\frac{d\bar{p}}{d\bar{t}} = \ln(2) \bar{p} (1 - \bar{p})$$

## 4.7 Outros modelos

Nesta seção apresentamos outros modelos matemáticos que podem ser descritos por equações diferenciais conforme em seções anteriores como os modelos de Bertalanffy, reações químicas, materiais radioativo, misturas, Newton etc

### 4.7.1 Modelo de Bertalanffy

A equação diferencial de Von Bertalanffy indica que o aumento do peso de cada espécie de peixe é proporcional a área da superfície do seu corpo, e é estabelecida pela equação diferencial ordinária não linear de primeira ordem do tipo:

$$\frac{dp(t)}{dt} = s p(t)^{2/3} - d p(t) \quad (4.27)$$

em que  $p(t)$  representa o peso do peixe, a constante  $s$  representa a síntese de massa por unidade de superfície do peixe (anabolismo) e  $d$  a taxa de diminuição de massa por unidade de massa (catabolismo).

A equação de Bertalanffy é uma equação diferencial ordinária não linear do tipo da equação de Bernoulli (ZILL, 2003) com  $\gamma = \frac{2}{3}$ .

Dividindo a equação (4.28) por  $p(t)^{\frac{2}{3}}$  obtemos

$$p(t)^{\frac{2}{3}} \frac{dp(t)}{dt} = s - d p(t)^{\frac{1}{3}}$$

E, fazendo a mudança de variável  $q = p^{1-\gamma} = p^{1/3}$ , transformamos a equação (4.28) numa equação linear e encontramos a sua solução geral.

Supondo que no instante  $t = 0$ , em que o peixe nasce, o seu peso é desprezível, considerando então  $p(0) = 0$ , podemos mostrar que com esta condição inicial obtemos a solução:

$$p(t) = \left(\frac{s}{d}\right)^3 (1 - e^{-\frac{d}{s}t})^3$$



Além disso, o modelo de Bertalanffy pode ser generalizado para o crescimento de outros animais, estabelecendo a equação para o peso do animal

$$\frac{dp(t)}{dt} = s p(t)^\alpha - d p(t)$$

em que  $s$  e  $d$  são constantes reais de anabolismo e catabolismo respectivamente e,  $0 < \alpha < 1$  é um parâmetro alométrico estimado para cada animal (BASSANEZI, 2002).

#### 4.7.2 Modelos de reações químicas de primeira ordem

Algumas reações químicas seguem a lei empírica de que núcleos dos átomos de uma substância ao se decomporem convertem em outra(s) substância(s), de modo que a taxa de decomposição da substância num instante  $t$  é proporcional à quantidade da substância ainda não convertida.

Esta decomposição acontece com os núcleos dos átomos de alguns elementos químicos, especialmente os radioativos, cujas combinações de prótons e neutrons geralmente são instáveis e se desintegram gerando outros elementos.

Considerando a quantidade  $n(t)$  de núcleos de átomos de uma substância química, supõe-se que a taxa  $\frac{dn(t)}{dt}$  com que o núcleo desta substância decai é proporcional à quantidade de núcleos  $n(t)$  existentes em cada instante, estabelecemos um modelo contínuo dado pela equação diferencial:

$$\frac{dn(t)}{dt} = -k n(t) \quad (4.28)$$

em que  $k$  é uma constante positiva.

Observe que, no caso do valor de  $k$  em (4.29) ser positivo a solução seria crescente, mas o sinal negativo indica que a taxa de variação de  $n(t)$  é negativa, ou seja, a sua derivada  $\frac{dn(t)}{dt} < 0$ , portanto,  $n(t)$  é uma função decrescente do tempo. A solução do problema de valor inicial correspondente com a condição inicial  $n(0) = n_0$  é dada por:

$$n(t) = n_0 e^{-kt} \quad (4.29)$$

para  $t \geq 0$ .

Observe mais uma vez, que para  $k < 0$ , a solução obtida é uma exponencial  $n(t) = n_0 e^{-kt}$  decrescente.

Observemos a similaridade desta equação diferencial com a lei de Malthus para o crescimento exponencial vista em (4.1) em que a taxa de variação é positiva.

### Meia vida de um elemento

Uma quantidade importante para medir a estabilidade de um elemento químico radioativo é a sua meia vida.

A **meia vida** de um elemento radioativo é a medida do tempo de desintegração necessário para que uma quantidade deste elemento seja reduzida a metade. Denotaremos este tempo por  $t_{1/2}$ .

Considerando uma quantidade inicial  $n_0$  de uma substância radioativa, a meia vida desta substância é o tempo  $t$  que ela demora para reduzir a  $\frac{n_0}{2}$ .

Na solução (4.29) fazendo  $n(t) = \frac{n_0}{2}$ , ou seja,

$$\frac{n_0}{2} = n_0 e^{-kt}$$

Simplificando e aplicando o logaritmo em ambos os membros da equação anterior obtemos a meia vida do elemento químico:

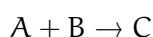
$$t = \frac{\ln(2)}{k}$$

Note que a meia vida de uma substância é inversamente proporcional a sua taxa de decaimento e independe da quantidade inicial da substância.

#### 4.7.3 Modelos de reações químicas de segunda ordem

A descrição de uma reação química em que ocorre a interação de duas substâncias A e B para formar uma terceira substância C é conhecida como uma reação de segunda ordem.

Esquemáticamente temos:



Seja  $x(t)$  gramas de uma substância química C num instante de tempo  $t$  obtida pela combinação de  $x_a(t)$  gramas de uma substância A e de  $x_b(t)$  gramas de uma substância B.

Sejam  $\alpha$  e  $\beta$  as respectivas quantidades iniciais da substância A e B no instante  $t = 0$  e  $x(t)$  a quantidade da substância C no instante  $t$ .

Então se  $x(0) = 0$  é a quantidade de C antes de começar a reação e as respectivas quantidades restantes das substâncias A e B consideradas no instante  $t$  são respectivamente:

$$x_a(t) = \alpha - x(t) \quad \text{e} \quad x_b(t) = \beta - x(t).$$

Supondo-se que a taxa de formação da substância C em cada instante é proporcional à quantidade das substâncias  $x_a(t)$  de A e  $x_b(t)$  de B existentes, logo é dada por uma equação diferencial ordinária não linear conhecida como equação de reação de segunda ordem do tipo:

$$\frac{dx(t)}{dt} = k (\alpha - x(t)) (\beta - x(t)) \quad (4.30)$$

em que  $k$  é uma constante de proporcionalidade.

Como  $\alpha$  e  $\beta$  são os pontos de equilíbrio da equação de reação de segunda ordem (4.30), temos que a reação termina quando uma das substâncias A ou B se esgota, ou seja,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = \min(\alpha, \beta)$$

A equação de reação de segunda ordem pode ser resolvida pelo método de separação de variáveis, deixando no primeiro membro da equação a variável dependente  $x$  e, do outro, a variável independente  $t$ , escrevendo

$$\frac{dx}{(\alpha - x)(\beta - x)} = k dt$$

E, decompondo em frações parciais o primeiro membro e integrando ambos os membros da equação anterior com as variáveis separadas, obtemos

$$\ln \left| \frac{\alpha - x}{\beta - x} \right| = k (\alpha - \beta) t + c_1$$

Se no instante inicial  $t = 0$ ,  $x(0) = 0$ , obtemos o valor da constante de integração  $c_1$ , que substituído na equação anterior e isolando o valor de  $x$  obtemos a solução do problema de valor inicial:

$$x(t) = \frac{\alpha (1 - e^{k(\beta - \alpha)t})}{e^{k(\beta - \alpha)t} - \alpha} \quad (4.31)$$

Note também que, se as quantidades das substâncias A e B forem as mesmas, ou seja,  $\alpha = \beta$ , e for utilizado a mesma quantidade de cada uma na reação, a equação (4.30) torna-se:

$$\frac{dx(t)}{dt} = k (\alpha - x(t))^2 \quad (4.32)$$

e a solução com a condição inicial  $x(0) = x_0$  será dada por:

$$x(t) = \frac{k \alpha t - 1 + \frac{1}{\alpha - x_0} \alpha}{\frac{k}{t+1} k (\alpha - x_0)} = \frac{k \alpha (\alpha - x_0) t + x_0}{k (\alpha - x_0) t + 1}$$

#### 4.7.4 Modelo de misturas de substâncias

Considere o comportamento de uma mistura de duas soluções, cada uma com sua concentração e interagindo entre si. Exemplos típicos são as misturas como as de soluto e solvente, de água e sal, poluentes e água etc.

Podemos representar este comportamento matematicamente por uma equação diferencial ordinária.

De fato, seja  $q(t)$  a quantidade de poluentes (kg) num tanque de água com volume de igual a  $V$  litros num instante  $t$  e que uma outra solução de poluentes dissolvido em água está entrando no tanque com a mesma vazão com que a mistura homogênea está saindo do tanque.

Uma hipótese mais simples é que a taxa  $\frac{dq(t)}{dt}$  com que  $q(t)$  varia com o tempo é igual à quantidade de poluentes que está entrando menos a quantidade que está saindo no tanque.

Considere a quantidade inicial  $q_0$  de poluentes dissolvida em  $V$  litros de água. Suponhamos que  $\phi$  litros por minuto de uma outra solução contendo  $\alpha$  (gramas) de poluentes por litro de água está entrando no tanque. Ao mesmo tempo, a mistura já considerada homogênea está saindo com a mesma vazão de  $\phi$  litros por minuto.

Assim, a quantidade de poluentes que entra no tanque com vazão  $\phi$  é  $\alpha\phi$  e a concentração de poluentes no tanque é  $\frac{q(t)}{V}$ , que por sua vez também sai do tanque com vazão  $\phi$  de modo que é regido pela seguinte equação diferencial:

$$\frac{dq(t)}{dt} = \alpha\phi - \frac{q(t)}{V}\phi \quad (4.33)$$

Com uma condição inicial  $q(0) = q_0$  obtemos um problema de valor inicial em que é possível determinar a concentração de poluentes num instante qualquer  $t$ , como a solução (4.19).

#### 4.7.5 Modelo de Michaelis-Mentem

Em algumas situações e em farmacocinética, uma equação que governa a taxa em que o corpo processa uma droga é dado pela equação diferencial de Michaelis-Mentem:

$$\frac{dc(t)}{dt} = \frac{-k_1 c(t)}{k_2 + c(t)} \quad (4.34)$$

em que  $c(t)$  representa a concentração da droga no corpo num instante  $t$ ,  $k_1$  e  $k_2$  são constantes reais positivas.

Quando  $c(t) \gg k_2$  temos que  $k_2 + c(t) \approx c(t)$  e a taxa de variação da concentração da droga permanece praticamente constante, e a equação (4.34) pode ser simplificada tornando-se:

$$\frac{dc(t)}{dt} = -k_1. \quad (4.35)$$

No caso de  $c(t) \ll k_2$  de modo que  $k_2 + c(t) \approx k_2$  e a equação (4.34) fica

$$\frac{dc(t)}{dt} = \frac{-k_1}{k_2} c(t) \quad (4.36)$$

Pesquise como uma solução da equação geral de Michaelis-Mentem pode ser dada em função de uma função W de Lambert.

#### 4.7.6 Modelo de Newton para difusão do calor

Em muitas circunstâncias conhece-se a temperatura superficial de um corpo e verifica-se que ela se altera com uma taxa proporcional à diferença entre a temperatura do corpo e a temperatura do ambiente. Neste caso não consideramos uma fonte de calor externo.

Considere  $T(t)$  a temperatura de um corpo no instante  $t$  e  $T_a$  a temperatura do ambiente que o circunda. A Lei de Newton estabelece que a taxa  $\frac{dT(t)}{dt}$  com que a temperatura do corpo varia é proporcional à diferença entre a temperatura do corpo  $T(t)$  e a temperatura do meio ambiente  $T_a$ , ou seja

$$\frac{dT(t)}{dt} = k (T(t) - T_a) \quad (4.37)$$

em que,  $k$  é uma constante de proporcionalidade.

Se a temperatura do ambiente  $T_a$  é constante, a constante de proporcionalidade do resfriamento é negativa, ou seja,  $k < 0$ .

Neste caso, a solução desta equação com a condição inicial  $T(0) = T_0$  é dada por:

$$T(t) = T_a + (T_0 - T_a) e^{kt},$$

com  $k < 0$ , o que implica que a temperatura vai tendendo para a temperatura ambiente depois de um tempo grande.

A partir de observações experimentais, a Lei de Newton do resfriamento de um corpo pode ser aplicada com sucesso para descrever matematicamente problemas térmicos.

Uma aplicação desta lei é a determinação do instante de morte com precisão razoável no caso de homicídio ou de morte acidental, comparando a suposta temperatura natural do corpo em vida com a temperatura do corpo atual e a temperatura do ambiente.

Outra aplicação é a determinação do tempo que uma xícara de chá, café ou de alimento que acabou de sair do fogo leva para ficar na temperatura ideal para ser saboreado numa determinada temperatura ambiente, ou mesmo antes de esfriar completamente.

#### 4.8 Modelos de evolução de um ecossistema

O conjunto de todos os fatores bióticos e abióticos que atuam em determinadas regiões de nosso planeta é de grande complexidade e de difícil abordagem matemática.

Aristóteles já previa, muitos séculos antes da teoria de Darwin, que a competição entre duas espécies desempenhava um papel importante no processo de seleção natural e acreditamos que este foi o ponto de partida para análises de vários sistemas ecológicos que foram propostos ao longo dos séculos.

Foram Alfred J. Lotka e Vito Volterra que, na década de 20 do século passado, propuseram um modelo matemático para o sistema predador-presa e, a partir da última terça parte do século XX, outros modelos têm sido desenvolvidos e testados.

Consideramos um sistema ecológico simples com duas espécies competindo, uma do tipo predadora e a outra presa.

Sejam  $x(t)$  (milhares de) indivíduos da população de presas (herbívoros, por exemplo) e  $y(t)$  (milhares de) indivíduos predadores (canívoros) respectivamente num instante  $t$ . Os carnívoros devoram os herbívoros e os herbívoros só se alimentam de ervas consideradas abundantes numa região.

Na modelagem matemática, uma das quantidades mais úteis a serem consideradas são as taxas de crescimento específico, que podem ser constantes, depender do tempo, isto é,  $r_1 = r(t)$  e também da própria quantidade de indivíduos.

No caso das populações citadas, as taxas de crescimento específico são dadas por:

$$r_1 = \frac{1}{x} \frac{dx(t)}{dt} \quad \text{e} \quad r_2 = \frac{1}{y} \frac{dy(t)}{dt}.$$

Na ausência de predadores podemos propor que a população de presas tende a crescer de modo que a taxa  $r_1$  torna-se constante e positiva, representando a diferença entre o número de nascimentos e o número menor de mortes. Neste caso temos apenas a equação:

$$r_1 = \frac{1}{x} \frac{dx(t)}{dt}.$$

Entretanto, a existência de alguns predadores implica que a taxa de crescimento das presas diminua. Uma suposição mais simples é que ela decresce de acordo com a população de predadores, ou seja,  $r_1 = a_1 - b_1 y$  com  $a_1$  e  $b_1$  constantes positivas.

Do mesmo modo, na ausência de presas, a população de predadores tende a decair exponencialmente (caso não tivessem outra opção de alimento) e assim,  $r_2 = -a_2$  com a constante  $a_2 > 0$  mas, existindo algumas presas poderia proporcionar um crescimento de predadores.

Um modelo simples e apropriado é que a população de predadores também cresce de acordo com o número de presas, ou seja  $r_2 = -a_2 + b_2 x$  com a constante  $b_2 > 0$ .

Finalmente, obtemos o modelo dado pelo sistema de equações diferenciais ordinárias lineares

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = x(t)(a_1 - b_1 y(t)) = a_1 x(t) - b_1 x(t) y(t) \\ \frac{dy(t)}{dt} = y(t)(-a_2 + b_2 x(t)) = -a_2 y(t) + b_2 y(t) x(t) \end{cases} \quad (4.38)$$

Este sistema de equações é conhecido como modelo de Lotka-Volterra cujas constantes  $a_1$  e  $a_2$  são de crescimento e decaimento respectivamente e  $b_1$  e  $b_2$  representam os parâmetros de interação entre as espécies.

Este sistema de equações não possui solução analítica para  $x$  e  $y$  em função de  $t$ , mas conhecendo-se os parâmetros  $a_1, a_2, b_1, b_2$  e as condições iniciais  $x(0) = x_0$  e  $y(0) = y_0$  dadas, podemos resolver numericamente, pelos métodos que trataremos na seção 4.10.

Supomos agora, que a evolução do número de presas  $x(t)$  satisfaz a equação diferencial (4.38), em que  $a_1 = n$  é a taxa de nascimento de presas (constante) e  $b_1 = \phi$  (constante) o coeficiente que indica a frequência com que um predador encontra e devora uma presa.

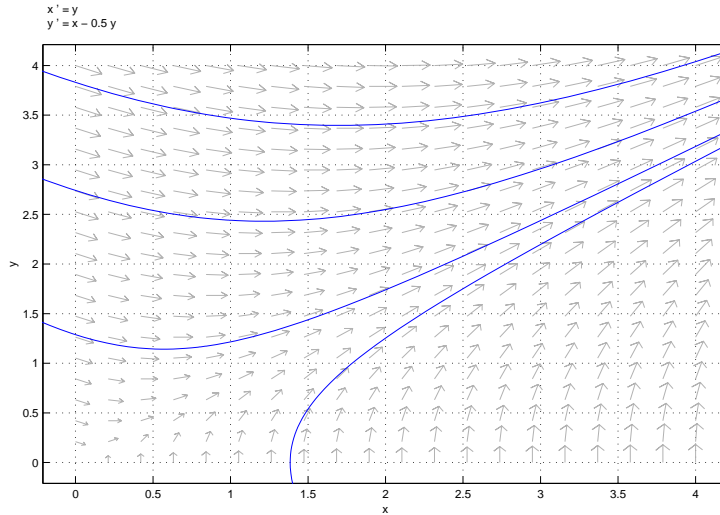
Desta forma escrevemos:

$$\frac{dx(t)}{dt} = n x(t) - \phi x(t) y(t) \quad (4.39)$$

Do mesmo modo, na equação 4.39 de evolução do predador com  $a_2 = m$ , a taxa de mortalidade do predador devido à fome considerada constante etc. O coeficiente  $b_2 = \phi c > 0$ , em que,  $c$  (constante) indica quantos predadores são necessários para devorar uma presa à medida que ocorre o encontro deles.

$$\frac{dy(t)}{dt} = -m y(t) + \phi c x(t) y(t) \quad (4.40)$$

O **espaço de fase** do sistema formado pelas equações (4.39) e (4.40) no plano  $xoy$ , ilustra as inclinações  $\frac{dy}{dx}$  que são mostradas na Figura 4.17 a seguir:



**Figura 4.17:** Plano de fase do modelo predador-presa

Neste modelo, temos dois estados estacionários, o ponto  $(x^*, y^*) = (0, 0)$  e o outro ponto não trivial,  $(x^{**}, y^{**}) = (\frac{m}{\phi c}, \frac{n}{\phi})$  são obtidos resolvendo o sistema de equações algébricas:

$$\begin{cases} n x - \phi x y = 0 \\ -m y + \phi c x y = 0 \end{cases}$$

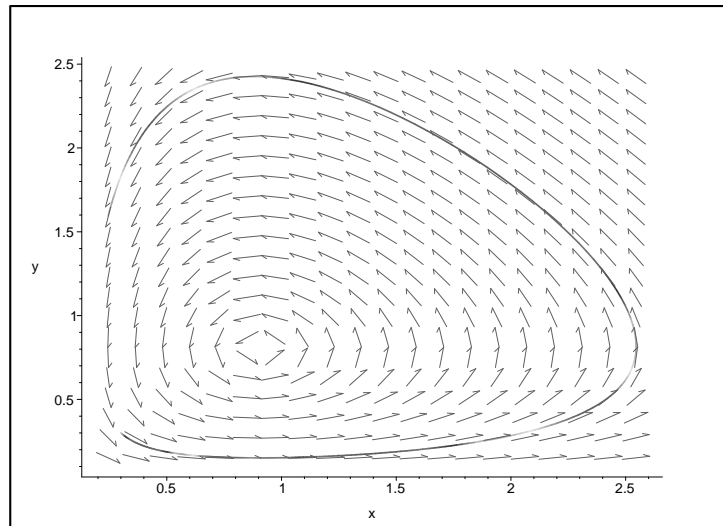
para  $x$  e  $y$ , correspondente a  $\frac{dx(t)}{dt} = 0$  e  $\frac{dy(t)}{dt} = 0$ , os quais são denominados de pontos fixos do sistema.

#### Exemplo 4.12

O estado estacionário não trivial e a evolução do sistema predador-presa para os valores dos parâmetros de nascimento  $n = 0.4$ , de encontro  $\phi = 0.5$ , de mortalidade  $m = 0.45$  e o número de predadores necessários para pegar uma presa  $c = 1$ .

Como o sistema é não linear, utilizamos o métodos numéricos para resolução do sistema anterior com as condições iniciais  $x(0) = 0.1$  e  $y(0) = 0.2$  conforme





**Figura 4.18:** Plano de fase predador-presa

solução obtida pelo Método de Euler Aperfeiçoado (ARENALES & SALVADOR, 2009) mostrada graficamente na Figura 4.18 e que veremos na seção 4.8.

Uma vez encontrada a solução, devemos examiná-la com cuidado e ver se a mesma realmente corresponde ao problema de valor inicial proposto e validar o modelo.

No caso do predador não interferir na população de presas e nem as presas na população de predadores, cada variável fica independente da outra, isto é,  $\phi = 0$  significa que não há encontros, cada variável fica independente da outra e podemos resolver separadamente cada equação. As equações (4.39) e (4.40) se reduzem a forma linear mais simples, em que as variáveis  $x(t)$  e  $y(t)$  independem uma da outra.

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = n x(t) \\ \frac{dy(t)}{dt} = -m y(t) \end{cases}$$

Outra variação do modelo de Lotka-Volterra é o modelo com competição, que acontece quando duas populações competem pela mesma fonte de alimentos e/ou espaço, de modo que uma das taxas decresce pela influência da outra população.

Neste caso, obtemos o sistema de equações diferenciais linear na forma

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = n_1 x(t) - k_1 y(t) \\ \frac{dy(t)}{dt} = n_2 y(t) - k_2 x(t) \end{cases}$$

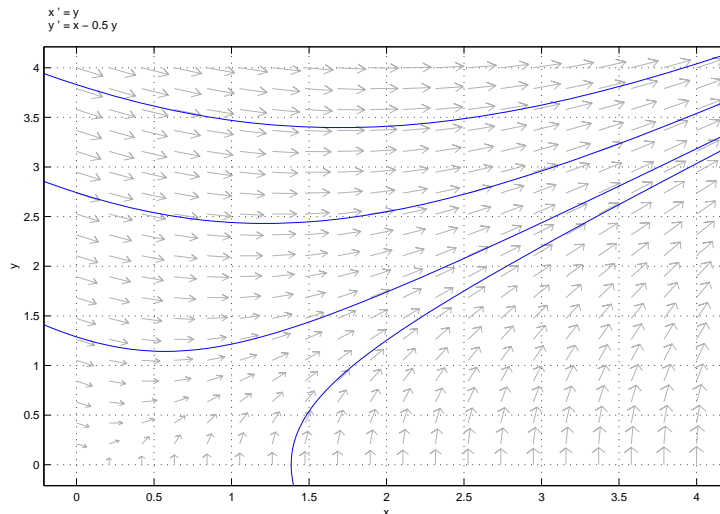
em que  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $k_1$  e  $k_2$  são constantes positivas.

#### **Exemplo 4.13**

Considere o modelo de competição em que uma população é afetada pela presença da outra, ou de um recurso natural afetado pela presença de outro, modelados pelo sistema de equações diferenciais lineares

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = y(t) \\ \frac{dy(t)}{dt} = x(t) - 0.5 y(t) \end{cases}$$

cujo plano de fase  $xy$  é mostrado na Figura 4.19 a seguir:



**Figura 4.19:** Plano de Fase

Outra variação do modelo de Lotka-Volterra é quando cada espécie cresce logisticamente e com competição,

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = a_1 x(t) - b_1 x^2(t) - c_1 x(t) y(t) \\ \frac{dy(t)}{dt} = a_2 y(t) - b_2 y^2(t) + c_2 x(t) y(t) \end{cases}$$

em que os coeficientes  $a_i$ ,  $b_i$  e  $c_i$  são positivos para  $i = 1, 2$ .

Para um estudo mais completo um sistema de duas ou mais equações diferenciais lineares ver referências como (BASSANEZI & FERREIRA, 1988) (BOYCE & DIPRIMA, 1999).

Como representar sistemas ambientais que apresentam certas periodicidades?

Sistemas de equações lineares aparecem em diversos modelos matemáticos, mas também na resolução de problemas modelados por equações diferenciais de ordem  $n$ ,  $n \geq 2$ .

É interessante notar o fato de que podemos transformar uma equação diferencial de ordem superior  $n \geq 2$  num sistema de  $n$  equações diferenciais de

primeira ordem.

De fato, uma equação diferencial de ordem  $n$ , dada por

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

pode ser escrita como um sistema de primeira ordem, fazendo as seguintes mudanças de variáveis:

$$\begin{aligned} x_1(t) &= x(t) \\ x_2(t) &= \frac{dx(t)}{dt} \\ x_3(t) &= \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \\ &\dots \\ x_n(t) &= \frac{d^{n-1} x(t)}{dt^{n-1}} \end{aligned}$$

Assim, podemos escrever o sistema de equações diferenciais de primeira ordem da seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_1(t)}{dt} = x_2(t) \\ \frac{dx_2(t)}{dt} = x_3(t) \\ \frac{dx_3(t)}{dt^2} = x_4(t) \\ \dots \\ \frac{dx_{n-1}(t)}{dt} = x_n(t) \\ \frac{dx_n}{dt} = f(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) \end{array} \right.$$

Na forma matricial, temos

$$X' = F(t, X)$$

em que  $X$  é a função vetorial

$$X(t) = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)]^T$$

em que  $T$  representa a transposta da matrix linha

$$X'(t) = \left[ \frac{dx_1(t)}{dt}, \frac{dx_2(t)}{dt}, \dots, \frac{dx_n(t)}{dt} \right]^T$$

Um sistema de equações diferenciais lineares de primeira ordem pode ser escrito na forma matricial como

$$X' = M X + g. \quad (4.41)$$

em que,  $M_{n \times n}$  é a matriz dos coeficientes formada por funções  $m_{ij}$  continuas em um intervalo real  $(a, b)$  e

$$g(t) = [g_1(t), g_2(t), \dots, g_n(t)]^T$$

é continua de  $(a, b)$ , então o problema de valor inicial dado por:

$$X' = M X + g$$

$$X(t_0) = X_0$$

para  $t_0 \in (a, b)$  possui uma única solução contínua definida em  $(a, b)$  (BOYCE & DIPRIMA, 1999).

Caso especial, quando  $g(t) = 0$ , temos um sistema de equações diferenciais ordinárias homogêneo

$$X' = M X \quad (4.42)$$

Se  $X_1$  e  $X_2$  são soluções de um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares homogêneo do tipo (4.42), então uma combinação linear de  $X_1$  e  $X_2$ , isto é,  $c_1 X_1 + c_2 X_2$ , é solução de (4.42).

Se  $X_i(t)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , são soluções linearmente independentes de (4.43), em que  $M$  é uma matriz constante  $n \times n$ , então:

**a)** O Wronskiano das soluções  $W([X_1(t), X_2(t), \dots, X_n(t)])$  é identicamente nulo ou nunca se anula (BOYCE & DIPRIMA, 1999);

**b)** a solução geral de  $X' = M X$  será uma combinação linear das soluções  $X_i(t)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  ou seja,

$$\phi(t) = c_1 X_1(t) + c_2 X_2(t) + \dots + c_n X_n(t)$$

é a solução geral de  $X' = M X$ .

Analogamente a procura da solução de uma equação diferencial ordinária homogênea de primeira ordem, um sistema de equações diferenciais ordinárias homogêneo de primeira ordem tem solução do tipo:

$$X(t) = C e^{Mt}$$

Portanto, para encontrar a solução de um sistema de equações diferenciais, devemos encontrar a matriz  $e^{Mt}$ .

Para isso, calculamos os autovalores  $\lambda$  e os autovetores  $v$  (não nulos) de  $M$ , isto é,

$$M v = \lambda v$$

com  $v \neq 0$ .

A equação característica do sistema de equações diferenciais anterior é a equação algébrica

$$\det(M - \lambda I) = 0$$

cujas soluções são os autovalores de  $M$ . Existem métodos numéricos para o cálculo de autovalores e autovetores (BURDEN & FAIRES, 2003).

Sabemos que se  $M$  é uma matriz Hermitiana (no caso real, simétrica) os autovalores são todos reais e distintos e existem  $n$  autovetores linearmente independentes.

Nem sempre existem autovetores linearmente independentes de modo que a construção da matriz  $e^{Mt}$  torna-se mais complexa.

#### Exemplo 4.14

Considerando a equação diferencial de segunda ordem

$$x''(t) - 8x'(t) + 1 = 0$$

Fazendo a mudança de variáveis,

$$\begin{aligned} x_1(t) &= x(t) \\ x_2(t) &= \frac{dx(t)}{dt} = \frac{dx_1(t)}{dt}, \end{aligned}$$

podemos transformar a equação diferencial de segunda ordem no sistema de equações diferenciais de primeira ordem:

$$\begin{cases} \frac{dx_1(t)}{dt} = x_2(t) \\ \frac{dx_2(t)}{dt} = 8x_2(t) - 1 \end{cases}$$

Este sistema de equações diferenciais ordinárias lineares de primeira ordem pode ser escrito na forma matricial como  $X' = M X + g$ , ou seja,

$$\begin{bmatrix} x_1'(t) \\ x_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

em que

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 8 \end{bmatrix}, \quad g = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Segue que a equação característica do sistema homogêneo associado

$$\begin{bmatrix} x_1'(t) \\ x_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}$$

é

$$\det(M - \lambda I) = 0 \tag{4.43}$$

Obtemos  $\lambda_1 = 0$  e  $\lambda_2 = 8$  como raízes de (4.43) que são os dois autovalores reais distintos de  $M$ . Logo as soluções são do tipo  $e^{0 \cdot t} = 1$  e  $e^{8 \cdot t}$ .

Associado aos autovalores  $\lambda_1 = 0$  e  $\lambda_2 = 8$  podemos calcular os respectivos autovetores:

$$u = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad e \quad v = \begin{bmatrix} 1 \\ 8 \end{bmatrix}$$

Assim as soluções deste sistema de equações lineares com coeficientes constantes são independentes

$$X_1(t) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad e \quad X_2(t) = \begin{bmatrix} 1 \\ 8 \end{bmatrix} e^{8t}$$

A solução geral do sistema será uma superposição delas do tipo:

$$\phi(t) = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + c_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 8 \end{bmatrix} e^{8t}$$

Observe que o Wronskiano das soluções  $X_1(t)$  e  $X_2(t)$  do sistema homogêneo é não nulo. De fato,

$$W(X_1(t), X_2(t)) = \det \begin{bmatrix} X_1(t) & X_2(t) \\ X_1'(t) & X_2'(t) \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} 1 & e^{8t} \\ 0 & 8e^{8t} \end{bmatrix} \neq 0$$

Resta agora, procurar uma solução não nula para o sistema não homogêneo

$$\begin{bmatrix} x_1'(t) \\ x_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Usando o método dos coeficientes a determinar, supomos que a solução particular seja do tipo

$$x_{2p}(t) = c_1 t + c_2$$

Derivando  $x_{2p}(t)$

$$x_{2p}'(t) = c_1$$

e, substituindo na equação  $x_2' = 8x_2 - 1$  obtemos

$$c_1 = 8(c_1 t + c_2) - 1 \Rightarrow c_1 - 8c_1 t - 8c_2 + 1 = 0,$$

que é satisfeita para todo  $t$ , então  $c_1 = 0$ ,  $-8c_2 + 1 = 0 \Rightarrow c_2 = \frac{1}{8}$ .

Logo, a solução geral do sistema de equações diferenciais ordinárias não homogêneas é:

$$\phi(t) = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + c_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 8 \end{bmatrix} e^{8t} + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{8} \end{bmatrix}$$

ou seja,  $x_1(t) = \frac{1}{8}e^{8t}$  e  $x_2(t) = \frac{1}{8} + e^{8t}$

## 4.9 Métodos numéricos para solução de EDO

A maior parte dos modelos matemáticos levam a um problema de valor inicial cuja equação diferencial ou sistema de equações diferenciais não são lineares.

Existem algumas técnicas que permitem obter soluções de equações diferenciais, entretanto, a maioria delas é trabalhosa ou mesmo não podem ser resolvidas analiticamente em termos das funções elementares. Neste caso utilizamos os métodos numéricos para obtenção da aproximação da solução.

Muitos métodos numéricos de resolução de equações diferenciais geralmente são baseados no desenvolvimento de uma função em uma Série de Taylor (ARENALES & SALVADOR, 2009).

### 4.9.1 Método baseado nas Séries de Taylor

Considerando o problema de valor inicial para a função  $y(x)$  dado por

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (4.44)$$

podemos supor que a solução possa ser escrita como uma série de potências (BOYCE & DIPRIMA, 1999) em torno do ponto  $x = x_0$ , ou seja,

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (x - x_0)^n$$

com  $c_1, c_2, \dots$  constantes.

Estas constantes podem ser determinadas como segue:

Expandindo a solução  $y(x)$  numa série de potências temos

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (x - x_0)^n = c_0 + c_1 (x - x_0) + c_2 (x - x_0)^2 + c_3 (x - x_0)^3 + \dots$$

Para  $x = x_0$ , obtemos  $y(x_0) = c_0$ ;

Derivando  $y(x)$  obtemos:

$$y'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n c_n (x - x_0)^{n-1} = c_1 + 2c_2 (x - x_0) + 3c_3 (x - x_0)^2 + \dots$$

Para  $x = x_0$ ,  $y'(x_0) = c_1$ ;

Derivando novamente  $y(x)$ , obtemos:

$$y''(x) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n (x - x_0)^{n-2} = 2c_2 + 3(2)c_3 (x - x_0) + \dots$$

Para  $x = x_0$ ,  $y''(x_0) = 2 c_2 \Rightarrow c_2 = \frac{y''(x_0)}{2}$ ,

E assim sucessivamente, obtemos os coeficientes da série  $c_n$  dados por:

$$y^{(n)}(x_0) = n! c_n \Rightarrow c_n = \frac{y^{(n)}(x_0)}{n!}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

#### Exemplo 4.15

Considere o Problema de Valor Inicial

$$\begin{cases} p' = -p(t) + 10t \\ p(0) = 1 \end{cases}$$

Calculando os valores das derivadas de  $p(t)$  no ponto  $t = 0$ , obtemos

$$p'(t) = -p(t) + 10t \Rightarrow p'(0) = -p(0) + 10 = -1$$

$$p''(t) = -p'(t) + 10 \Rightarrow p''(0) = -p'(0) + 10 = 11$$

$$p'''(t) = -p''(t) + 0 \Rightarrow p'''(0) = -p''(0) = -11, \dots$$

Substituindo os valores das derivadas de  $p$  calculadas no ponto  $t = 0$  na série de potências, obtemos

$$p(t) = p(0) + p'(0)t + \frac{p''(0)}{2!}t^2 + \frac{p'''(0)}{3!}t^3 + \dots$$

$$p(t) = 1 - t + \frac{11}{2!}t^2 - \frac{11}{3!}t^3 + \dots$$

$$p(t) = -10 + 10t + 11\left(1 - t + \frac{t^2}{2!} - \frac{t^3}{3!} + \dots\right)$$

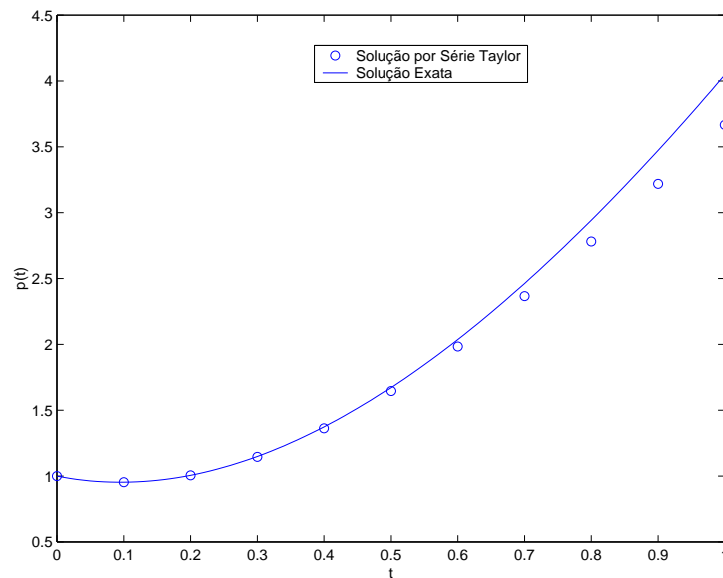
Como  $e^{-t} = 1 - t + \frac{t^2}{2!} - \frac{t^3}{3!} + \dots$ , temos que a solução obtida pelo Método da Série de Taylor é a solução analítica conforme Figura 4.20 dada por:

$$p(t) = -10 + 10t + 11e^{-t}.$$

Entretanto, nem sempre é fácil de obter as derivadas de uma função ou mesmo expressar a solução de uma equação diferencial em termos de uma Série de Taylor como funções conhecidas como neste exemplo.

Uma estratégia consiste em truncar o desenvolvimento da Série de Taylor e assim obter uma aproximação da solução na vizinhança do ponto inicial.





**Figura 4.20:** Soluções aproximada por Série de Taylor e exata

#### 4.9.2 Método de Euler

Para um problema de valor inicial do tipo (4.44)

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

podemos utilizar como uma primeira aproximação o Método de Euler.

Desenvolve-se a função  $y(x)$  numa Série de Taylor até a ordem 1 em torno do ponto  $x_0$  (ARENALES & SALVADOR, 2009).

Considerando  $x_1 = x_0 + h$  e  $y_0 = f(x_0, y_0)$  dados, obtemos:

$$y(x_1) \approx y(x_0) + h y'(x_0)$$

ou

$$y(x_0 + h) \approx y(x_0) + h y'(x_0) = y_0 + h f(x_0, y(x_0))$$

Assim, o valor aproximado  $y_1$  da função  $y(x)$  no ponto  $x_1$ , conhecendo-se os valores de  $x_0$  e de  $y(x_0)$ , é dado por

$$y_1 = y(x_0) + h f(x_0, y(x_0)) = y_0 + h f(x_0, y_0)$$

Repetindo este procedimento tomando-se  $x_1$  como referência e  $y_1$  o valor de  $y(x_1)$  (agora aproximado) determinamos uma aproximação para  $y(x_1)$  dada por:

$$y_2 = y_1 + h f(x_1, y_1)$$

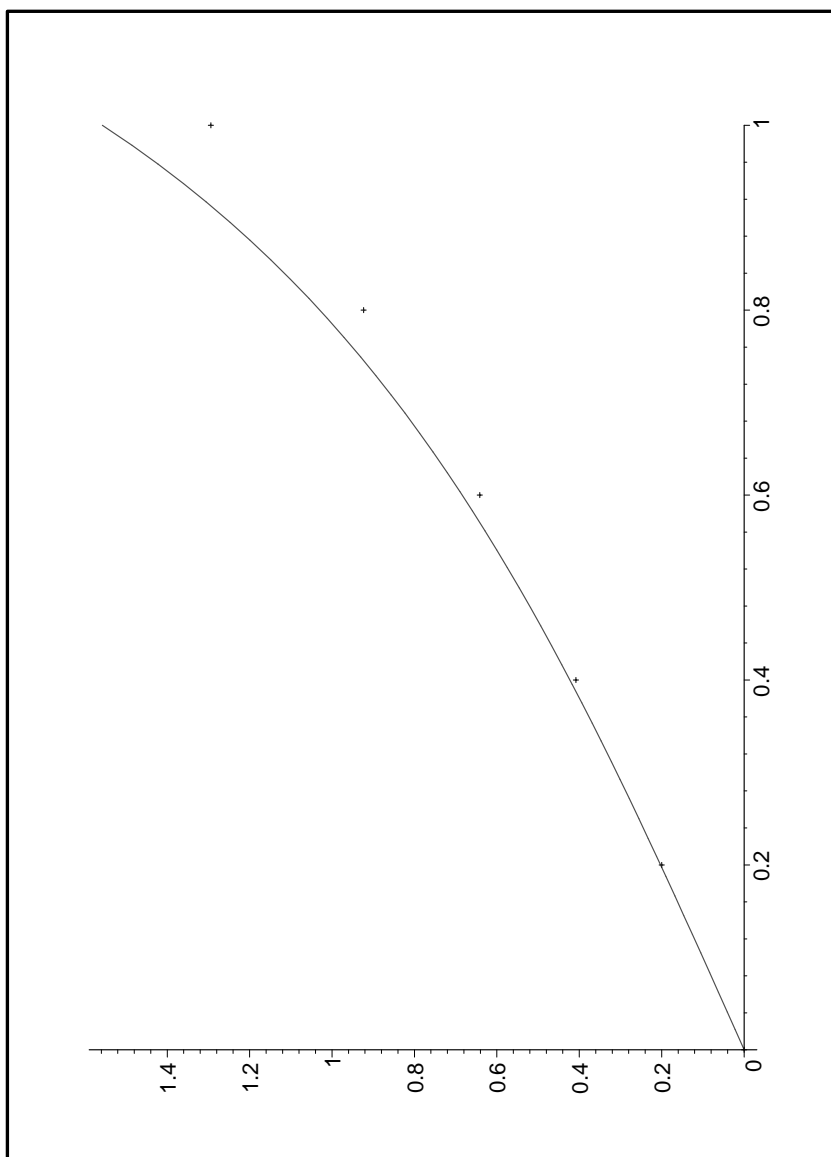
E assim sucessivamente, para cada um dos pontos  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$  de um intervalo de definição da solução.

De uma maneira geral temos:

$$y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i), \quad i = 1, 2, \dots, N-1$$

Graficamente o Método de Euler consiste em aproximar o valor da função  $y(x)$  num ponto  $x_1$  pela reta tangente ao gráfico da função  $y(x)$  no ponto dado  $(x_0, y(0))$ .

Graficamente podemos observar o valor da solução exata com o traço contínuo e os valores aproximados representados pelos pontos na Figura 4.21.



**Figura 4.21:** Método de Euler

Como no Método de Euler, o desenvolvimento da Série de Taylor de uma função é truncada após o termo linear, consequentemente o erro local é dado por:

$$E = \frac{y''(\xi) h^2}{2!}, \quad \xi \in [a, b].$$

Como o parâmetro  $\xi$  não é conhecido no intervalo de discretização, consideramos uma estimativa para o erro, isto é, um limitante superior para o erro:

$$E \leq \frac{M h^2}{2!}, \text{ em que, } M = \max \{|y''(x)|, x \in [a, b]\}.$$

Utilizando agora um **aperfeiçoamento do Método de Euler** calculamos a solução do problema de valor inicial (4.44) da seguinte forma:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} (f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + h y'_i)), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N-1.$$

De fato, com o aperfeiçoamento do Método de Euler o algoritmo fica:

Para  $i = 0, 1, 2, \dots, (N-1)$ , calculamos:

inicio

$$\left[ \begin{array}{l} x_{i+1} = x_i + h \\ k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_2 = f(x_{i+1}, y_i + h k_1) \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \end{array} \right.$$

fim

Neste caso, verificamos a interpretação geométrica do Método de Euler aperfeiçoado (ARENALES e SALVADOR, 2009), que é uma inclinação média entre a tangente e a secante e o erro local diminui para um valor da ordem  $h^3$ .

Embora seja um método mais acurado do que o de Euler, ainda assim, podemos obter aproximações melhores generalizando-o para um **Método de Runge-Kutta de 4ª. Ordem**, calculando

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

em que  $\frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$  é um valor do coeficiente angular médio ponderado em que

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_2) \\ k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3) \end{array} \right.$$

Neste caso, o erro de truncamento local torna-se da ordem de  $h^5$  e num intervalo finito o erro global é da ordem de  $h^4$ .

O passo principal do método de Runge-Kutta de quarta ordem calculado para  $i = 0, 1, \dots, (N - 1)$  é dado por:

Calcule:

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = f(x_i, y_i) \\ k_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_2) \\ k_4 = f(x_{i+1}, y_i + hk_3) \\ y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ x_{i+1} = x_i + h \end{array} \right.$$

#### Exemplo 4.16

Considere o crescimento de uma população  $y(x)$  dado pelo problema de valor inicial

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dp(t)}{dt} = \sqrt{\left(\frac{p(t)^2+3}{3}\right)^3} \\ p(0) = 1 \end{array} \right.$$

Utilizando o Método de Euler resolvemos o problema de valor inicial dado comparando a solução numérica com a solução analítica. Graficamente a comparação da solução numérica obtida com passo  $h = 0.1$  com a solução analítica pode ser visualizada na Figura 4.21.

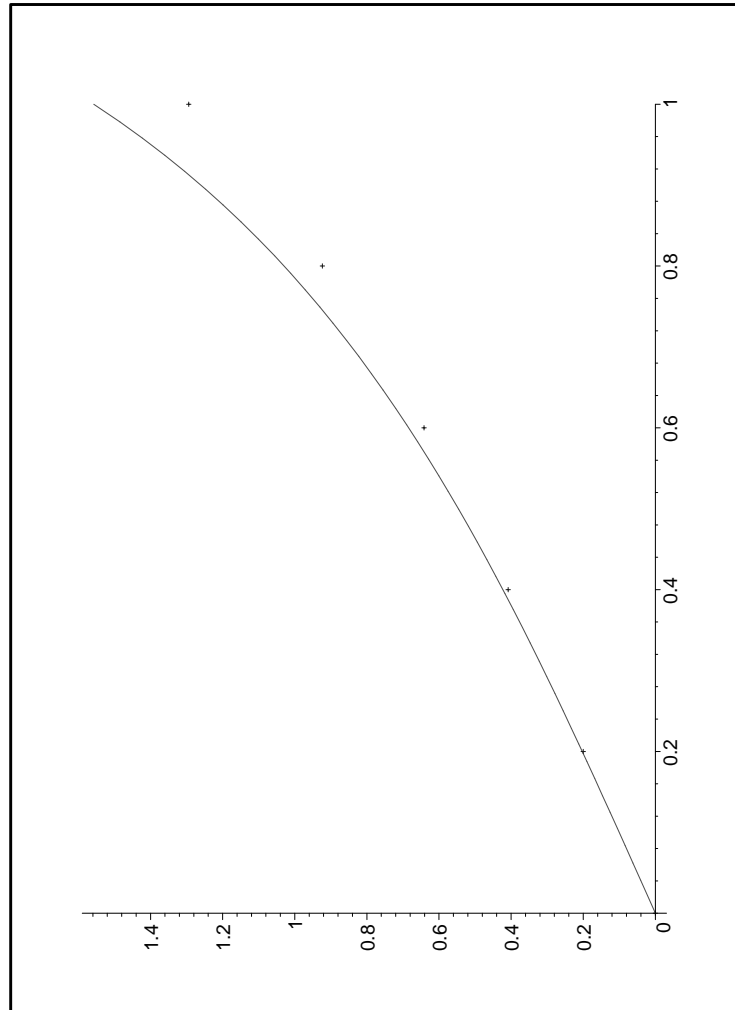
Utilizando o Método de Runge-Kutta resolvemos o problema de valor inicial do exemplo 4.16 com passo  $h = 0.1$  e comparamos os resultados obtidos com a solução analítica como na Figura 4.22.

Graficamente podemos ilustrar a solução exata e as soluções aproximadas de Euler e Runge-Kutta conforme Figura 4.23

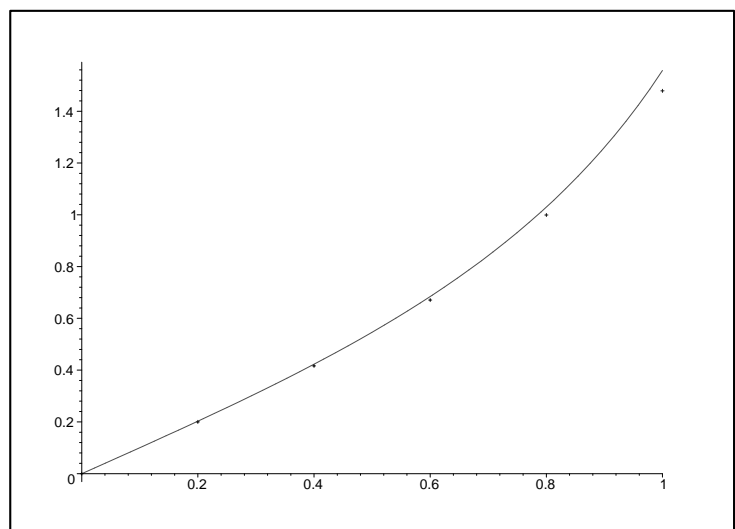
Observamos que o método de Runge-Kutta de quarta ordem realmente ofereceu melhores resultados em relação ao Método de Euler, que é um método de Runge-Kutta de primeira ordem.

Embora o método de Euler aperfeiçoado seja mais acurado do que o método de Euler, podemos obter melhores aproximações pelo Método de Runge-Kutta de quarta ordem conforme (ARENALES & SALVADOR, 2009).

Nesta unidade apresentamos algumas ideias para os modelos ambientais tratados com as equações diferenciais ordinárias, considerando apenas algumas variáveis para que os modelos não ficassem tão complexos a ponto de não conseguirmos resolvê-los. Desta forma, esperamos ter apontado um caminho para



**Figura 4.22:** Solução exata e pelo Método de Euler



**Figura 4.23:** Método de Runge-Kutta

elaboração de alguns modelos mais gerais, levando em consideração outros aspectos populacionais, recursos naturais, poluição etc.

Lembramos ainda, que nesta unidade é essencial o conhecimento da teoria das equações diferenciais ordinárias, os métodos de resolução, as ferramentas teóricas e computacionais para compreensão e resolução dos modelos abordados.

#### 4.10 Problemas propostos

1. **Crescimento ou Decaimento Exponencial:** Pesquise problemas que podem ter o mesmo tipo de comportamento exponencial regido por uma equação diferencial ordinária que podem ser modelados pela equação (4.1).
2. **Equações diferenciais com variáveis separáveis:** É possível mostrar que uma equação diferencial do tipo  $\frac{dy}{dx} = g(ax + by + c)$  em que  $g$  é uma função das variáveis  $x$  e  $y$  e,  $a$ ,  $b$  e  $c$  são constantes reais pode ser transformada numa equação diferencial com variáveis separáveis mediante a substituição  $u = ax + by + c$ .
3. **Evaporação de uma gota de Chuva:** Considere uma gota de chuva perfeitamente esférica. Suponha que sua evaporação seja proporcional à área de sua superfície à medida que cai. Se o raio inicial de uma gota de chuva é igual a 3.04 mm e 10 minutos depois diminui para 2.5 mm. Encontre uma expressão para o tamanho do raio da gota em função do tempo. Em quanto tempo  $t_{r/2}$  o raio da gota reduzirá a metade? E em quanto tempo  $t_{m/2}$  o tamanho da gota reduzirá a metade?
4. **Evaporação da Naftalina:** Pesquise o problema da evaporação de uma bola esférica de naftalina que vai perdendo massa por evaporação, uma analogia com o problema de evaporação de uma gota de chuva. Considere que a razão com que ela perde massa é proporcional a área de sua superfície. Quanto tempo a esfera de naftalina demorará para desaparecer sabendo-se que a meia vida dela, ou seja, o tempo em que esta perde metade de sua massa é igual a  $t_{\frac{1}{2}} = 75$  dias.
5. **Contaminação:** Para testar uma teoria de propagação de um tipo de doença contagiosa seleciona-se e isola uma população de 150 animais. Intencionalmente inocula-se 2% deles. Verifica-se que a taxa de variação da população

infectada é proporcional ao produto do número de animais infectados pelo número de sadios. Supondo que esta hipótese seja válida e que a constante de proporcionalidade  $k = 0.05$ , será que um terço da população será contaminada? Neste caso, qual o tempo (anos) necessário para que um terço da população contraia a doença?

6. **População:** Mostre as seguintes características da equação logística generalizada (4.12) dada por:  $\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t)^\alpha \left(1 - \left(\frac{p(t)}{K}\right)^\beta\right)^\gamma$  em que  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$  reais.

a) Que  $p(t)$  converge para a sua capacidade suporte:  $\lim_{t \rightarrow \infty} p(t) = K$ ;

b) A taxa de crescimento relativo  $\frac{1}{p} \frac{dp}{dt}$  atinge seu valor máximo em  $P^* = \left(1 + \frac{\beta\gamma}{\alpha-1}\right)^{\frac{-1}{\beta}} K$  desde que  $P^* > P_0$ , caso contrário, ele decresce linearmente até atingir o mínimo em  $P = K$ ;

c) Faça simulações e mostre o gráfico da solução para o modelo logístico generalizado em cada um dos casos propostos:

c<sub>1</sub>)  $r_0 = 0.3$ ,  $P_0 = 0.1$ ,  $K = 35$ ,  $\alpha = 1.5$ ,  $\beta = 1.5$  e  $\gamma = 2.25$ ;

c<sub>2</sub>)  $r_0 = 1$ ,  $P_0 = 0.5$ ,  $K = 45$ ,  $\alpha = 0.5$ ,  $\beta = 1.5$  e  $\gamma = 1$ ;

c<sub>3</sub>)  $r_0 = 0.1$ ,  $P_0 = 1$ ,  $K = 100$ ,  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 3$  e  $\gamma = 2$ .

7. **Poluição:** Elabore um modelo matemático de poluição do ar envolvendo um problema de valor inicial. Sugestão: Considere a idéia do modelo de poluição numa represa.

8. **Lei de Malthus:** Esboce o gráfico de  $p(t)$  do modelo contínuo da Lei de Malthus e do modelo discreto de crescimento da população apresentado no Exemplo 3.5 e compare-os. Observe o que aconteceria com um crescimento ilimitado de uma população deste tipo sem restrições. Pesquise os dados do local onde você vive atualmente e analise um caso de crescimento de uma determinada população da região num intervalo de tempo estabelecendo hipóteses que julgar razoáveis.

9. **A equação de Verhust é uma equação do tipo da de Bernoulli:** Resolva o problema de valor inicial  $\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t) - \frac{r_0 p(t)^2}{K}$  com  $p(0) = p_0$ .

Obtenha um problema de valor inicial constituído da equação diferencial logística e a respectiva condição inicial do problema. Obtenha a solução analítica do problema. Faça simulações aumentando ou diminuindo os valores dos parâmetros  $r_0$  e  $K$  para explorar várias situações possíveis de um

recurso natural considerado. Verifique em que instante a solução obtida muda de concavidade.

10. **PVI:** Pesquise um problema de valor inicial de um recurso natural gerado pela equação 4.12. Obtenha a solução analítica passo a passo do problema. Faça simulações aumentando ou diminuindo os valores dos parâmetros  $r_0$  e  $K$  para explorar várias situações possíveis do recurso natural considerado. Verifique em que instante a solução muda de concavidade.
11. **Recuperando o ambiente:** Pesquise um problema e gere um modelo em que um recurso natural é consumido mas é repostado constantemente, em vez de ser apenas retirado.
12. **Simulação:** Estabeleça os parâmetros para um modelo de exploração de recurso natural dada por:  $\frac{dp(t)}{dt} = r_0 p(t) \frac{K-p(t)}{K} - \varepsilon p(t)$ , em que  $\varepsilon > 0$  é uma quantidade pequena. Dê uma condição inicial, discretize e simule numericamente a solução do PVI. Compare a solução com a solução analítica: 
$$p(t) = \frac{K(r-\varepsilon)}{r+C K r e^{-(r-\varepsilon)t} - C K \varepsilon e^{-(r-\varepsilon)t}}.$$
13. **Montroll:** Verifique que o ponto  $p_m$  do modelo de Montroll em que o crescimento é máximo, depende do parâmetro  $\alpha$ :  $p_m = K \left( \frac{1}{1+\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha}}$ . Mostre que quando  $\alpha \rightarrow 1$ , o ponto  $p_m$  em que o crescimento da curva solução é máximo coincide com o valor obtido no modelo logístico, ou seja,  $\lim_{\alpha \rightarrow 1} p_m = \frac{K}{2}$  e, quando  $\alpha \rightarrow \infty$ , temos que  $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} p_m = K$ .
14. **Modelo de Ayala, Ehrenfeld & Gilpin:** Em 1973 eles introduziram um modelo representado pela equação diferencial ordinária não linear e não homogênea do tipo:

$$\frac{dp(t)}{dt} = p(t) \left( r - \alpha p(t) + \beta e^{-p(t)} \right) \quad (4.45)$$

em que os parâmetros reais constantes  $r > 0$ ,  $\alpha > 0$  e  $\beta > 0$ .

Este modelo leva em consideração a migração da população de modo que quando esta for grande, então a imigração é pequena. Porém, quando a população for pequena, então a imigração é grande.

Um dos pontos de equilíbrio da solução é  $p(t) = 0$ , ou dado pela solução de  $r - \alpha p(t) + \beta e^{-p(t)} = 0$  que pode ser determinado por um método numérico conhecido.

Resolva numericamente o modelo escolhendo parâmetros reais  $r$ ,  $\alpha$  e  $\beta$  e uma condição inicial.



15. **Michaelis-Menten:** Mostre a solução do problema de valor inicial do modelo Michaelis-Menten e a curva que representa a evolução do processamento do álcool no organismo considerando a quantidade inicial  $c(0) = 0.025$ ,  $k_2 = 0.005$  e  $k_1 = 1$ . Em seguida, considere o modelo simplificado, dado que  $c(t) \gg k_2$  (taxa de processamento constante) e compare as soluções.
16. **Desintegração Radioativa:**
- a) O elemento químico Bário ( $^{140}\text{Ba}$ ) possui meia vida igual a  $t_b = 13$  dias, enquanto o Urânio ( $^{235}\text{U}$ ) tem a meia vida  $t_u = 7.13 \times 10^8$  anos. Explore a taxa de desintegração radioativa destes elementos.
  - b) Pesquise sobre a datação de fósseis pela observação da quantidade de carbono 14 ( $^{14}\text{C}$ ) existente numa amostra encontrada.
17. **Modelo de Smith:** O modelo de Smith nos leva a explorar soluções numéricas de equações diferenciais ordinárias. Especifique alguns valores para os parâmetros do modelo de Smith e para a condição inicial e encontre uma solução para a equação que o rege.
18. **Misturas:** Pesquise um problema ambiental que envolva misturas e que possa ser modelado por uma equação diferencial ordinária do tipo 4.30, identificando cada um de seus termos.
19. **Reatores:** Muitos processos químicos, como a evolução de reatores podem ser modelados por equações ou sistemas de diferenciais ordinárias. Pesquise e explore alguns sistemas de reatores químicos modelados por equações diferenciais ordinárias como o CSTR (Continuously Stirred Tank Reactor).
20. **Reações químicas:** Encontre a solução geral da equação 4.32. Obtenha a solução do problema de valor inicial constituído da equação  $\frac{dx(t)}{dt} = 0.2(5 - x(t))^2$  com o valor inicial  $x(0) = 3$ . Pesquise e explore problemas que possam ser modelados por equações de reação de segunda ordem.
21. **Resfriamento de uma xícara de chá:** Estude o problema do resfriamento de uma xícara de chá utilizando a lei de resfriamento de Newton para difusão do calor. Faça experimentos e formule um modelo matemático. Para tal, utilize um termômetro para medir a temperatura inicial do chá e as temperaturas do mesmo em outros instantes a medida que vai resfriando. Considere os intervalos consecutivos para comparar os resultados encontrados com os do modelo matemático.

22. **Tsunami, ondas gigantes:** Quando uma onda gigante é provocada por uma tempestade marítima ou maremoto a sua altura  $h$  observada de um ponto situado a uma distância  $x$  da costa, pode ser representada por uma equação diferencial do tipo  $\frac{dh(x)}{dx} = k h(x) \sqrt{4 - 2h(x)}$  em que  $k \in \mathbb{R}$ .

a) Obter os pontos de equilíbrio desta equação.

b) Encontre uma solução geral desta equação.

c) Em seguida, obtenha a solução numérica e esboce o gráfico do problema de valor inicial correspondente com a condição inicial  $h(0) = 2$  e considerando  $k = 1$ .

23. **Lotka-Volterra:** Escolha um conjunto de parâmetros e condições iniciais para verificar que o modelo de Lotka-Volterra nos sugere que o ecossistema se comporta num ciclo contínuo de crescimento e decaimento das espécies. Faça o gráfico das soluções para as presas e para os predadores bem como o plano de fase  $x \times y$  cujas curvas fechadas contornam o ponto de equilíbrio do ecossistema  $(\frac{a_2}{b_2}, \frac{a_1}{b_1})$ .

Observe que o modelo de duas espécies pode ser generalizado para  $n$  espécies  $x_i(t)$  em que as taxas de crescimento específico das populações são dadas pelo sistema:

$$r_i = \frac{1}{x_i} \frac{dx_i(t)}{dt}$$

para  $i = 1, 2, 3, \dots, n$  e  $r_i = r_i(x_1, x_2, \dots, x_n, a_1, a_2, \dots, a_n, t)$ .

24. **Ecossistemas:** Explore modelos de ecossistemas descritos na seção (4.7) e problemas que podem ser modelados como o de predador-presa que sejam representativos de alguns ecossistemas conhecidos.

25. **Fenômeno periódico:** Pesquise um fenômeno periódico em que os autovalores da matriz de um sistema de equações diferenciais homogêneo com coeficientes constantes são complexos conjugados ou de multiplicidade  $r$ ,  $r \geq 2$ .



# UNIDADE 5

Modelos com EDP



## 5.1 Introdução

Um modelo que necessita de funções de várias variáveis e as relações com suas derivadas parciais, geralmente é traduzido numa linguagem matemática por uma ou mais equações diferenciais parciais (edp) com valores iniciais e condições de contorno.

As equações diferenciais parciais geralmente são oriundas dos princípios básicos da mecânica dos meios contínuos que geram vários modelos matemáticos ambientais sejam de primeira ou de segunda ordem com valores iniciais e condições de contorno.

Nesta unidade apresentaremos modelos matemáticos ambientais que utilizam as equações diferenciais parciais na sua formulação e alguns métodos de resolução analítico e numérico.

Uma equação diferencial parcial (edp) é uma equação que contém uma função incógnita de várias variáveis e suas derivadas parciais.

Um exemplo simples de uma edp bastante utilizada é a equação que modela a difusão de uma quantidade  $c = c(x, t)$ ,  $x \in [a, b] \subset \mathbb{R}$  e  $t > 0$  duas vezes diferenciável satisfazendo  $c_t = c_{xx}$  em que  $c_t = \frac{\partial c(x, t)}{\partial t}$  representa a derivada parcial de  $c(x, t)$  com relação a variável  $t$  e  $c_{xx} = \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2}$  é a derivada parcial segunda de  $c(x, t)$  duas vezes com relação a variável  $x$ .

## 5.2 Equações da termodinâmica dos meios contínuos

Da mesma forma que postulamos as leis da mecânica clássica também postulamos as leis de balanço de massa, momento linear, momento angular, energia e entropia para um corpo simples ou mesmo para uma mistura de  $n$  constituintes ocupando uma região  $R$  no espaço  $\mathbb{R}^3$ . Neste texto não exploraremos a segunda lei da termodinâmica expressa pela desigualdade da entropia.

Consideremos um corpo material  $C$  contido numa região  $R$  do espaço tridimensional  $\mathbb{R}^3$ .

O movimento de um corpo material  $C$  é representado por uma função contínua e pelo menos duas vezes diferenciável  $\chi : R \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$  em que a cada ponto  $X \in R$  e a cada instante  $t \in \mathbb{R}$  associa uma posição  $\chi$  no espaço  $\mathbb{R}^3$  dada por  $\chi(X, t)$ .

E numa configuração referencial  $\kappa$ , escrevemos  $\kappa = \kappa(X)$ .

Definimos a velocidade  $v = v(x, t)$  do corpo  $C$  num ponto  $X$  e num instante  $t$  pela função:

$$v(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \chi(X, t)$$

A aceleração  $a = a(x, t)$  de  $C$  é definida por

$$a(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} v(X, t).$$

O gradiente de deformação  $\mathcal{F}$  do corpo  $C$  é definido como

$$\mathcal{F} = \text{grad}(\chi_\kappa(X)),$$

com  $\det(\mathcal{F}) \neq 0$ , representando o determinante de  $\mathcal{F}$ , e  $\text{grad}(\chi_\kappa(X))$  o operador gradiente.

Considerando os lugares  $X$  do espaço  $\mathbb{R}^3$  ocupado pelo corpo  $C$  e a densidade de massa ou massa específica  $\rho$  de  $C$  sobre um volume infinitesimal  $V \subset \mathbb{R}^3$  como uma função suave não negativa  $\rho : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $\rho(X, t)$ .

A temperatura absoluta  $\theta = \theta(X, t)$  do corpo  $C$  também é considerada uma função real não negativa de  $X$  e de  $t$ .

Escrevemos a derivada (derivada total) para o campo escalar da função temperatura  $\theta = \theta(X, t)$  do corpo  $C$  como

$$D\theta(t) = \frac{\partial}{\partial t} \theta(X, t) + [\text{grad}(\theta(X, t))] \cdot v \quad (5.1)$$

em que  $\text{grad}(\theta(X, t))$  é o gradiente de temperatura e  $\cdot$  (o ponto) representa o produto escalar.

O gradiente de velocidade  $\text{grad}(v(X, t))$  é o tensor (LAY et all, 1978) repre-

sentado pela matriz

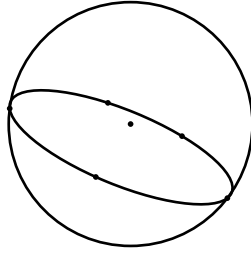
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} & \frac{\partial v_1}{\partial x_2} & \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x_1} & \frac{\partial v_2}{\partial x_2} & \frac{\partial v_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial v_3}{\partial x_1} & \frac{\partial v_3}{\partial x_2} & \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \end{bmatrix}$$

A derivada do campo vetorial da velocidade

$$Dv(t) = \frac{\partial v(X, t)}{\partial t} + [\text{grad}(v(X, t))] v \quad (5.2)$$

Observamos que nas derivadas 5.1 e 5.2 anteriores aparecem uma parcela devido a variação local da quantidade mais uma parcela advectiva devido o movimento do corpo no espaço considerado.

Agora vamos estabelecer uma lei de balanço geral para uma quantidade  $Q = Q(x, y, z, t)$  de um corpo  $C$  qualquer ocupando uma região  $R \subset \mathbb{R}^3$  no espaço tridimensional  $xyz$  no instante  $t$ :



**Figura 5.1:** Corpo material  $C \in \mathbb{R}^3$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\mathcal{R}} \rho Q \, dx dy dz = - \iint_{\partial \mathcal{R}} F n \, dx dy + \iiint_{\mathcal{R}} S \, dx dy dz + \iiint_{\mathcal{R}} P \, dx dy dz \quad (5.3)$$

em que:

- $\rho = \rho(x, y, z, t)$  é a densidade de massa de  $C$ ;
- $F = F(x, y, z, t)$  é o fluxo de  $Q$  através da fronteira  $\partial \mathcal{R}$  na direção a normal exterior  $n$  à mesma;
- $S = S(x, y, z, t)$  é o suprimento externo de  $Q$ ;
- $P = P(x, y, z, t)$  é a produção interna de  $Q$ ;
- $dV = dx \, dy \, dz$  representa um elemento infinitesimal de volume.

A interpretação da lei de balanço geral para uma quantidade  $Q$  do corpo  $C$  é que a variação de  $Q$  na região  $\mathcal{R}$  é igual à soma de três parcelas principais que representam o fluxo de  $Q$  na região  $\mathcal{R}$  através da fronteira  $\partial \mathcal{R}$ , que indica a quantidade de  $Q$  que entra na região, menos quantidade que sai,  $S$  é o suprimento externo de  $Q$  e  $P$  a produção interna de  $Q$ .

Supomos a suavidade dessas quantidades consideradas, no sentido de que elas são funções contínuas e deriváveis até a ordem necessária de modo que, aplicando o teorema do transporte (LIU, 2009), uma generalização do teorema fundamental do cálculo, ao primeiro termo da lei de balanço, escrevemos:

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\mathcal{R}} \rho Q \, dx \, dy \, dz = \iiint_{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Q) \, dx \, dy \, dz + \iiint_{\mathcal{R}} \text{div}(\rho Q \mathbf{v}) \, dx \, dy \, dz \quad (5.4)$$

em que  $\text{div}(\rho Q \mathbf{v})$  representa o divergente do produto da densidade da quantidade  $Q$  pela velocidade  $\mathbf{v}$ .

Aplicando o teorema da divergência ou de Gauss, C. F. (THOMAS et al, 2001) a primeira parcela do segundo membro da lei de balanço, temos:

$$\frac{d}{dt} \iint_{\partial \mathcal{R}} F n \, dx \, dy = \iiint_{\mathcal{R}} \text{div}(F) \, dx \, dy \, dz \quad (5.5)$$



Com as equações (5.4) e (5.5) a equação de balanço (5.3) torna-se:

$$\begin{aligned} & \iiint_R \frac{\partial}{\partial t}(\rho Q) \, dx \, dy \, dz + \iiint_R \operatorname{div}(\rho Q \mathbf{v}) \, dx \, dy \, dz = \\ & - \iiint_R \operatorname{div}(\mathbf{F}) \, dx \, dy \, dz + \iiint_R S \, dx \, dy \, dz + \iiint_R P \, dx \, dy \, dz. \end{aligned}$$

E usando a linearidade dos operadores de integração obtemos

$$\iiint_R \left( \frac{\partial}{\partial t}(\rho Q) + \operatorname{div}(\mathbf{F} + \rho Q \mathbf{v}) - S - P \right) \, dx \, dy \, dz = 0. \quad (5.6)$$

Como a região escolhida  $R$  é arbitrária, dentre uma família de regiões em que vale o teorema da divergência e os integrandos são funções consideradas contínuas nesta região, obtemos a lei de balanço geral para uma quantidade  $Q$  na forma de uma equação diferencial parcial;

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Q) + \operatorname{div}(\mathbf{F} + \rho Q \mathbf{v}) - S - P = 0. \quad (5.7)$$

A partir desta equação de balanço geral podemos especificar a quantidade  $Q$  para massa, momento linear, momento angular e energia que geralmente são consideradas em alguns modelos matemáticos ambientais termodinâmicos.

### 5.3 Lei de balanço de massa

O conceito de massa de um corpo  $C$  do espaço tridimensional ficou estabelecido no século XVI como sendo uma medida de inércia do corpo, e no século XIX Gauss deu uma definição racional como

$$\iiint_R \rho \, dV,$$

em que  $dV$  é um elemento de volume e  $R$  a região ocupada pelo corpo  $C$ . Em um sistema de coordenadas cartesianas ortogonais escrevemos  $dV = dx \, dy \, dz$  para um elemento de volume cúbico de lados infinitesimais  $dx$ ,  $dy$  e  $dz$ .

Considerando a possibilidade de ocorrer geração de massa por meio de reações químicas ou transferências físicas, a massa de um corpo pode variar com o tempo e conseqüentemente não será necessariamente preservada.

Fazendo  $Q = 1$ ,  $\mathbf{F} = 0$ ,  $S = 0$  e  $P = m$  na equação (5.3) temos que a quantidade de geração de massa para o corpo  $C$  ocupando uma região  $R \subset \mathbb{R}^3$ , é dada por

$$\frac{d}{dt} \iiint_R \rho \, dx \, dy \, dz = \iiint_R m \, dx \, dy \, dz$$

e, na forma diferencial local torna-se

$$\frac{d}{dt}\rho + \text{div}(\rho v) - m = 0 \quad (5.8)$$

para todo ponto do corpo material  $C$ .

Em um problema que pode ser considerado unidimensional, a função densidade de massa é escrita como  $\rho = \rho(x, t)$ , e a massa de um fio ou uma barra homogênea de extremidades  $a = x_1$  e  $b = x_2$  é dada por

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx$$

A equação de balanço de massa pode ser escrita como

$$\frac{d\rho}{dt} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} = m$$

No caso especial, em que não ocorre geração de massa para o corpo  $C$ , ou seja,  $m = 0$ , temos a equação de conservação de massa ou equação da continuidade:

$$\frac{d\rho}{dt} + \frac{\partial\rho v}{\partial x} = 0. \quad (5.9)$$

Em particular, quando a densidade independe do tempo  $t$ , como no caso de um escoamento de um fluido incompressível, como a água na maioria dos casos,  $\frac{\partial\rho}{\partial t} = 0$ , a equação da continuidade torna-se:

$$\text{div}(v) = 0.$$

Em uma dimensão, a equação anterior torna-se

$$\frac{d}{dx}v(x) = 0.$$

A seguir mostraremos um problema da poluição que está sendo levada ao longo de um rio, utilizando a equação de conservação de massa.

#### 5.4 Poluição de um rio sob a ação de bactérias

Apresentaremos nesta seção, um modelo contínuo de poluição em rios, provenientes de esgoto de origem doméstica ou industrial. Para isso, faremos algumas hipóteses capazes de serem representadas matematicamente.

Consideramos que o comprimento de um rio é muito maior do que a sua largura, e que a sua correnteza tenha uma velocidade constante  $V$  na direção do eixo  $x$ .

Assim, podemos supor que a concentração de poluentes seja a mesma em uma dada seção transversal dele e, que ela só se modifica unidimensionalmente ao longo da correnteza.

Com estas hipóteses podemos elaborar um modelo unidimensional para a densidade de concentração  $\rho = \rho(x, t)$  da poluição num ponto  $x$  do rio no instante  $t$  baseado no processo de advecção, um mecanismo de transporte da poluição e, que os poluentes sofrem uma degradação devido à ação das bactérias.

A ação de bactérias presentes na água é um dos fatores que faz com que a concentração de poluentes decaia gradualmente com o tempo.

Supomos que a taxa de degradação da densidade do poluente seja uma função  $m = m(x, t)$  e que esta seja proporcional à densidade da poluição no instante  $t$  presente, isto é,

$$m(x, t) = -\mu\rho(x, t), \quad (5.10)$$

em que  $\mu$  é uma constante que mede a eficiência da ação das bactérias sobre a poluição.

Parece que uma tal hipótese é bastante plausível, pelo menos sob certas condições, uma vez que quanto maior a concentração da poluição, maior deve ser a ação das bactérias. Observamos que o sinal negativo em (5.10) indica o decaimento da concentração da poluição.

Aplicando o princípio de conservação de massa (5.8), para o rio cujo escoamento possui velocidade constante  $V$ , obtemos a equação diferencial parcial unidimensional que rege este fenômeno, como segue:

$$\rho_t(x, t) + V\rho_x(x, t) + \mu\rho(x, t) = 0 \quad (5.11)$$

em que

$$\rho_t(x, t) = \frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) \quad \text{e} \quad \rho_x(x, t) = \frac{\partial}{\partial x}\rho(x, t)$$

Na equação diferencial parcial de primeira ordem (5.11) não consideramos os processos difusivos em que aparecem derivadas parciais de segunda ordem, o que geraria uma equação diferencial parcial do tipo parabólico. Além disso, negligenciamos outros efeitos difusivos devido a ação da turbulência, dos desvios do rio, dos entulhos, etc.

Enquanto que, nas equações diferenciais ordinárias a função incógnita depende de apenas uma variável, nas equações diferenciais parciais a função incógnita depende de duas ou mais variáveis e a sua solução geralmente não é única.

Um modo de resolver uma equação diferencial parcial do tipo (5.11) é fazer-mos uma mudança de variáveis conveniente.

Escrevendo a função  $\rho(x, t)$  como sendo o produto de uma função  $u(x, t)$  por uma função exponencial decrescente de  $x$ ,

$$\rho(x, t) = u(x, t) e^{-\frac{\mu}{V}x},$$

transformamos a equação diferencial parcial (5.11) numa equação diferencial parcial análoga mais simples, em que não aparece o termo responsável pelo decaimento da ação das bactérias  $-\mu \rho(x, t)$ , obtendo:

$$\frac{\partial}{\partial t} [u(x, t) e^{-\frac{\mu}{V}x}] = -V \frac{\partial}{\partial x} [u(x, t) e^{-\frac{\mu}{V}x}] - \mu u(x, t) e^{-\frac{\mu}{V}x}.$$

Efetuada as derivações e cancelando o fator da exponencial que aparece em todas as parcelas de ambos os membros da equação anterior, obtemos a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = -V \frac{\partial}{\partial x} u(x, t). \quad (5.12)$$

Nesta última equação não aparece o termo relacionado com o efeito degradativo da poluição devido a ação das bactérias e, neste caso, é de se esperar que a distribuição dos poluentes seja trasladada ao longo do rio, sem o termo de decaimento no tempo.

Este fato nos leva a considerar uma nova variável de translação da variável  $x$  pela quantidade  $Vt$  dado por

$$s = x - Vt$$

em que  $V$  é a velocidade constante com que a água do rio se move.

Definimos assim, uma função  $g$  das variáveis  $s$  e  $t$ , dada por:

$$g(s, t) = u(s + Vt, t),$$

cujas derivadas são expressas como:

$$\frac{\partial}{\partial t} g(s, t) = \frac{\partial}{\partial x} (u(s + Vt, t)) V + \frac{\partial}{\partial t} u(s + Vt, t)$$

Pela equação (5.12), segue que  $\frac{\partial}{\partial t} g(s, t) = 0$ , o que implica que a função  $g$  independe de  $t$ . Portanto,  $g$  é uma função que depende apenas da variável  $s$ , ou seja,

$$g(s, t) = f(s)$$

para alguma função  $f$ .

Conhecendo-se uma condição inicial, podemos determinar a função arbitrária  $f$  fazendo

$$\rho(x, 0) = f(x)$$

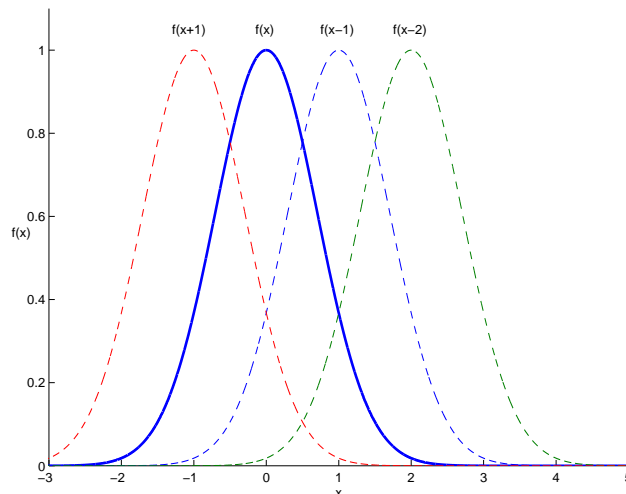
Agora, retornando à variável inicial  $x$ , obtemos

$$u(x, t) = f(x - Vt)$$

Esta solução é conhecida como onda viajante, justamente porque a distribuição de densidade original da poluição é propagada pela correnteza do rio como uma frente de onda que se desloca ao longo do rio sem modificações.

Uma animação para descrever o fenômeno da onda viajante pode ser feita, considerando o gráfico de uma função  $f(x - Vt)$ .

Considerando uma função como  $f(x) = e^{-x^2}$  para observar os gráficos de  $f(x - a)$ , para vários valores de  $a > 0$ , que são exatamente iguais ao gráfico de  $f(x)$  transladado  $a$  unidades para a direita, como na Figura 5.2 a seguir:



**Figura 5.2:** Função deslocada

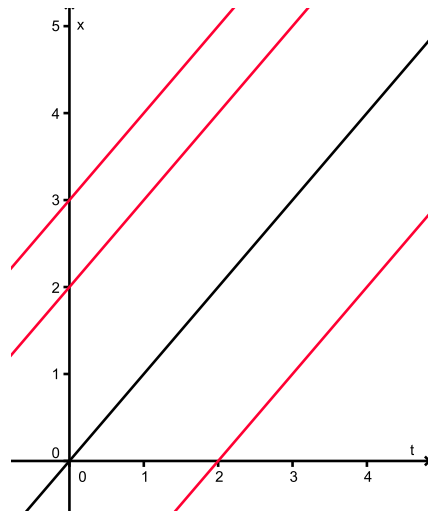
Este fenômeno também pode ser representado espacialmente considerando as variações nos eixos  $x$  e  $t$ .

O valor de  $f$  é constante para qualquer valor de  $x - Vt$ , ou seja, o valor de  $f$  é o mesmo para  $x$  e  $t$  pertencentes à reta  $x - Vt = s$ .

Fazendo  $s$  variar, obtemos uma família de **retas características** ao longo das quais a velocidade  $V$  é constante.

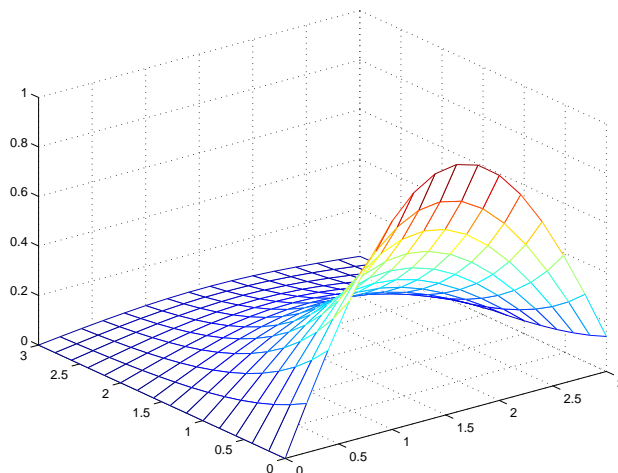
Conhecendo as retas características e o valor de  $u(x, t)$  no instante inicial  $t = 0$ , teremos uma solução explícita  $u(x, t)$ , para todo  $(x, t)$ , pois esta mantém

o mesmo valor ao longo das retas características  $s_i = x - V t$ ,  $i = 1, 2, \dots$  que emana do eixo  $x$ , no instante inicial, conforme a Figura 5.3.



**Figura 5.3:** Retas características

Para determinar o efeito da ação das bactérias em cada ponto  $x$  do rio e em cada instante  $t$ , consideramos o problema de valor inicial original constituído da equação diferencial parcial (5.11) e da condição inicial para  $\rho(x, 0) = \rho_0$  dada numa seção transversal do rio.



**Figura 5.4:** Onda viajante amortecida

A solução geral obtida é dada por:

$$\rho(x, t) = u(x, t) e^{-\frac{\mu}{V} x}, \quad \text{torna-se} \quad \rho(x, t) = \rho_0(x, t) e^{-\frac{\mu}{V} x}$$

representando uma onda viajante carregando poluentes, amortecida no tempo devido à ação degradadora das bactérias conforme a Figura 5.4.

## 5.5 Lei de balanço de momento linear

Foi com Euler que o balanço de momento linear ficou estabelecido para um corpo material em movimento quando submetido a uma força arbitrária. Depois de realizar várias experiências em hidráulica e com a corda vibrante, Euler concluiu que o princípio do momento linear se aplica a todo tipo de sistema mecânico, quer sejam discretos ou contínuos, generalizando a segunda Lei de Newton da mecânica clássica.

O momento linear de um corpo  $C$  numa região espacial  $R$  na configuração atual é dado por

$$\iiint_R \rho \mathbf{v} \, dx \, dy \, dz$$

produzido pelo conjunto das forças externas a região  $R$  atuando sobre  $C$  como as forças resistivas de campo (gravitacionais, eletromagnéticas, etc.) e forças resistivas (dos corpos distintos de  $C$  que atuam sobre  $C$ ).

Na equação de balanço geral (5.3), a quantidade  $Q$  é a velocidade  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{F}$  é o tensor de tensão  $\mathbf{T}$  definido sobre a fronteira  $\partial R$  da região  $R$ , que representa a força exercida sobre  $C$  pela parte que se encontra no exterior de  $R$ ,  $\mathbf{S}$  é a força de campo  $\rho \mathbf{b}$  que representa a ação do mundo externo sobre  $C$  e  $P = 0$ .

O princípio do momento linear nos mostra que a derivada temporal do momento linear do corpo  $C$  é igual a soma de todas as forças que atuam sobre ele, assim a equação de balanço de momento linear na forma diferencial da equação (5.6) fica

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} + \text{div}(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} - \mathbf{T}) - \rho \mathbf{b} = 0 \quad (5.13)$$

em que  $\otimes$  representa o produto tensorial (LAY et al, 1978)

A existência do tensor de tensão  $\mathbf{T}$  é frequentemente chamada de Teorema Fundamental de Cauchy (LIU, 2001).

É a equação de balanço de momento linear para o corpo  $C$  na região  $R$ , movendo com velocidade  $\mathbf{v}$  e com o tensor tensão total  $\mathbf{T} - \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}$  sobre a região  $R$  no instante  $t$ .

É com a equação de balanço de massa e de momento linear que se obtém o problema de Navier-Stokes para representar o escoamento de fluidos (LAY et al, 1978).

## 5.6 Lei de balanço de momento angular

Outra lei estabelecida por Euler foi a lei de balanço de momento angular que também é válida para a mecânica dos sistemas constituídos por mais de uma partícula.

O momento angular de  $C$  na região espacial  $R$  da configuração atual com relação a um ponto  $p = x - x_0$  é dado por

$$\iiint_R p \otimes \rho v \, dx \, dy \, dz,$$

em que  $p$  representa o vetor posição.

Levando em consideração todos os efeitos citados anteriormente temos que o princípio do momento angular ou momento de momento para o corpo  $C$  é dado por

$$\frac{d}{dt} \iiint_R p \otimes \rho v \, dx \, dy \, dz = \iint_{\partial R} p \otimes T \, dx \, dy + \iiint_R p \otimes \rho b \, dx \, dy \, dz \quad (5.14)$$

Com o auxílio de alguns cálculos auxiliares mostra-se que

$$\iint_{\partial R} p \otimes T \cdot n \, dx \, dy = \iiint_R p \otimes \operatorname{div}(T) + T^T \, dx \, dy \, dz \quad (5.15)$$

e usando a equação de balanço de momento linear e de conservação de massa obtemos para o corpo  $C$  que o balanço de momento de momento fica reduzido a

$$T = T^T$$

Esta última equação tensorial nos mostra que uma consequência do princípio de conservação do momento angular é que o tensor de tensão  $T$  é simétrico.

## 5.7 Lei de balanço de energia

O princípio da conservação da energia obtido da variação da energia cinética mais a energia potencial de um ponto de massa no campo gravitacional foi reconhecido por Gottfried Wilhelm Leibniz (1646 - 1716) por volta de 1693.

A energia cinética de um corpo  $C$  numa região espacial  $R$  definida por

$$\iiint_R \frac{1}{2} \rho v^2 \, dx \, dy \, dz \quad (5.16)$$

representa apenas uma parte da energia total.



O restante da energia total chamamos de energia interna do corpo C na região R, representada por

$$\iiint_R \rho \epsilon \, dx \, dy \, dz \quad (5.17)$$

O princípio de conservação de energia para o corpo C em R nos mostra que a derivada temporal da energia total é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \iiint_R \rho \left( \epsilon + \frac{1}{2} v^2 \right) dx dy dz &= \iint_{\partial R} (-q + v \cdot T) \cdot n \, dx dy + \\ &+ \iiint_R \rho (\gamma + v b) \, dx dy dz + \iiint_R g \, dx dy dz \end{aligned}$$

sendo:

$\epsilon + \frac{1}{2} v^2$  a quantidade de energia total de C;

$F = q + T^T v$  o fluxo de energia em que, q é o fluxo de calor (fluxo da concentração, etc.);

$T^T v$  é o fluxo de energia devido ao movimento de C;

$S = \rho \gamma + \rho v b$  é o suprimento de energia provinda do mundo externo em que  $\gamma$  é o suprimento de calor, da concentração de poluentes, etc.;

$\rho v b$  é a densidade do suprimento de energia devido ao movimento de C e

$P = g$  é o suprimento interno de energia para o corpo C na região R.

Na forma diferencial a equação de balanço de energia pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \left( \epsilon + \frac{1}{2} v^2 \right) + \text{div} \left( \rho \left( \epsilon + \frac{1}{2} v^2 \right) v + q - T^T v \right) - \rho \gamma + \rho b v = 0 \quad (5.18)$$

Obs. Uma equação de balanço de energia cinética pode ser obtida fazendo o produto escalar do momento linear com a velocidade  $v$  no instante  $t$ . Subtraindo a energia cinética da equação da energia total obtemos a equação da energia interna dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \epsilon + \text{div}(q) = \rho \gamma \quad (5.19)$$

As leis de balanço apresentadas podem contribuir na elaboração de muitos modelos matemáticos ambientais contínuos.

## 5.8 Modelos matriciais contínuos de população

Modelos de populações heterogêneas foram estudados inicialmente por Euler que considerou informações biológicas sobre as taxas de natalidade e mortalidade dependendo da distribuição da população dividida em faixas etárias.

Vejamos uma população cujas informações biológicas dependem da faixa etária, digamos que a primeira subpopulação  $p_1$  seja constituída de indivíduos com idade entre 0 e  $T_1$  anos, a segunda  $p_2$  entre  $T_1$  e  $T_2$  anos, ... e a  $j$ -ésima subpopulação  $p_j$  com idade entre  $T_{j-1}$  e  $T_j$ .

Descrevemos a subpopulação  $j$  por um número de indivíduos  $p_j(n)$  com idades no intervalo  $[T_{j-1}, T_j]$ ,  $j = 1, \dots, k$ . No caso discreto, obtemos uma representação da população por uma função vetorial

$$P(n) = [p_1(n), p_2(n), \dots, p_k(n)]^T$$

satisfazendo uma equação discreta ou de recursão vetorial matricial

$$P(n+1) = r P(n)$$

Do mesmo modo, no caso contínuo teremos para cada faixa etária a população  $p_j(t)$ , com idade no intervalo  $[T_{j-1}, T_j]$  para  $j = 1, 2, \dots, k$  e uma função vetorial contínua do tipo

$$P(t) = [p_1(t), p_2(t), \dots, p_k(t)]^T$$

satisfazendo o sistema de equações diferenciais ordinárias ou a equação diferencial vetorial matricial

$$\frac{d}{dt} P(t) = R P(t)$$

em que  $R$  é uma matriz que traduz matematicamente as hipóteses biológicas consideradas para cada faixa etária no intervalo  $[T_{j-1}, T_j]$ ,  $j = 1, 2, \dots, k$ .

Se o número de faixas etárias  $k$  de uma população se torna muito grande, a dimensão do modelo matemático tende a ser grande e difícil de ser tratado quando consideramos os indivíduos caracterizados praticamente pelas idades instantâneas de acordo com o tempo de vida.

Neste caso, é conveniente considerarmos uma função densidade de distribuição da população  $\rho(x)$  integrável, e representarmos o número de indivíduos numa região  $R$  do espaço por

$$\int_R \rho(x) dx$$

O número de indivíduos com idades entre  $T_1 > 0$  e  $T_2$  anos, com  $T_1 < T_2$  anos é dado por

$$\int_{T_1}^{T_2} \rho_t(x) dx$$

etc.

Assim, a evolução temporal de um sistema populacional de indivíduos deste tipo pode ser descrita por uma função de várias variáveis  $\rho = \rho(x, t)$ , que para cada instante  $t \geq 0$  determina o estado do sistema pela função  $p(t) = \rho_t(x)$  da variável  $x$ .

Análogamente a Lei de Malthus,  $\frac{d}{dt}p(t) = k p(t)$ , representamos genericamente a dinâmica deste sistema simbolicamente utilizando a função densidade

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \vartheta(\rho) \rho$$

em que  $\vartheta(\rho)$  representa um operador a ser aplicado na função  $\rho_t(x)$ , indicando o estado do sistema variando em cada instante  $t$ .

Este modelo é importante para descrever o estabelecimento da evolução temporal de populações, como no caso de sistemas tipo predador-presa, e em diversos fenômenos biológicos que ocorrem interações diretas entre indivíduos de subpopulações.

Observamos que uma medida que pode ser atribuída para cada indivíduo da população é a sua posição no espaço representando concretamente sua posição espacial. Como a taxa de reprodutibilidade pode ser considerada uma função  $r = r(t)$  do instante  $t$ , o espaço de aspecto da população pode ser descrito como um espaço físico da localização espacial dos seus indivíduos.

Além disso, várias características podem ser consideradas para determinar as posições espaciais dos indivíduos de uma população além das suas idades.

Utilizando um espaço tridimensional em que as duas primeiras medidas são as suas respectivas coordenadas espaciais numa região plana  $R = [x_1, x_2] \times [y_1, y_2]$  e a terceira medida a idade entre  $T_1$  e  $T_2$ , a função densidade de distribuição da população  $\rho = \rho(x, y, t)$  pode ser integrada

$$\int_{T_1}^{T_2} \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \rho \, dy \, dx \, dt$$

de modo a representar o número de indivíduos com idade na faixa etária  $[T_1, T_2]$  localizados geograficamente na região retangular  $R$ .

Os indivíduos de uma população também podem ser caracterizados por outras quantidades convertidas em outras variáveis do espaço considerado.

A função fonte ou suprimento  $F(x, y, t)$  também é bastante importante na modelagem e pode ser definida por uma integral no espaço de aspecto como uma função densidade

$$F(x, y, t) = \int \int \int_R f(x, y, t) \, dx \, dy \, dt$$

Uma vez conhecido o espaço de aspecto da população, a densidade  $\rho(x, y, t)$ , a densidade de fluxo da população  $\phi(x, y, t)$  e a fonte  $f(x, y, t)$  podemos escrever, de acordo com o princípio de conservação de massa, uma equação diferencial parcial de conservação levando em consideração a distribuição espacial da população

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y, z, t) = -\text{div}(\phi(x, y, z, t)) + f(x, y, z, t)$$

que rege toda a dinâmica do sistema populacional no espaço e no tempo.

No caso unidimensional ficamos com

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = -\text{div}(\phi(x, t)) + f(x, t)$$

A taxa de variação da quantidade de indivíduos na densidade volumétrica  $\rho$  de uma população é igual ao fluxo  $\phi$  da densidade superficial na região de controle no instante  $t$  mais a fonte  $f$  de geração da população, em que indivíduos podem ser inseridos ou excluídos no domínio considerado.

## 5.9 Equação da difusão a partir da equação da energia

A equação da difusão numa região tridimensional pode ser obtida usando a lei de balanço de massa ou de energia interna para um meio contínuo. De acordo com a equação (5.18) escrita na forma diferencial torna-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \varepsilon(t) + \text{div}(\rho \varepsilon v) - \rho \gamma = 0$$

em que:

$\rho \varepsilon$ : representa a densidade de energia por unidade de volume do corpo  $C$ ;

$q(c)$ : o fluxo de energia sobre a superfície  $S$  da região  $V$  considerada como função da quantidade considerada, por exemplo, da concentração  $c$  de poluentes no caso do estudo da poluição ou da temperatura no caso do estudo da difusão do calor, limitada pelo volume  $V$ ;

$n$ : é o vetor normal unitário à  $S$  apontada para seu exterior;

$\gamma$ : é a função que descreve a fonte ou consumo de energia em  $V$ .

Esta lei de balanço nos garante que a taxa de variação de energia de um corpo  $C$  ocupando uma região de volume  $V$  é devida ao fluxo de energia através da superfície  $S$  que limita a região, mais o suprimento de energia nesta mesma região.

Assumindo que os termos da equação anterior são todos suaves e limitados na região limitada por  $V$ , temos em cada ponto do espaço tridimensional, o balanço da energia interna dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \varepsilon(c) + \operatorname{div}(q(c)) = 0$$

que é obtido da equação de energia retirando os termos que envolvem a velocidade.

No caso do estudo da concentração de poluentes, consideramos a energia como uma função da concentração de poluentes numa região, ou seja,

$$e = e(c).$$

A concentração por sua vez é uma função do espaço  $x$  e do tempo  $t$ , isto é,  $c = c(x, t)$ , donde segue pela Regra da Cadêia que

$$\frac{\partial}{\partial t} \varepsilon(c) = \frac{\partial}{\partial c} \varepsilon(c(t)) \frac{\partial}{\partial t} c(t),$$

em que chamamos

$$\frac{\partial}{\partial t} \varepsilon(c(x, t)) = \alpha^2$$

a difusividade do meio, um termo que correspondente ao calor específico do material na condução de calor.

Na equação constitutiva para o fluxo de poluentes consideramos a lei de Nernst, análoga a lei de Fourier da condução de calor, em que o fluxo das partículas poluentes é proporcional ao gradiente de concentração, e escrevemos:

$$q = -\alpha^2(x) \frac{\partial}{\partial x} c(x, t)$$

em que,  $\alpha^2(x)$  é o coeficiente de difusividade em um ponto  $x$ .

Esta lei nos indica que o fluxo das partículas é proporcional a concentração delas num ponto, e flui da região de maior concentração de poluentes para a região com menor concentração e, assim, a equação diferencial parcial de poluentes torna-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left( -\alpha^2(x) \frac{\partial}{\partial x} c(x, t) \right) + \gamma(x, t)$$

que é a conhecida como equação local da difusão da concentração da poluição num ponto  $x$  no instante  $t$ , com difusividade  $\alpha^2(x)$ .

Se não ocorrer o aparecimento de fontes externas ou sumidouro de poluentes,  $\gamma = 0$ , e  $\alpha$  for uma constante real, temos a equação da difusão homogênea,

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = -\alpha^2 \Delta c(x, t),$$

em que

$$\Delta c(x, y, z, t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x, y, z, t) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} c(x, y, z, t) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} c(x, y, z, t)$$

é o laplaciano da concentração  $c = c(x, y, z, t)$  no caso tridimensional.

A equação da difusão de poluentes tridimensional é uma equação diferencial parcial do tipo parabólica e pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, y, z, t) = -\alpha^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x, y, z, t) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} c(x, y, z, t) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} c(x, y, z, t) \right).$$

Observe que o laplaciano de uma função de várias variáveis  $\Delta c$  é igual ao divergente do gradiente de  $c$  denotado por  $\text{div}(\text{grad } c)$  ou  $\nabla^2 c$ .

Em uma dimensão,  $\frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2}$  é o laplaciano de  $c(x, t)$  e a equação da difusão para  $c(x, t)$  torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = -\alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x, t).$$

## 5.10 Equação da difusão de poluentes

Na seção 5.4 vimos um processo de advecção de poluentes, vamos considerar agora um problema da difusão de poluentes unidimensional regido pela equação diferencial parcial

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \quad (5.20)$$

em que  $c(x, t)$  é uma função da variável espacial real  $x$  e da variável temporal  $t > 0$  representando a quantidade de poluentes num certo ponto  $x$  no instante  $t$  e  $\alpha \in \mathbb{R}$ , o coeficiente de difusibilidade.

O problema de valor inicial constituído da equação da difusão para uma quantidade  $c(x, t)$  dada pela equação (5.20) com a condição inicial  $c(x, 0) = f(x)$ , em que,  $c(x, t)$  é uma função desconhecida das variáveis  $(x, t)$ , com  $x \in \mathbb{R}$  e  $t > 0$ , possui uma única solução do tipo

$$c(x, t) = \frac{1}{2\alpha\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-y)^2}{4\alpha^2 t}} f(y) dy$$

Sabemos que toda equação diferencial pode ter infinitas soluções. Para ela ter uma única solução, é necessário impor algumas condições iniciais e/ou de fronteira e certas condições de regularidade sobre os termos da equação.

Considerando a equação diferencial parcial da difusão (5.20) em que  $c(x, t)$  é uma função das variáveis  $(x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty)$  e  $\alpha$  é uma constante real, podemos observar algumas propriedades importantes das soluções da equação da difusão:

1. Como no caso das soluções das equações diferenciais ordinárias homogêneas, qualquer combinação linear de soluções da equação diferencial parcial linear homogênea (5.20) também é uma solução de (5.20). Neste sentido, gostaríamos de encontrar uma solução particular de (5.20) de modo que a partir dela todas as outras soluções poderiam ser geradas.
2. Outra propriedade da solução da equação da difusão (5.20) é baseada no fato de que uma solução da equação da difusão homogênea (5.20) é invariante com relação a uma transformação  $T : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $(x, t) \rightarrow (\lambda x, \lambda^2 t)$ , para todo  $\lambda \in \mathbb{R}$ .

De fato, se  $c(x, t)$  é uma solução de (5.20) então  $c(\lambda x, \lambda^2 t)$  também é uma solução de (5.20).

Investigamos uma solução com esta característica considerando uma função  $\phi(\eta)$  invariante pela transformação  $T$  e de classe  $\mathcal{C}^2$ , ou seja,  $\phi$  é duas vezes continuamente diferenciável, em que a variável  $\eta = \frac{x}{\sqrt{t}}$ , como uma solução da (5.20).

A função

$$c(x, t) = \phi\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right) \quad (5.21)$$

satisfaz a equação diferencial (5.20) e é chamada de autossemelhante.

De fato, substituindo (5.21) na equação da difusão (5.20),  $c_t = \alpha^2 c_{xx}$  e, usando a Regra da Cadeia (THOMAS et al, 2001), obtemos:

$$\phi'\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right)\left(-\frac{x}{2t\sqrt{t}}\right) - \frac{\alpha^2}{2\sqrt{t}}\phi''\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right) = 0$$

Deste modo,  $\phi(\eta)$  deve satisfazer a seguinte equação diferencial ordinária de segunda ordem:

$$\phi''(\eta) + \frac{\eta}{2\alpha^2}\phi'(\eta) = 0$$

que tem como solução geral expressa pela função erro

$$\phi(\eta) = k_1 \int_0^\eta e^{-\frac{z^2}{4\alpha^2}} dz + k_2$$

em que  $k_1$  e  $k_2$  são constantes de integração.

Concluimos então, que

$$c(x, t) = k_1 \int_0^{\frac{x}{\sqrt{t}}} e^{-\frac{z^2}{4\alpha^2}} dz + k_2 \quad (5.22)$$

é uma solução de (5.20).

Se ambas as constantes  $k_1$  e  $k_2$  forem nulas, a solução é trivial e não nos interessa, pois só poderia satisfazer o problema com a condição inicial nula.

O fato de as famílias de funções (5.22) escritas como soluções autosseme-lhantes de (5.20) não possuírem integrais analíticas para quaisquer constan-tes  $k_1$  e  $k_2$  de integração

$$\int_{-\infty}^{\infty} c(x-y, t) f(y) dy$$

também é uma solução de (5.20).

3. Como as derivadas de  $c(x, t)$  com relação a variável espacial  $x$ , ou com relação a variável tempo  $t$  também são soluções de (5.20), podemos usar o fato de que a derivada de  $c$  com relação a  $x$  também é solução de (5.20).

Assim, consideramos soluções de (5.20) da forma

$$\frac{c_1}{\sqrt{t}} e^{-\frac{x^2}{4\alpha^2 t}}$$

com  $c_1 \in \mathbb{R}$  que são derivadas de (5.22).

De fato, a função

$$w(x, t) = \frac{1}{2\alpha\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{x^2}{4\alpha^2 t}}$$

com  $(x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty)$  é uma solução fundamental da equação da di-fusão, em que, na escolha da função  $w(x, t)$  utilizamos uma constante de normalização  $\frac{1}{2\alpha\sqrt{\pi t}}$  de modo que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x, t) dx = 1$$

para todo  $t > 0$ .

Utilizando o fato de que  $c(x-y, t)$  é uma solução de (5.10.1) para todo  $y \in \mathbb{R}$ , estabelecemos um resultado que regulariza a solução da equação da difusão.

**Fato:** Dada uma função  $f \in C(\mathbb{R})$  limitada e considerando

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} w(x-y, t) f(y) dy$$

valem as seguintes propriedades:

- a)  $c(x, t)$  é de classe  $C^\infty$  para  $x \in \mathbb{R}$  e  $t > 0$ ;
- b)  $c(x, t)$  satisfaz a equação da difusão  $c_t = \alpha^2 c_{xx}$  para  $x \in \mathbb{R}$ ,  $t > 0$  e  $\lim_{t \rightarrow 0} c(x, t) = f(x)$ .



Assim, o problema de valor inicial constituído da equação

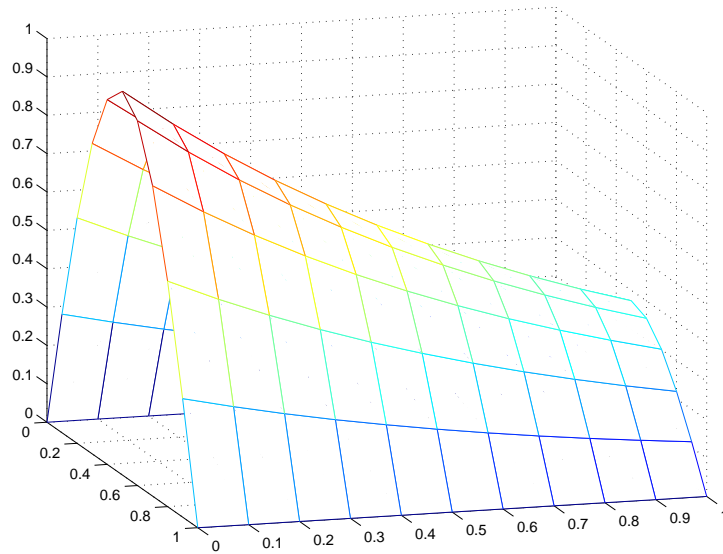
$$c_t - \alpha^2 c_{xx} = 0, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

com a condição inicial

$$c(x, 0) = f(x)$$

em que  $c(x, t)$  é uma função das variáveis  $(x, t)$ , com  $x \in \mathbb{R}$  e  $t > 0$ , possui uma única solução do tipo

$$c(x, t) = \frac{1}{2\alpha\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-y)^2}{4\alpha^2 t}} f(y) dy$$



**Figura 5.5:** Solução  $u(x, t)$  da equação da difusão

Observamos que o gráfico de uma tal solução da equação da difusão unidimensional pode ser visto na Figura 5.5, e que a função  $w(x - y, t)$  é positiva e sua integral desde  $-\infty$  a  $\infty$  é igual a 1 e, além disso,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} w(x - y, t) = \begin{cases} -\infty, & x = y \\ 0, & x \neq y. \end{cases}$$

### 5.11 Classificação das equações diferenciais parciais

Em geral, uma equação diferencial parcial linear de segunda ordem com duas variáveis independentes  $x$  e  $y$  tem uma forma geral do tipo

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = G(x, y), \quad (5.23)$$

em que  $A, B, C, D, E$  e  $F$  são os coeficientes, aqui considerados constantes, a função incógnita  $u = u(x, y)$  e suas derivadas parciais dependem de  $x$  e  $y$ :

$$u_{xx} = \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2}, \quad u_{xy} = \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y}, \quad u_{yy} = \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2},$$

$$u_x = \frac{\partial u(x, y)}{\partial x}, \quad u_y = \frac{\partial u(x, y)}{\partial y}$$

Em particular, se a função  $G(x, y) = 0$  para todos os valores de  $x$  e  $y$ , dizemos que a equação diferencial parcial acima é homogênea.

Se os coeficientes  $A, B$  e  $C$  forem nulos a equação diferencial parcial fica reduzida a uma equação diferencial parcial de primeira ordem, pois a ordem da mais alta derivada que aparece na equação é igual a um (SALVADOR, 2002b).

A equação  $\rho_t(x, t) + V\rho_x(x, t) + \mu \rho(x, t) = 0$  abordada na seção 5.4 é uma equação diferencial parcial de primeira ordem.

A possibilidade de reduzir uma equação diferencial parcial de segunda ordem na forma canônica, em um ponto de seu domínio, através de uma transformação de coordenadas cujo Jacobiano seja não nulo, leva-nos a classificá-las em parabólicas, hiperbólicas e elíticas, da mesma forma que classificamos as cônicas em Geometria Analítica.

Para isso, consideramos uma transformação geral de coordenadas dada por:

$$\xi = \xi(x, y), \quad \eta = \eta(x, y)$$

sendo  $\xi$  e  $\eta$  funções de  $x$  e  $y$ , pelo menos duas vezes diferenciáveis em que o determinante do Jacobiano  $J$  dessa transformação,

$$J = \det \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x,$$

é não nulo no domínio considerado, de modo que  $x$  e  $y$  possam ser obtidos unicamente das equações para  $\xi$  e  $\eta$  utilizando a regra da cadeia e anulando as expressões quadráticas do tipo

$$A\xi_x^2 + B\xi_x\xi_y + C\xi_y^2 = 0$$

$$A\eta_x^2 + B\eta_x\eta_y + C\eta_y^2 = 0$$

que aparecem e, dividindo a primeira delas por  $\xi_y^2$ , obtemos uma equação diferencial ordinária (edo) do tipo:

$$A \frac{\xi_x^2}{\xi_y^2} + B \frac{\xi_x \xi_y}{\xi_y^2} + C = 0 \quad (5.24)$$

que ao longo da curva  $\xi = \text{constante}$ , nos dá

$$d\xi = \xi_x dx + \xi_y dy = 0$$

Assim,

$$\frac{\xi_x}{\xi_y} = -\frac{dy}{dx}$$

e escrevemos a equação (5.24) como

$$A\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 - B\frac{dy}{dx} + C = 0$$

Com isso, a classificação de uma equação diferencial parcial como (5.23) depende somente dos seus coeficientes  $A$ ,  $B$  e  $C$  no ponto  $P = P(x, y)$  e a forma canônica pode ser obtida supondo que as funções  $A$ ,  $B$  e  $C$  sejam não nulas.

As soluções da equação algébrica anterior em  $\frac{dy}{dx}$  são as equações características:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{2} \frac{B + \sqrt{B^2 - 4AC}}{A}, \quad \frac{dy}{dx} = \frac{1}{2} \frac{B - \sqrt{B^2 - 4AC}}{A} \quad (5.25)$$

e as suas respectivas integrais são chamadas de curvas características.

Com as duas famílias de curvas características dependendo dos seus coeficientes  $A$ ,  $B$  e  $C$  considerados constantes, classificamos as edp de acordo com o discriminante  $\Delta$  da equação (5.23)

$$\Delta = B^2 - 4AC$$

1. **Parabólicas:** quando  $B^2 - 4AC = 0$ , como nos modelos de processos difusivos:

$c_t - \alpha^2 c_{xx} = 0$ , em que  $\alpha$  é uma constante real e  $c(x, t)$  é a concentração de poluentes numa região unidimensional;

$u_t = \alpha^2(u_{xx} + u_{yy})$ , equação da difusão ou da condução do calor bidimensional, em que  $u = u(x, y, t)$  é uma função de três variáveis e  $\alpha \in \mathbb{R}$ , é uma equação diferencial parcial linear de segunda ordem, homogênea e com coeficientes constantes.

2. **Hiperbólicas:** quando  $B^2 - 4AC > 0$ , como nos sistemas vibratórios.

$u_{xx} - u_{tt} = 0$ , em que  $u = u(x, t)$  representa o deslocamento vertical de uma corda esticada;

$u_{tt} = c^2(u_{xx} + u_{yy})$ , equação da propagação da onda bidimensional.

3. **Elíticas:** quando  $B^2 - 4AC < 0$ , como nos modelos de problemas estacionários:

$u_{xx} + u_{yy} = 0$ , equação de Laplace ou do potencial bidimensional;

$u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} = 0$  tridimensional;

$u_{xx} + u_{yy} = f(x, y)$ , equação de Poisson bidimensional em que  $f(x, y)$  é uma função de duas variáveis.

Uma solução de uma equação diferencial parcial em uma região  $R$  do espaço das variáveis independentes é uma função que possui todas as derivadas parciais que aparecem na equação, satisfazendo-a em todos os pontos da região  $R$ .

Geralmente, num modelo matemático ambiental em que aparece a função incógnita  $u = u(x, y)$  dependendo só das variáveis espaciais elas devem satisfazer uma equação diferencial parcial numa região com possíveis condições de contorno ou fronteira que devem ser especificadas.

As condições de fronteira para uma função  $u = u(x, y, t)$  em geral são da forma:

$$\alpha u_x(0, y, t) + \beta u(0, y, t) = f(y, t) \quad \text{e/ou} \quad \gamma u_x(L, y, t) + \delta u(L, y, t) = g(y, t), \dots$$

em que  $\alpha, \beta, \gamma$  e  $\delta$  são constantes e  $x = 0$  e  $x = L$  são as fronteiras da variável independente  $x$

Se numa equação diferencial parcial aparece uma função incógnita  $u(x, y, t)$  que também depende da variável tempo  $t$ , certamente aparece as condições iniciais do problema. As condições iniciais são consideradas geralmente conhecendo-se a função incógnita em  $t = 0$ , dada por uma função do tipo

$$u(x, y, 0) = f(x, y)$$

para  $x$  e  $y$  no domínio da função  $u$ .

As derivadas parciais que aparecem nas equações diferenciais representam algo do mundo natural como concentrações, variações, velocidade, aceleração, força, atrito, fluxo, corrente etc. Elas são obtidas das leis naturais dos fenômenos físicos relacionando as funções desconhecidas com suas derivadas temporais e espaciais e com suas generalizações são as mais estudadas.

Às vezes, a geometria da região é curva de modo que é conveniente fazer uma mudança de variáveis utilizando a transformação polar:

$$x = r \cos(\theta) \quad \text{e} \quad y = r \sin(\theta)$$

para  $r > 0$  e  $0 < \theta < 2\pi$ , cujo determinante do Jacobiano dessa transformação é  $J = r$ .

A equação do potencial bidimensional  $u_{xx} + u_{yy} = 0$  em coordenadas polares torna-se:

$$u_{rr} + \frac{1}{r}u_{r\theta} + \frac{1}{r^2}u_{\theta\theta} = 0$$

para  $u = u(r, \theta)$  com  $r > 0$  e  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ .

Uma equação diferencial parcial mais simples é

$$\frac{\partial}{\partial x}u(x, y) = 0$$

expressando que a taxa de variação da função desconhecida  $u(x, y)$  com relação a variável  $x$  é nula e tem como solução obtida por integração membro a membro da equação com relação a  $x$ . Mantendo a variável  $y$  constante obtemos uma função arbitrária de apenas uma variável  $y$ , que escrevemos  $f(x, y) = F(y)$ , pois sua variação em relação à variável  $x$  é nula.

A equação diferencial parcial  $xu_x - yu_y = 0$  tem como solução a função  $u(x, y) = f(x^2 + y^2)$  em que,  $f$  é uma função arbitrária de  $x^2 + y^2$ .

Substituindo as coordenadas cartesianas  $(x, y)$  por coordenadas polares

$$x = r \cos(\theta) \quad y = r \sin(\theta)$$

na equação  $xu_x - yu_y = 0$ , podemos escrevê-la de um modo mais simples como  $u_\theta = 0$ . E assim, a solução depende apenas da componente radial  $r$ , em que  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ .

Verifique que uma animação do gráfico das soluções desta equação mostra que elas são superfícies de revolução.

Muitas equações diferenciais parciais, como as da seção 5.4 descrevendo a poluição num rio, podem ser resolvidas fazendo uma mudança de variáveis conveniente.

## 5.12 Problema de difusão unidimensional

O processo de difusão de poluentes é um dos problemas ambientais mais importantes de ser investigado.

Seja  $u(x, t)$  a concentração de um poluente numa região limitada. O problema de valores inicial e de contorno (PVIC) é dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = \alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (5.26)$$

$$u(x, 0) = f(x), \quad e \quad 0 < x < 1,$$

em que  $u(x, 0)$  é uma condição inicial, a distribuição inicial da concentração dada pela função  $f(x)$  e

$$u(0, t) = 0 \quad u(1, t) = 0 \quad (5.27)$$

são as condições de contorno, os valores da concentração da poluição  $u$  nas extremidades da região mantidas nulas.

Observe que o problema consiste em verificar a distribuição da concentração de poluentes  $u(x, t)$  numa região de comprimento unitário com concentração inicial  $f(x)$ , em cada instante de tempo mantendo as extremidades isentas de poluição, devido por exemplo, a algum processo de filtragem.

Reescrevendo a equação diferencial parcial (5.1) como

$$u_t - \alpha^2 u_{xx} = 0$$

e aplicando o método de separação de variáveis para encontrar a solução, proposto por Fourier, supondo que a função  $u = u(x, t)$  pode ser decomposta num produto de uma função  $X$  de  $x$  por uma função  $T$  de  $t$ , ou seja,

$$u(x, t) = X(x) T(t).$$

Assim, as derivadas parciais de  $u$  tornam-se

$$u_t = X(x) T'(t), \quad u_{xx} = X''(x) T(t)$$

que substituídos na equação da difusão (5.26), nos dá

$$X(x) T'(t) - \alpha^2 X''(x) T(t) = 0.$$

Dividindo a equação anterior por  $\alpha^2 X(x) T(t)$ , obtemos

$$\frac{T'(t)}{\alpha^2 T(t)} - \frac{X''(x)}{X(x)} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{T'(t)}{\alpha^2 T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)}.$$

Observamos que a primeira parte da equação anterior com as variáveis separadas só depende da variável  $t$  enquanto que a segunda parte só depende da variável  $x$ , concluímos então que ambos os lados devem se manter constantes.

Assim, igualamos o lado direito da equação anterior com uma constante  $\lambda$  e o lado esquerdo dela com a mesma constante  $\lambda$ , reduzindo o problema a duas equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{T'(t)}{\alpha^2 T(t)} = \lambda, \quad (5.28)$$

$$\frac{X''(x)}{X(x)} = \lambda. \quad (5.29)$$

As condições de fronteira (5.27) do problema, se tornam

$$u(0, t) = 0, \quad u(1, t) = 0$$

para  $t > 0$  e portanto,

$$X(0) = 0, \quad X(1) = 0 \quad (5.30)$$

como condições de contorno para o problema de valores de contorno da equação diferencial ordinária para a variável  $x$ .

De fato, as possíveis soluções do problema de valor de contorno

$$\frac{X''(x)}{X(x)} = \lambda, \quad X(0) = 0, \quad X(1) = 0 \quad (5.31)$$

depende dos valores atribuídos a constante  $\lambda$  que pode ser: nula, positiva ou negativa.

- $\lambda = 0$

Observamos que se  $\lambda = 0$ , a solução da equação diferencial ordinária  $X''(x) = 0$  é uma função afim da forma  $X(x) = c_1 + c_2 x$ . Os únicos valores dos coeficientes  $c_1$  e  $c_2$  de modo a satisfazer as condições de contorno devem ser zero, portanto, a solução seria a trivial,  $X(x) = 0$ , que não nos interessa, pois  $u(x, t)$  também seria identicamente nula.

- $\lambda > 0$

No caso em que  $\lambda > 0$  fazemos  $\lambda = \sigma^2$  para facilitar os cálculos e obtemos a equação diferencial

$$X''(x) - \sigma^2 X(x) = 0$$

cujas raízes da equação característica

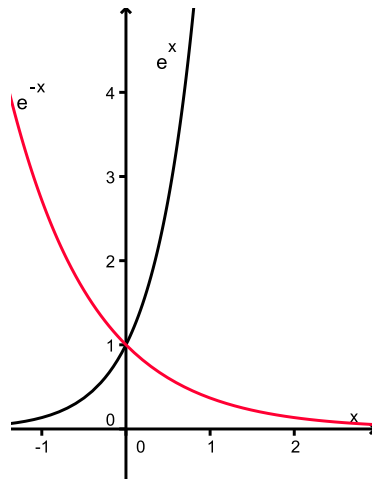
$$r^2 - \sigma^2 = 0$$

associada a ela, obtida ao substituirmos  $X(x) = e^{rx}$ , são  $r = \sigma$  e  $r = -\sigma$ . Portanto, a solução da equação diferencial é uma combinação de funções exponenciais do tipo

$$X(x) = k_1 e^{\sigma x} + k_2 e^{-\sigma x}$$

Para satisfazer as condições de contorno, também deveríamos ter os coeficientes constantes  $k_1 = 0$  e  $k_2 = 0$ , e portanto, a solução seria a trivial,  $X(x) = 0$ , que também não nos interessa.

Observamos que o gráfico de exponenciais na Figura 5.6 a seguir mostra que as funções exponenciais nunca se anulam e a diferença delas só é nula no ponto  $x = 0$ .



**Figura 5.6:** Funções exponenciais crescente e decrescente

- $\lambda < 0$

Finalmente consideramos a constante de separação das variáveis  $\lambda < 0$  e, para facilitar os cálculos, escolhemos  $\lambda = -\sigma^2$ .

Resolvendo a equação diferencial ordinária

$$X''(x) + \sigma^2 X(x) = 0,$$

cujas raízes da equação característica associada

$$r^2 + \sigma^2 = 0$$

são complexas conjugadas  $r = \sigma I$  e  $r = -\sigma I$ , em que  $I = \sqrt{-1}$  é a unidade imaginária, obtemos a solução

$$X(x) = C_1 \sin(\sigma x) + C_2 \cos(\sigma x).$$

Utilizando a primeira condição no ponto  $x = 0$ , isto é,  $X(0) = 0$ , teremos a constante de integração  $C_2 = 0$ . Discutimos então, a possibilidade da solução ser do tipo

$$X(x) = C_1 \sin(\sigma x)$$

em que, para  $x = 1$ , a condição de contorno  $X(1) = 0$  implica também que  $C_1 = 0$  ou  $\sin(\sigma) = 0$ .



A primeira destas implicações deve ser descartada tendo em vista que obteríamos só a solução nula. Observamos que a segunda possibilidade pode ser válida para valores de  $\sigma \neq 0$ . De fato,

$$\sin(\sigma) = 0 \Rightarrow \sigma = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Deste modo, a solução encontrada para os valores de  $\sigma$  é uma família de múltiplos de  $\pi$ , a saber:  $\pi, 2\pi, 3\pi, \dots$ , portanto, obtemos um conjunto de autovalores positivos  $\lambda$  do problema de valores de contorno do tipo

$$\lambda = -(n\pi)^2, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (5.32)$$

Portanto, as autofunções correspondentes do problema são do tipo

$$X_n = C_n \sin(n\pi x) \quad (5.33)$$

para  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,

Voltando a analisar o lado esquerdo da equação diferencial (5.28) de primeira ordem na variável  $t$  e utilizando os autovalores  $\lambda = -(n\pi)^2$  obtido em (5.32) obtemos:

$$T'(t) = \alpha^2 n^2 \pi^2 T(t) \quad (5.34)$$

cuja solução é

$$T(t) = C_n e^{-\alpha^2 n^2 \pi^2 t} \quad (5.35)$$

As soluções obtidas para cada valor de  $n$  são funções de  $t$ , portanto, para  $n = 1, 2, 3, \dots$  o produto

$$u_n(x, t) = C_n \sin(n\pi x) e^{-\alpha^2 n^2 \pi^2 t} \quad (5.36)$$

é uma solução geral do problema inicial.

Todas as funções  $u_n$  da família (5.36) encontradas anteriormente, para os valores de  $n = 1, 2, 3, \dots$  são soluções da equação diferencial parcial satisfazendo as condições de contorno. Ainda falta satisfazer  $u(x, 0) = f(x)$ , que é a condição inicial.

Como a equação diferencial parcial homogênea é linear, a solução procurada  $u(x, t)$  pode ser escrita como uma superposição de todas as soluções encontradas que também satisfaz as condições de contorno. Assim,

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin(n\pi x) e^{-\alpha^2 n^2 \pi^2 t}, \quad (5.37)$$

em que os coeficientes  $C_n$  precisam ser determinados.

Utilizando, finalmente a condição inicial correspondente a  $t = 0$  devemos ter

$$u(x, 0) = f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin(n\pi x)$$

concluindo que os valores de  $C_n$ ,  $n = 1, 2, \dots$  devem ser os coeficientes da expansão da condição inicial  $f(x)$  numa série trigonométrica de senos, o que nos leva ao estudo das séries de Fourier (BOYCE & DIPRIMA, 1999).

Quando temos uma função  $f(x)$  definida num intervalo  $[-L, L]$ ,  $L > 0$  e fora dele pela condição de periodicidade  $f(x + 2L) = f(x)$ , ou seja, admitindo que  $f$  seja uma função periódica de período  $2L$ , dizemos que o desenvolvimento de  $f(x)$  numa série de Fourier é dado por

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( a_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right),$$

em que, os coeficientes de Fourier  $a_n$  e  $b_n$  para a expansão da  $f(x)$  são determinados por:

$$a_0 = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) dx,$$

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

e

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx, \quad (5.38)$$

para  $n = 1, 2, 3, \dots$  em que se utiliza o fato das funções trigonométricas  $\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$  e  $\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$  serem ortogonais em  $[-L, L]$ .

Se  $f(x)$  é definida e continua exceto possivelmente em um número finito de pontos no intervalo  $[-L, L]$ ,  $f(x)$  e sua derivada  $f'(x)$  são seccionalmente contínuas em  $[-L, L]$  então, a série de Fourier de  $f(x)$  converge para  $f(x)$  nos pontos onde ela é contínua e, para o ponto médio do salto de  $f(x)$  nos pontos de descontinuidade (BOYCE & DIPRIMA, 1999).

Se a condição inicial  $f(x) = 50$ , devemos ter

$$\sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin(n\pi x) = 50$$

e  $C_n$ ,  $n = 1, 2, \dots$  são os coeficientes de Fourier de uma série de senos da função constante  $f(x) = 50$ ;

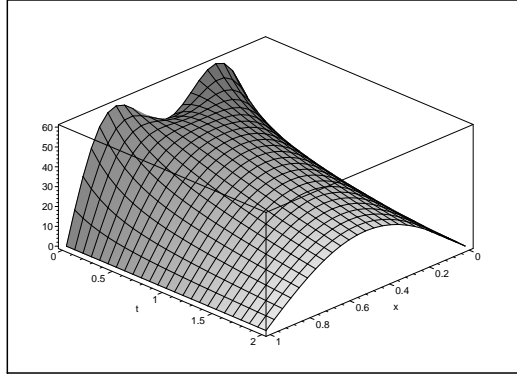
$$C_n = 2 \int_0^1 50 \sin(n\pi x) dx = -\frac{100((-1)^n - 1)}{n\pi}$$

para  $n = 1, 2, \dots$

Portanto, a solução do problema de valor inicial e de condições de contorno é dada por:

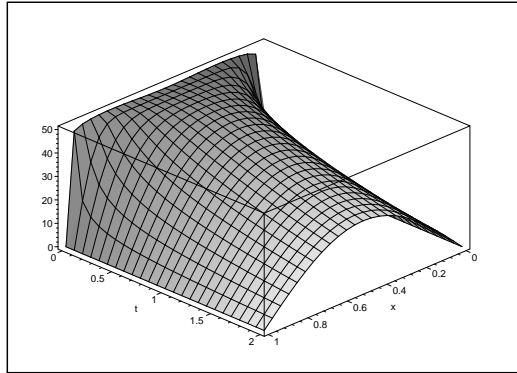
$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} 100 \left( \frac{1}{n\pi} - \frac{(-1)^n}{n\pi} \right) e^{-\alpha^2 n^2 \pi^2 t} \sin(n\pi x) \quad (5.39)$$

Considerando os 4 primeiros termos da série e o coeficiente de difusão  $\alpha = 0.2$  obtemos o seguinte gráfico da solução aproximada (5.39):



**Figura 5.7:** Aproximação da solução  $u(x, t)$  com 4 termos

E considerando agora os 100 primeiros termos da série e o coeficiente de difusão  $\alpha = 0.2$  obtemos uma função mais suave, como mostra a Figura 5.8 a seguir



**Figura 5.8:** Aproximação da solução  $u(x, t)$  com 100 termos

#### Exemplo 5.1 A solução do problema de difusão

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = 0.15^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0$$

de valor inicial (a distribuição inicial da concentração)

$$u(x, 0) = 3 \sin(2\pi x), \quad 0 < x < 1$$

e condições de fronteira,

$$u(0, t) = 0, \quad u(1, t) = 0 \quad t > 0$$

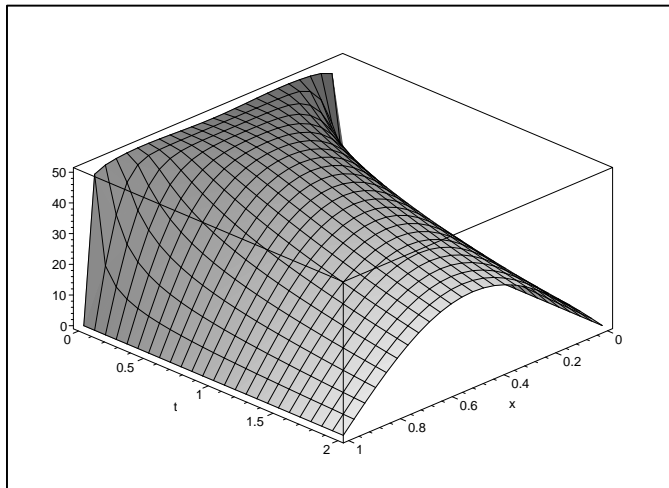
é igual a

$$u(x, t) = 3 e^{-4\pi^2 0.15^2 t} \sin(2\pi x).$$

Utilizando um software computacional verifique que o gráfico da solução anterior

$$u(x, t) = 3 e^{-4\pi^2 0.15^2 t} \sin(2\pi x)$$

pode ser mostrado como na Figura 5.9.



**Figura 5.9:** Solução  $u(x, t)$

### 5.13 Adimensionalização de edp

Nesta seção vamos apresentar como um problema de valores iniciais e condições de fronteira ou mesmo outros tipos de modelos físicos podem ser adimensionalizados, já que na maioria das vezes eles não aparecem na forma adimensionalizada.

A ideia básica da adimensionalização é substituir as variáveis originais do problema dado por novas variáveis adimensionais (sem unidades). Desse modo, vários problemas são convertidos numa forma adimensional básica e passa a ser tratado matematicamente da mesma forma.

Modelos matemáticos ambientais, físicos, químicos, econômicos, biológicos, ambientais e de outras áreas que aparentemente parecem diferentes tornam-se matematicamente semelhantes quando adimensionalizados.

A análise dimensional de um problema é muito importante na análise numérica de um modelo matemático, uma vez que a maioria dos programas computacionais é escrita numa forma geral que pode ser utilizada para resolução de problemas distintos que possuem a mesma formulação adimensional.

Geralmente transformamos o problema numa forma aceitável pelo programa, resolvemos numericamente e então transformamos os resultados numéricos de volta para as próprias variáveis ou coordenadas iniciais.

O problema de difusão unidirecional de uma certa quantidade  $u(x, t)$  de poluentes numa região  $R$ , num local espacial  $x$  e no instante  $t$  dado por:

$$c_t = \alpha^2 u_{xx}, \quad 0 < x < L, \quad t > 0$$

$$c(0, t) = C_1, \quad t > 0$$

$$c(L, t) = C_2, \quad t > 0$$

$$c(x, 0) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), \quad 0 < x < L$$

com  $\alpha \in \mathbb{R}$ ,  $L \in \mathbb{R}$  e  $C_1, C_2$  também constantes reais pode ser transformado num problema na forma adimensional.

Não existe um conjunto de regras precisas para definir as novas variáveis, geralmente seguimos a nossa intuição física tentando várias possibilidades.

Para normalizar o problema anterior introduzimos as novas variáveis adimensionais: a concentração adimensional  $C$ ; o comprimento adimensional  $\xi$  e o tempo adimensional  $\tau$ .

Para normalizar a equação diferencial, escolhemos a nova variável como:

$$C(x, t) = \frac{c(x, t) - C_1}{C_2 - C_1}$$

sendo a nova concentração  $C$  adimensional, pois não tem unidade, já que ela é quociente de diferenças das quantidades de poluentes em uma certa medida, por exemplo se considerarmos  $\frac{\text{ppm}}{\text{ppm}}$  (partes por milhão) teremos o quociente que é adimensional.

Quais devem ser as novas condições de fronteira e a nova condição inicial?

Usando as condições de fronteiras do problema

$$c(0, t) = C_1, \quad \text{e} \quad c(L, t) = C_2, \quad t > 0$$

obtemos para  $t > 0$ ,

$$C(0, t) = 0 \quad \text{e} \quad C(L, t) = 1.$$

A solução do problema neste caso será dada por:

$$c(x, t) = C_1 + (C_2 - C_1) C(x, t)$$

Para normalizar a variável espacial  $x$  usamos uma nova variável espacial  $\xi$ . Como  $0 < x < L$ , fazemos

$$\xi = \frac{x}{L}$$

e segue que, a nova variável satisfaz  $0 < \xi < 1$ . Então, usando a regra da cadeia, as derivadas com relação a  $x$  ficam em função da variável  $\xi$ :

$$C_x = C_\xi \xi_x = C_\xi \frac{1}{L} \quad \text{e} \quad C_{xx} = \frac{C_{\xi\xi}}{L^2}$$

Portanto o problema de valor inicial e condições de contorno torna-se:

$$C_t = \left(\frac{\alpha}{L}\right)^2 C_{\xi\xi}, \quad 0 < \xi < 1, \quad t > 0$$

$$C(0, t) = 0$$

$$C(1, t) = 1, \quad t > 0$$

$$C(\xi, 0) = \frac{\sin(\pi\xi) - C_1}{C_2 - C_1}, \quad 0 < \xi < 1$$

Resta agora normalizar a variável temporal  $t$ . Não é fácil introduzir um tempo adimensional de modo que a constante  $(\frac{\alpha}{L})^2$  desapareça da equação diferencial parcial, ou seja, de modo que  $(\frac{\alpha}{L})^2 = 1$ .

Tentamos uma transformação do tipo  $\tau = k t$ , em que  $k$  é uma constante desconhecida e calculamos a derivada

$$C_t = C_\tau \tau_t = k C_\tau$$

Substituindo na equação diferencial parcial original obtemos:

$$k C_\tau = \left(\frac{\alpha}{L}\right)^2 C_{\xi\xi}$$

Portanto, devemos escolher  $k = (\frac{\alpha}{L})^2$  e também  $\tau = (\frac{\alpha}{L})^2 t$ . Finalmente, o problema adimensionalizado torna-se:

$$C_\tau = C_{\xi\xi}, \quad 0 < \xi < 1, \quad \tau > 0$$

$$C(0, \tau) = 0 \quad \text{e} \quad C(1, \tau) = 1, \quad \tau > 0$$

$$C(\xi, 0) = \frac{\sin(\pi\xi) - C_1}{C_2 - C_1}, \quad 0 < \xi < 1$$

cujas soluções agora é do tipo:

$$c(x, t) = C_1 + (C_2 - C_1) C\left(\frac{x}{L}, \frac{\alpha^2}{L^2} t\right).$$

Observamos as vantagens de uma equação adimensionalizada:

- A equação diferencial parcial adimensionalizada não possui parâmetros;
- As condições de fronteira se tornam mais simples;
- A condição inicial não sofre uma mudança profunda, continua sendo uma função conhecida;
- O problema de valor inicial e condições de contorno se torna mais simples e mais compacto do que o problema original.

#### 5.14 Um modelo de poluição do ar

As chaminés das indústrias de nosso planeta emitem fumaças, a maioria delas carregadas de poluentes indesejáveis produzindo altos danos a saúde da população local e ao ambiente que vivemos.

Suponhamos que uma cidade tenha uma fonte poluidora do ar provinda de uma indústria que emite poluentes com uma concentração  $c(x, t)$  que vai se propagando e difundindo na direção do vento  $x$  e no tempo  $t$ .

Para determinar a condição do ar na cidade, especialmente para explorar a possibilidade de morar na vizinhança da indústria com o mínimo de risco de ser contaminado ou sofrer consequências, começamos questionando que hipóteses básicas devemos considerar?

Podemos supor que o vento sopra somente numa direção  $x$ ,  $x > 0$  (significa que o vento sopra para a direita da indústria com velocidade constante  $V$ ) e também que  $V$  seja a maior velocidade do vento registrada na região e que a nuvem de fumaça é transportada pelo vento, sem mudar de direção.

O mecanismo de transporte da fumaça é conhecido como advecção e o de espalhamento em que a concentração da poluição vai diminuindo é conhecido como difusão.

Nos arredores da indústria, temos que a concentração  $c(x, y, z, t)$  da poluição será considerada uma função de apenas duas variáveis  $c(x, t)$  e para equacioná-la consideremos inicialmente a equação da advecção, imaginando que a nuvem de fumaça não se espalha, e assim, obtemos uma equação diferencial parcial dada por

$$c_t + Vc_x = 0$$

Imaginamos que a concentração inicial da poluição é dada pela condição inicial  $c(x, 0) = c_0(x)$ .

A solução da equação diferencial com a condição inicial pode ser escrita como

$$c(x, t) = c_0(\eta)$$

em que  $\eta = x - Vt$ , indicando que o perfil da poluição inicial  $c_0$  viaja com uma velocidade constante  $V$ , como vimos na seção 5.4.

Observamos que se a velocidade do vento  $V$  depender do ponto  $x$  e do instante  $t$ , a equação da advecção fica

$$c_t + (Vc)_x = 0$$

A solução deste problema é análoga a do problema da poluição do rio na seção 5.3.

Consideramos apenas o processo de difusão da poluição, o mesmo que acontece com a difusão do calor num fio (numa barra etc.), donde segue que a equação diferencial parcial que rege a difusão é dada por

$$c_t = \alpha^2 c_{xx}$$

com a condição inicial

$$c(x, 0) = c_0(x),$$

em que  $\alpha$  é o coeficiente de difusão que depende do meio considerado e, assim,  $c = c(x, t)$  representa a concentração da poluição num ponto  $x$  num instante  $t$ .

A solução analítica da equação da difusão do tipo anterior é dada por:

$$c(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{4\pi\alpha^2}{L^2}t} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right),$$

sendo  $a_n$ ,  $n = 1, 2, \dots$  os coeficientes de Fourier da condição inicial  $c_0(x)$ .

No entanto, um modelo que é capaz de estimar com maior precisão a concentração de poluentes no ar é o que considera ambos os mecanismos de advecção e difusão e é dado pela equação:

$$c_t + Vc_x = \alpha^2 c_{xx}$$

com a condição inicial

$$c(x, 0) = c_0(x),$$

em que  $\alpha \in \mathbb{R}$  é o coeficiente de difusão dependente do meio considerado e  $V$  é a velocidade de transporte das partículas poluentes.



### 5.15 Solução numérica de equações diferenciais parciais

Um problema ambiental modelado por um problema de valor inicial com condições de contorno constituído de uma ou mais equações diferenciais cuja solução analítica é difícil de ser encontrada ou que não apresenta solução analítica, nos leva a necessidade de conhecermos os métodos numéricos de resolução. Tais métodos consistem em determinar uma solução aproximada da solução da equação diferencial parcial com as condições iniciais e de contorno e em pontos discretos do domínio.

Os métodos mais utilizados são os métodos das diferenças finitas e o método dos elementos finitos. O método dos elementos finitos é mais utilizado para resolver problemas com condições de contornos irregulares e consiste em transformar a resolução de um problema de equações diferenciais num problema de minimização de um funcional (RINCON & LIU, 2001). Neste trabalho utilizaremos o método das diferenças finitas (ARENALES & SALVADOR, 2010), (BURDEN & FAIRES, 2003).

Discretizamos uma equação diferencial parcial em que envolve uma função desconhecida  $c(x, t)$ , como a concentração de poluentes dependendo das variáveis  $x$  e  $t$ , considerando uma malha retangular de amplitude  $\Delta x = h$  na direção espacial  $x$  e  $\Delta t = k$  na direção temporal  $t$ .

Utilizando o método das diferenças finitas progressivas (ARENALES & SALVADOR, 2010) para a derivada de  $c(x, t)$  com relação a variável tempo  $t$ , obtemos a aproximação:

$$c_t(i\Delta x, n\Delta t) = \frac{c(i\Delta x, (n+1)\Delta t) - c(i\Delta x, n\Delta t)}{\Delta t} = \frac{c_{i,n+1} - c_{i,n}}{k}$$

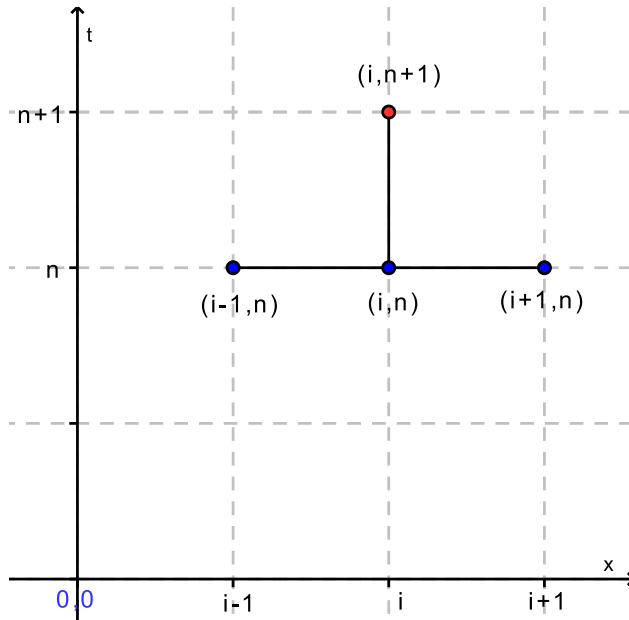
E da diferença regressiva na direção espacial, obtemos a aproximação da derivada de  $c = c(x, t)$  com relação a  $x$ ,

$$c_x(i\Delta x, n\Delta t) = \frac{c(i\Delta x, n\Delta t) - c((i-1)\Delta x, n\Delta t)}{\Delta x} = \frac{c_{i,n} - c_{i-1,n}}{h}$$

E a equação de transporte advectivo de poluentes carregados por um rio,  $c_t = Vc_x$  para a função  $c(x, t)$ , discretizada com uma malha do tipo da Figura 5.10 torna-se:

$$c_{i,n+1} = c_{i,n} - V \frac{k}{h} (c_{i,n} - c_{i-1,n})$$

Conhecendo a condição inicial  $c(x, 0)$  correspondente ao tempo  $n = 0$ , podemos calcular explicitamente a solução no instante  $n + 1$ , e assim sucessivamente.



**Figura 5.10:** Malha para esquema explícito

Dizemos que o método das diferenças finitas é **estável** se ele satisfaz a condição CFL (Courant, Friedrichs e Lewy) (BURDEN & FAIRES, 2003)

$$0 < \lambda = V \frac{k}{h} < 1,$$

e **instável** caso  $\lambda > 1$ .

No problema considerado, esta condição estabelece que a velocidade numérica deve ser maior ou igual a velocidade de transporte das partículas poluidoras.

No problema de transporte apenas por advecção quando  $\frac{k}{h} > V$  aparece um fenômeno numérico estranho, um tipo de difusão numérica no processo de resolução.

No modelo de difusão das partículas poluidoras devemos ter a aproximação numérica da derivada espacial segunda (ARENALES & SALVADOR, 2010) dada por

$$\begin{aligned} c_{xx}(i\Delta x, n\Delta t) &= \frac{c((i+1)\Delta x, n\Delta t) - 2c(i\Delta x, n\Delta t) + c((i-1)\Delta x, n\Delta t)}{\Delta x^2} \\ &= \frac{c_{i+1,n} - 2c_{i,n} + c_{i-1,n}}{h^2} \end{aligned}$$

A equação da difusão discretizada fica

$$c_{i,n+1} = c_{i,n} + \alpha^2 \frac{k}{h^2} (c_{i+1,n} - 2c_{i,n} + c_{i-1,n})$$

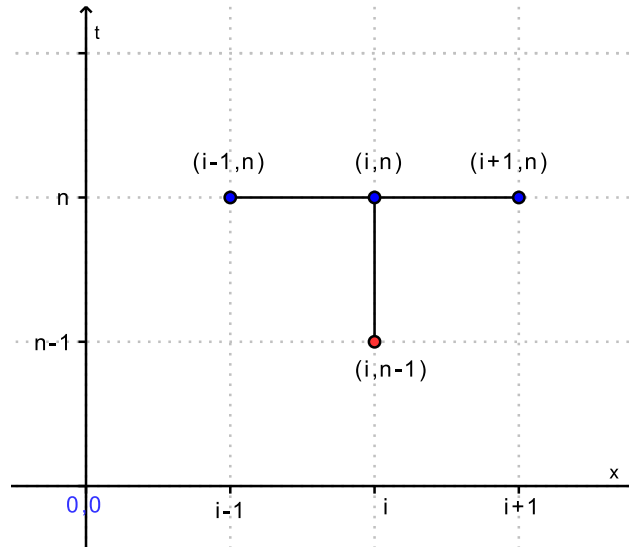
No sentido de eliminarmos as instabilidades numéricas no caso da difusão,

devemos estabelecer passos menores no tempo o que implica que o algoritmo numérico fica lento.

Um método alternativo estável para resolução do problema é o método de Crank-Nicolson em que escolhemos o passo no tempo levando em conta o critério de precisão e com a equação discretizada do tipo:

$$c_{i,n+1} = c_{i,n} - V \frac{k}{h} (c_{i,n} - c_{i-1,n}) + \alpha^2 \frac{k}{h} \left( \frac{1}{2} (c_{i+1,n+1} - 2c_{i,n} + c_{i-1,n+1}) + \frac{1}{2} (c_{i+1,n} - 2c_{i,n} + c_{i-1,n}) \right)$$

cujas malhas podem ser vistas na Figura 5.11 a seguir



**Figura 5.11:** Malha para o esquema implícito

Ela contém três pontos no nível  $n + 1$  e três no nível  $n$ . Observe que a cada passo no tempo teremos que resolver um sistema de equações lineares da forma

$$M C_{n+1} = N C_n,$$

em que  $C_{n+1}$  é um vetor no tempo

$$C_{n+1} = [C_{2,n+1} \quad C_{4,n+1} \quad C_{3,n+1} \quad \dots \quad C_{I-1,n+1}]^T$$

e as matrizes  $M$  e  $N$  são obtidas dos coeficientes do esquema implícito e portanto dependem dos passos da malha  $\Delta x = h$  e  $\Delta t = k$ .

Levando em consideração as condições de contorno homogêneas do problema dadas por  $C_{0,n} = 0$  e  $C_{I,n} = 0$  para todo  $n = 1, 2, 3, \dots, N$ , podemos escrever as matrizes  $M$  e  $N$  colocando do lado esquerdo os termos da equação no tempo  $n + 1$  e do lado direito os termos no instante  $n$ .

Conhecendo a solução no passo  $n$  obtemos um sistema de equações lineares do tipo

$$M x = B, \quad \text{em que} \quad B = N C_n,$$

com  $n - 2$  equações.

Geralmente para depurar e validar um algoritmo é comum começarmos com o método implícito desprezando o transporte, ou seja, fazendo  $V = 0$ .

Em seguida testamos a parte nova do esquema numérico.

### Exemplo 5.2

Considere o problema de difusão convecção

$$c_t + Vc_x = \alpha^2 c_{xx}$$

com  $V = 1$ ,  $\alpha = 0.05$ ,  $I = 30$  pontos na direção  $x$  com comprimento total igual a 3 unidades,  $N = 1.5$  com  $\Delta t = k = 0.05$ , começando em  $x = 0$  e terminando em  $x = 1$  e a condição inicial

$$c(x, 0) = c_0(x) = 1 - 1/3x$$

para todo  $x \in [0, 3]$  e

$$c(0, t) = 1 \quad \text{e} \quad c(3, t) = 0$$

Podemos adotar um esquema de diferenças finitas como o que pode ser utilizado para resolver a equação diferencial parcial  $u_t - Vu_x = 0$  estudada analiticamente na seção 5.4 juntamente com as condições iniciais e suas generalizações.

Consideremos o problema de valor inicial

$$u_t - Vu_x = 0, \quad t > 0, \quad x > 0 \quad (5.40)$$

$$u(x, 0) = f(x), \quad x > 0$$

Para resolvê-lo numericamente, utilizamos uma malha de pontos no plano  $(x, t)$  considerando os incrementos positivos  $\Delta x$  para o espaço e  $\Delta t$  para o tempo, e cada ponto do domínio  $x_i = i\Delta x$  e  $t_n = n\Delta t$ , para  $i \in N$  e  $n \in N$ , conforme a malha na Figura 5.10

Calculamos os valores da solução  $u(x, t)$  nos pontos  $(i, n)$  da malha tal que  $u_{i,n} = u(x_i, t_n)$  e tal aproximação deveria convergir sempre para a solução exata quando os incrementos  $\Delta x$  e  $\Delta t$  se aproximam de zero, quando substituímos as derivadas parciais pelas diferenças finitas progressivas

$$u_t(x_i, t_n) = \frac{u(x_i, t_{n+1}) - u(x_i, t_n)}{\Delta t} + \vartheta(\Delta t)$$

$$u_x(x_i, t_n) = \frac{u(x_{i+1}, t_n) - u(x_i, t_n)}{\Delta x} + \vartheta(\Delta x).$$

Assim, se  $u$  satisfaz a equação diferencial parcial (15.4.1), então

$$\frac{u(x_i, t_{n+1}) - u(x_i, t_n)}{\Delta t} + V \frac{u(x_{i+1}, t_n) - u(x_i, t_n)}{\Delta x} + \varepsilon = 0,$$

em que  $\varepsilon = \vartheta(\Delta t) + \vartheta(\Delta x)$  é o erro medindo o grau de aproximação da equação diferencial pelas diferenças.

Considerando que  $\varepsilon \rightarrow 0$  o esquema de diferenças finitas para a equação diferencial (5.40) fica

$$\frac{u(x_i, t_{n+1}) - u(x_i, t_n)}{\Delta t} + V \frac{u(x_{i+1}, t_n) - u(x_i, t_n)}{\Delta x} = 0,$$

que resolvido para  $u_{i,n+1}$  com  $\rho = \frac{\Delta x}{\Delta t}$  obtém-se:

$$u_{i,n+1} = u_{i,n} - \frac{V}{\rho} (u_{i+1,n} - u_{i-1,n}),$$

conforme o diagrama da malha na Figura 5.12.

Como conhecemos os valores iniciais  $u(x, 0) = f(x)$ , temos  $u_{i,0} = f(x_i)$  para todo  $i = 0, 1, 2, \dots, I$ , obtemos os valores da linha seguinte  $u_{i,1}$  e assim sucessivamente até a linha  $t_n = n\Delta t$  do tempo e, portanto, em todos os pontos da malha.

Apesar de ser um esquema numérico simples, nem sempre a solução aproximada encontrada converge para a solução real.

Um esquema que respeita a estrutura analítica das soluções da equação pode ser pensado quando  $V \neq 0$ ,  $u$  depende dos dados iniciais num ponto  $x - Vt$  sobre o eixo  $x$  que está a esquerda de  $x$ , ao contrário do esquema de diferenças anterior que  $u_{i,n+1}$  depende dos dados iniciais a direita de  $x_i = i\Delta x$ . Podemos manter a diferença progressiva para  $u_t$  e substituir  $u_x$  pela diferença regressiva de modo que:

$$u_x(x_i, t_n) = \frac{u(x_i, t_n) - u(x_{i-1}, t_n)}{\Delta x} + \vartheta(\Delta x)$$

e a equação discretizada fica

$$u_{i,n+1} = \left(1 - \frac{V}{\rho}\right) u_{i,n} + \frac{V}{\rho} u_{i-1,n}$$

conforme diagrama desse esquema ilustrando a malha é apresentado na figura 5.11

Esse esquema parece mais natural, pois verificamos que neste caso  $u_{i,n+1}$  depende dos dados iniciais a esquerda de  $x_i = i\Delta x$ , mais consistente com o modo como a informação é propagada pela solução da equação.

Ainda assim, devemos escolher a razão  $\rho = \frac{\Delta x}{\Delta t}$  de modo que  $\frac{V}{\rho} < 1$ , ou seja, dado um passo espacial  $\Delta x$  devemos escolher um passo temporal  $\Delta t$  tal que  $V\Delta t < \Delta x$ , pois o método das diferenças finitas é estável se ele satisfaz a condição CFL (Courant, Freidrichs e Lewy) dada por  $0 < \rho = V\frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$ .

E é instável no caso de  $\rho > 1$ , que estabelece que a velocidade numérica deve ser maior ou igual a velocidade de transporte das partículas poluidoras.

O estudo de equações diferenciais parciais nasceu com o Cálculo Diferencial e Integral no século XVII e uma das primeiras aplicações interessantes nesta área foi o trabalho "Théorie Analytique de la Chaleur", publicada pela primeira vez em 1822 na França, uma das mais importantes contribuições de Fourier.

A resolução de equações diferenciais parciais pelo método de separação de variáveis de Fourier nos leva a problemas de autovalores para equações diferenciais ordinárias e a obter uma família de soluções. Em seguida, compomos a família de soluções que satisfaz as condições de fronteira para obter uma série que também deve satisfazer as condições iniciais, necessitando da Análise de Fourier.

Observamos que um outro modo para resolver equações diferenciais parciais seria utilizar a teoria das transformadas integrais de Laplace ou de Fourier.

Lembramos que as equações diferenciais parciais aparecem em muitos livros de métodos da matemática aplicada ou da física matemática, e a introdução que apresentamos nesta unidade não foi na direção do estudo complexo da existência e unicidade de soluções de problemas de valor inicial e condições de fronteira, mas visamos dar um primeiro passo na direção da aprendizagem da resolução de modelos matemáticos mais avançados dos problemas da engenharia.

## 5.16 Problemas propostos

1. **Equação homogênea:** Considere  $c(x, t)$  uma solução de (5.20). Substitua  $c(x, t)$  por  $c(\lambda x, \lambda^2 t)$  na equação (5.20) e verifique que ela é identicamente satisfeita.
2. **Equações diferenciais parciais básicas:**
  - a) Verifique que a função senoidal  $u(x, t) = \sin(x + t)$  satisfaz a equação da onda  $u_{tt} = u_{xx}$  ;
  - b) Com a transformação  $\xi = x + t$  e  $\eta = x - t$ , escreva a equação da onda

$$u_{tt} = u_{xx} \text{ como } u_{\xi\eta} = 0;$$

c) Com a transformação  $\xi = \eta$ ,  $\eta = -\frac{B}{A}x - y$  escreva a equação parabólica  $Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} = 0$  na forma canônica  $u_{\xi\xi} = 0$ ;

d) Escreva a equação diferencial parcial de Laplace  $u_{xx} + u_{yy} = 0$  em coordenadas polares.

3. **Resolvendo EDP como EDO:** Resolva as seguintes equações diferenciais parciais para  $u(x, y)$  como uma equação diferencial ordinária.

a)  $u_x + 0.2x u = 0$ ;

b)  $u_x - 2.5xy u = 0$ ;

c)  $u_{yy} + 3u = 0$ .

4. **Resolvendo EDP por substituição:** Muitas equações diferenciais podem se tornar mais simples fazendo uma mudança de variáveis. Faça a substituição  $v = u_x$  ou  $v = u_y$  e resolva:

a)  $u_{xxy} - u_y = 0$ ;

b)  $u_{xyy} + u_x = 0$ .

Sugestão: Faça uma mudança do tipo  $u_y = v$ , donde  $v_{xx} - v = 0$ . Obtenha  $v(x, y)$  e depois uma expressão para  $u(x, y)$ .

5. **Conferindo a solução:** Confira se as seguintes funções satisfazem as respectivas equações de difusão:

a)  $c(x, t) = e^{-t} \sin(x)$ ,  $c_t = c_{xx}$ ;

b)  $c(x, t) = e^{-t} \cos(x)$ ,  $c_t = c_{xx}$ ;

c)  $c(x, t) = e^{-w^2 \alpha^2 t} \sin(wx)$ ,  $c_t = \alpha^2 c_{xx}$ , para  $w$  e  $\alpha$  constantes.

6. **Adimensionalização:** Para a equação diferencial parcial  $c_t + \alpha c_x = 0$  com  $\alpha \in \mathbb{R}$ , escolha uma nova variável espacial de modo que se possa eliminar o parâmetro  $\alpha$  da equação, tornando-a adimensional.

7. **Poluição do ar:** Utilize um software computacional gráfico para elaborar uma animação de uma onda de poluição  $c(x, t) = c_0(x - Vt)$  viajando para a direita. Sugestão: Observe, por exemplo, a Figura 5.2

8. **Advecção e difusão:** Pesquise como encontrar a solução analítica do problema que leva em consideração os processos de advecção e difusão de poluição do ar, estabelecida por:

$$c_t + V c_x = \alpha^2 c_{xx}, \text{ com a condição inicial } c(x, 0) = c_0(x)$$

em que  $\alpha \in \mathbb{R}$  é o coeficiente de difusão dependente do meio considerado e  $V$  é a velocidade de transporte das partículas poluentes.

9. **Resolvendo um PVICC:**

a) Mostre que a solução do problema de difusão

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = 0.15^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0$$

de valor inicial (a distribuição inicial da concentração)

$$u(x, 0) = 3 \sin(2\pi x), \quad 0 < x < 1$$

e condições de fronteira,

$$u(0, t) = 0, \quad u(1, t) = 0 \quad t > 0$$

é igual a

$$u(x, t) = 3 e^{-4\pi^2 0.15^2 t} \sin(2\pi x).$$

b) Utilize um software computacional algébrico e verifique que o gráfico da solução anterior

$$u(x, t) = 3 e^{-4\pi^2 0.15^2 t} \sin(2\pi x)$$

é exatamente o mostrado como na Figura 5.9.

10. **Resolução numérica de um PVICC:** Considere o problema

$$c_t + Vc_x = \alpha^2 c_{xx},$$

com  $V = 1$ ,  $\alpha = 0.3$ ,  $h = 0.1$ ,  $k = 0.05$  e como condição inicial  $c(x, 0) = c_0(x)$  um pulso quadrado entre  $x = 1$  e  $x = 2$ . Verifique que a concentração máxima baixa de 1 para 0.25 e a nuvem de poluição ocupa uma região muito menor.

11. **A equação de Laplace no plano:** A equação diferencial parcial para  $h = h(x, y)$

$$h_{xx} + h_{yy} = 0$$

para  $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$  pode descrever o estado estacionário de um escoamento num lençol freático em condições homogêneas e isotrópicas.

a) Mostre que a discretização da equação de Laplace com passos  $\Delta x$  e  $\Delta y$  nos leva a equação

$$T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 4T_{i,j} = 0;$$



**b)** Com os valores de  $h$  na fronteira  $\partial\Omega$  de uma região  $\Omega = [0, 4] \times [0, 4]$  dados por:  $h(x, 0) = 0$ ,  $h(x, 4) = 100$ ,  $h(0, y) = 0$  e  $h(4, y) = 0$  mostre que a solução analítica pelo Método de Separação de Variáveis pode ser escrita como

$$h(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sinh\left(\frac{n \pi y}{4}\right) \sin\left(\frac{n \pi x}{4}\right),$$

em que

$$a_n = \frac{2}{4 \sinh(n\pi)} \int_0^4 h(x, 4) \sin(n \pi x) dx;$$

**c)** Determine os valores da solução analítica nos pontos da malha quadrada com  $\Delta x = 1$  e  $\Delta y = 1$ ;

**d)** Com a discretização do item a) determine os valores de  $h(i, j)$  nos pontos da malha quadrada com  $\Delta x = 1$  e  $\Delta y = 1$ ;

**e)** Compare os valores obtidos nos pontos  $(1, 1)$ ,  $(2, 3)$  e  $(3, 3)$  da malha.

## 12. Equação de Laplace num domínio circular:

**a)** Mostre que a equação de Laplace pode ser escrita em coordenadas polares  $(r, \theta)$  para  $r > 0$  e  $\theta \in [0, 2\pi]$

$$u_{rr} + \frac{1}{r}u_r + \frac{1}{r^2}u_{\theta\theta} = 0;$$

**b)** No caso de um problema de difusão estacionário homogêneo na direção angular a equação de Laplace fica unidimensional e reduzida a uma equação diferencial ordinária para a variável  $u = u(r)$

$$u_{rr} + \frac{1}{r}u_r = 0.$$

## 13. Explorando modelos com o Jogo da Vida: Faça simulações da evolução de populações artificialmente utilizando o jogo da vida<sup>1</sup>, como proposto pelo autor J. Conways e acesado em 11/10/11. Verifique como uma população inicial varia no espaço e no tempo.

<sup>1</sup>[www.bitstorm.org/gameoflife](http://www.bitstorm.org/gameoflife)

# UNIDADE 6

Modelos com Otimização Linear

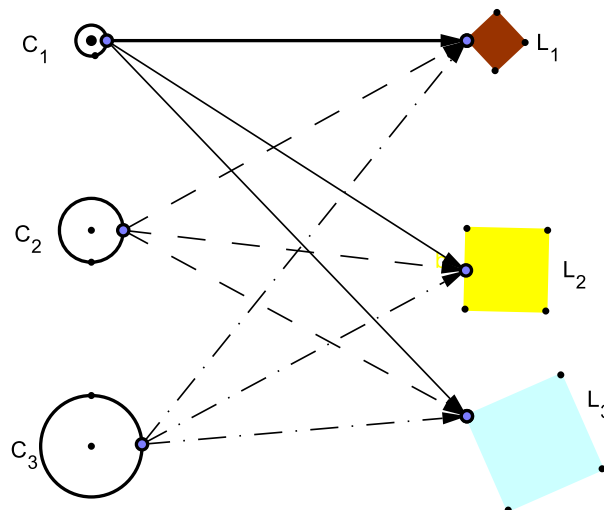


## 6.1 Introdução

Nesta unidade, apresentaremos um breve estudo sobre Otimização Linear, a teoria básica, o método de resolução denominado Método Simplex e algumas aplicações para problemas ambientais.

Introduziremos inicialmente as ideias principais dos problemas de otimização linear apresentando um modelo simples de transporte de lixo contaminado e em seguida outros problemas que podem ser modelados por um Problema de Otimização Linear.

Consideremos um problema ambiental em que três cidades representadas por  $C_1, C_2$  e  $C_3$ , necessitam transportar periodicamente seus lixos contaminados nas respectivas quantidades 100 kg, 500 kg e 800 kg, para lixões incineradores  $L_1, L_2$  e  $L_3$  com capacidades máximas de 300 kg, 500 kg e 600 kg respectivamente, conforme Figura 6.1:



**Figura 6.1:** Esquema de transporte de lixo da cidade  $C_i$  para o lixão  $L_j$

O problema de determinar as quantidades de lixo a serem transportadas de cada cidade  $C_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  para cada lixão incinerador  $L_j$ ,  $j = 1, 2, 3$ , com o menor custo possível é um exemplo de Problema de Otimização Linear.

## 6.2 Modelo de um Problema de Otimização Linear

Nos últimos anos a teoria de Otimização Linear tem sido aplicada para resolução de problemas das várias áreas da ciência.

Um **Problema de Otimização Linear** (POL) consiste em determinar uma solução que satisfaça algumas restrições como um sistema de equações ou de inequações lineares e que otimiza (minimiza ou maximiza) uma função linear, ou seja, temos o seguinte modelo matemático:

$$\text{Minimizar } Z(x_1, x_2, \dots, x_n) = c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n$$

$$\text{sujeito a } \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0 \end{cases}$$

em que  $c_j$ ,  $a_{ij}$  e  $b_j$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots, m$ ,  $j = 1, 2, 3, \dots, n$  são números reais.

Dizemos que esta é a **forma padrão** para um POL.

A função linear  $Z(x)$  a ser minimizada é chamada de **função objetivo**.

As equações lineares que as soluções de um POL devem satisfazer são chamadas de **restrições do problema** e as desigualdades  $x_j \geq 0$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  são as **condições de não negatividade** do POL.

As restrições normalmente representam as exigências a serem cumpridas como limitações de recursos disponíveis, capacidade, recursos naturais, capital, mão de obra, fatores de produção etc. e determinam um subespaço das soluções viáveis onde se encontra a solução ótima.

Um POL pode ser representado na forma matricial por:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } Z(x) = c^t x \\ &\text{sujeito a } \begin{cases} Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

em que os dados do problema são as matrizes:

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

e  $c^t$  é a transposta do vetor  $c$  e as incógnitas do problema são dadas pelo vetor (matriz) coluna,

$$x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{bmatrix}^t$$

e  $x \geq 0$  significa que cada componente  $x_i \geq 0$  para todo  $i = 1, 2, \dots, n$ .

Um vetor  $x \in \mathbb{R}^n$  tal que  $Ax = b, x \geq 0$  é chamado de **solução viável**.

O conjunto de todas as soluções viáveis é chamado de **região viável**, isto é, o conjunto  $S = \{x \in \mathbb{R}^n, \text{ tal que } Ax = b, x \geq 0\}$ .

Se a solução  $x^* \in S$  é tal que  $Z(x^*) \leq Z(x)$  qualquer que seja  $x \in S$ , então  $x^*$  é chamada de **solução ótima** do POL.

Resolver um POL consiste em determinar a sua solução ótima.

Um POL pode ter uma única solução ótima, múltiplas soluções ótimas, ou mesmo não ter solução ótima.

Em problemas práticos, as restrições podem ocorrer como desigualdades lineares, as quais podem ser escritas de forma equivalente como equações, pela introdução de variáveis de folga, bem como pode ser um problema de maximização, como por exemplo:

### Exemplo 6.1

$$\begin{aligned} \text{Max } Z(x_1, x_2) &= x_1 + 2x_2 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} 3x_1 + x_2 \leq 3 \\ -x_1 + x_2 \leq 2 \\ x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Inicialmente, observamos que a solução ótima de um problema de maximização consiste em determinar  $x^*$  tal que  $Z(x^*) \geq Z(x)$  qualquer que seja  $x \in S$ .

Equivalentemente, trocando o sinal da última desigualdade obtemos:

$$-Z(x^*) \leq -Z(x),$$

para todo  $x \in S$  que se transforma num problema de minimização. Portanto, o problema dado pode ser escrito como:

$$\text{Min } (-Z(x)), \quad x \in S.$$

As restrições de desigualdades podem ser reescritas como equações, incrementando novas **variáveis de folga** positivas, como segue:

$$3x_1 + x_2 \leq 3 \quad \Leftrightarrow \quad 3x_1 + x_2 + x_3 = 3, \quad x_3 \geq 0$$

$$-x_1 + x_2 \leq 2 \quad \Leftrightarrow \quad -x_1 + x_2 + x_4 = 2, \quad x_4 \geq 0.$$

Assim, o problema dado pode ser reescrito com a introdução das variáveis de folga  $x_3 \geq 0$  e  $x_4 \geq 0$  tornando-se na forma padrão:

$$\begin{aligned} \text{Min } (-Z(x)) &= -x_1 - 2x_2 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} 3x_1 + x_2 + x_3 &= 3 \\ -x_1 + x_2 + x_4 &= 2 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0, x_4 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Podemos ainda, ter problemas de otimização com desigualdades lineares do tipo  $\geq$  (maior ou igual), com variáveis livres, isto é, aquelas variáveis que podem assumir valores positivos, negativos ou nulos e ainda variáveis assumindo valores negativos e livres, conforme exemplo a seguir:

### Exemplo 6.2

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= 2x_1 + x_2 - x_3 + 3x_4 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 - x_3 + x_4 &\geq 3 \\ 4x_1 - x_3 - 2x_4 &\leq 0 \\ -2x_3 + x_4 &= 7 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \leq 0, x_4 \text{ livre} \end{cases} \end{aligned}$$

Neste caso, podemos transformar o problema dado, na forma padrão da seguinte maneira:

Fazendo  $x_3 = -x'_3$ , temos que a variável  $x'_3 \geq 0$  e  $x_4 = x'_4 - x''_4$ , ambas  $x'_4 \geq 0$  e  $x''_4 \geq 0$  e, acrescentando as variáveis de folga  $x_5 \geq 0$  e  $x_6 \geq 0$ , podemos escrever:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= 2x_1 + x_2 + x'_3 + 3x'_4 - 3x''_4 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} x_1 + 2x_2 + x'_3 + x'_4 - x''_4 - x_5 &= 5 \\ 4x_1 + x'_3 - 2x'_4 + 2x''_4 + x_6 &= 0 \\ 2x'_3 + x'_4 - x''_4 &= 7 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x'_3 \geq 0, x'_4 \geq 0, x''_4 \geq 0, x_5 \geq 0, x_6 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

A seguir, exibiremos problemas ambientais que podem ser modelados como POL e tratados matematicamente fornecendo soluções ótimas, baixando o custo, evitando o desperdício, economizando e contribuindo para o ambiente.

## 6.3 Alguns problemas ambientais de Otimização Linear

Muitos problemas ambientais podem ser modelados via Otimização Linear. Exibiremos a formulação matemática do problema de otimização de transporte de lixo contaminado introduzido na seção inicial desta unidade e em seguida um problema de otimização de composição de areias para filtros.

### 6.3.1 Um modelo para o transporte de lixo contaminado

Vejamos como formular o modelo do problema do transporte de lixo contaminado apresentado na introdução 6.1.

Considere que as cidades representadas por  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$ , necessitam transportar periodicamente seus lixos contaminados nas respectivas quantidades 100 kg, 500 kg e 800 kg, para lixões incineradores  $L_1$ ,  $L_2$  e  $L_3$  com capacidades máximas de 300 kg, 500 kg e 600 kg respectivamente.

Os custos unitários de transporte em reais (R\$) desse material de cada cidade,  $C_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  para cada lixão,  $L_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  podem ser representados conforme tabela a seguir:

**Tabela 6.1** Custos de transporte das cidades para os lixões

	$L_1$	$L_2$	$L_3$
$C_1$	4	3	2
$C_2$	6	2	4
$C_3$	3	5	7

O custo unitário de transporte deste material da cidade  $C_1$  para o lixão  $L_1$  é de R\$4,00 e assim sucessivamente das demais cidades para os outros lixões.

Deseja-se saber as quantidades a serem transportadas de cada cidade  $C_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  para cada lixão,  $L_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  com o menor custo possível.

#### Modelo matemático para o transporte do lixo:

Introduzimos inicialmente as variáveis do problema  $x_{ij}$  que representam as quantidades de lixo contaminado a serem transportadas da cidade de origem  $C_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  para o lixão de destino  $L_j$ ,  $j = 1, 2, 3$ .

A função objetivo deste problema é o custo total de transporte  $Z(x)$  dada por:

$$Z(x) = c_{11}x_{11} + c_{12}x_{12} + c_{13}x_{13} + \dots + c_{33}x_{33},$$

em que os parâmetros  $c_{ij}$ ,  $i = 1, 2, 3$  e  $j = 1, 2, 3$  representam os custos unitários de transporte da cidade  $C_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  para o lixão  $L_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  conforme a Tabela 6.1, logo, temos:

$$Z(x) = 4x_{11} + 3x_{12} + 2x_{13} + 6x_{21} + 2x_{22} + 4x_{23} + 3x_{31} + 5x_{32} + 7x_{33}$$

Note que o total de lixo que sai da cidade  $C_1$  é  $x_{11} + x_{12} + x_{13}$  que deve ser igual a 100, isto é,  $x_{11} + x_{12} + x_{13} = 100$ , o total de lixo que sai da cidade  $C_2$  é



$x_{21} + x_{22} + x_{23}$  que deve ser igual a 500, isto é,  $x_{21} + x_{22} + x_{23} = 500$  e o total de lixo que sai da cidade  $C_3$  é  $x_{31} + x_{32} + x_{33}$  que deve ser igual a 800, isto é,  $x_{31} + x_{32} + x_{33} = 800$ .

Analogamente, escrevemos as demais restrições do problema como as capacidades máximas de cada lixão.

A capacidade máxima do lixão  $L_1$  de receber lixo contaminado das cidades  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$  é igual a 300 kg, ou seja;  $x_{11} + x_{21} + x_{31} \leq 300$  e, como a capacidade máxima do lixão  $L_2$  é de 500 kg, temos  $x_{12} + x_{22} + x_{32} \leq 500$  e a capacidade do lixão  $L_3$  de 600 kg, de modo que  $x_{13} + x_{23} + x_{33} \leq 600$ .

Assim, a modelagem matemática do problema é um POL dado por:

$$\text{Min } Z(x) = 4x_{11} + 3x_{12} + 2x_{13} + 6x_{21} + 2x_{22} + 4x_{23} + 3x_{31} + 5x_{32} + 7x_{33}$$

$$\text{sujeito a } \begin{cases} x_{11} + x_{12} + x_{13} = 100 \\ x_{21} + x_{22} + x_{23} = 500 \\ x_{31} + x_{32} + x_{33} = 800 \\ x_{11} + x_{21} + x_{31} \leq 300 \\ x_{12} + x_{22} + x_{32} \leq 500 \\ x_{13} + x_{23} + x_{33} \leq 600 \\ x_{ij} \geq 0, i = 1, 2, 3, j = 1, 2, 3 \end{cases}$$

O estudo de tal modelo pode levar a uma solução ótima, trazendo benefícios à população das três cidades consideradas e para o ambiente.

### 6.3.2 Um modelo para a composição de areias para filtro

Numa ETA (Estação de Tratamento de Águas e de Abastecimento) vários procedimentos são aplicados para tornar a água em condições de ser utilizada pela população. Nesse processo, algumas etapas como coagulação, floculação, decantação, filtração, desinfecção, fluoretação e correção de PH são consideradas. Em particular, na etapa de filtração são utilizadas areias, como meio filtrante para reter as impurezas existentes na água fluente, devido a grande permeabilidade que estas apresentam.

Essas areias são colocadas em camadas obedecendo às composições granulométricas estabelecidas por norma técnica.

Para construção das unidades de filtração de uma ETA, areias são retiradas de diferentes portos, com composições granulométricas distintas, por exemplo, nas quantidades consideradas em  $m^3$  conforme a Tabela 6.2.

**Tabela 6.2** Faixa granulométrica x Volume de areia (V)

Faixa granulométrica (mm)	Volume de areia (m <sup>3</sup> )
0.42 - 0.59	16
0.59 - 0.71	16
0.71 - 0.84	16
0.84 - 1.00	64
1.0 - 1.19	40
1.19 - 1.41	8

Os custos totais de dragagem, transporte, seleção e preparo para a utilização da areia por unidade de volume (m<sup>3</sup>) são conhecidos para cada um dos portos.

A próxima Tabela 6.3 apresenta as composições granulométricas de areia de dois portos, além dos custos totais.

**Tabela 6.3** Faixa granulométrica x volume de areia de cada porto

Faixa Granulométrica mm	Porto 1 Volume de areia/m <sup>3</sup>	Porto 2 Volume de areia/m <sup>3</sup>
0.42 - 0.59	0.17	0.13
0.59 - 0.71	0.16	0.11
0.71 - 0.84	0.18	0.14
0.84 - 1.00	0.10	0.09
1.00 - 1.19	0.09	0.12
1.19 - 1.41	0.05	0.07
custo ( R\$/m <sup>3</sup> )	25.00	19.00

Por exemplo, 17% da areia proveniente do Porto 1 tem os diâmetros de seus grãos entre 0.42 mm e 0.59 mm, 16% entre 0.59 e 0.71 mm etc. e custa R\$25,00 por m<sup>3</sup>.

Assim, de um volume de 100 m<sup>3</sup> da areia do Porto 1, pode-se extrair 17 m<sup>3</sup> de areia na faixa granulométrica 0.42 – 0.59 mm, que é suficiente para a construção do filtro, que necessita 16 m<sup>3</sup> desta faixa, mas essa quantidade é insuficiente para se obter a quantidade de areia necessária na faixa 0.84 – 1.00 mm.

Sabendo-se que o custo do m<sup>3</sup> de areia do Porto 1 é R\$25,00 e do Porto 2 é R\$19,00, deseja-se determinar quais os volumes de areia devem ser retirados de

cada porto, de modo que sejam atendidas as especificações da norma técnica e com o mínimo custo possível.

### Modelo matemático:

A partir dos dados fornecidos pelas Tabela 6.2 e Tabela 6.3, consideramos as variáveis  $x_1$  e  $x_2$  do problema em que:

$x_1$  é a quantidade em  $m^3$  de areia retirada do Porto 1;

$x_2$  é a quantidade em  $m^3$  de areia retirada do Porto 2.

Desejamos determinar os respectivos volumes de areias que devemos extrair dos portos 1 e 2 com o menor custo possível, o que nos leva ao seguinte POL:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= 25x_1 + 19x_2 \\ \text{sujeito a } \left\{ \begin{array}{l} 0.17x_1 + 0.13x_2 \geq 16 \\ 0.16x_1 + 0.11x_2 \geq 16 \\ 0.18x_1 + 0.14x_2 \geq 16 \\ 0.10x_1 + 0.09x_2 \geq 64 \\ 0.09x_1 + 0.12x_2 \geq 40 \\ 0.05x_1 + 0.07x_2 \geq 8 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{array} \right. \end{aligned}$$

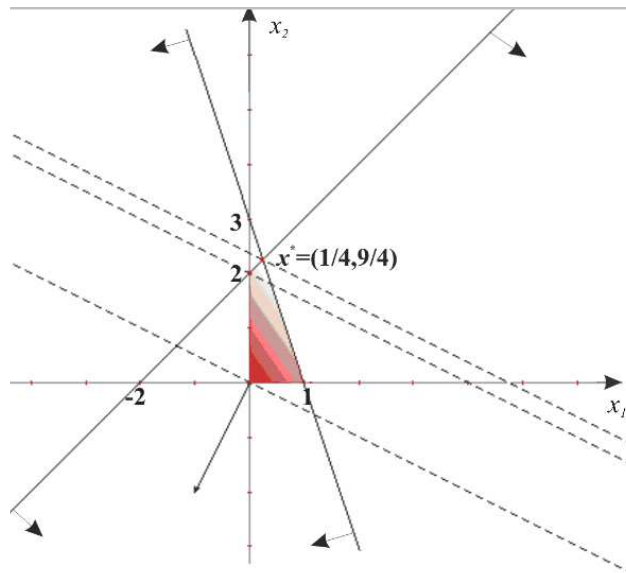
Podemos obter o gráfico da região plana limitada pelas desigualdades que representam as restrições do problema da composição de areias para filtro, que fica a cargo do leitor.

## 6.4 Solução gráfica de um POL

Considere o seguinte POL:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= -x_1 - 2x_2 \\ \text{sujeito a } \left\{ \begin{array}{l} 3x_1 + x_2 \leq 3 \\ -x_1 + x_2 \leq 2 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{array} \right. \end{aligned}$$

Como este problema possui apenas duas variáveis, podemos representá-lo graficamente num plano cartesiano. Observamos que os pontos que satisfazem todas as restrições do problema e as condições de não negatividade estão limitados por semiplanos conforme a região exibida na Figura 6.2:



**Figura 6.2:** Visualização gráfica do problema

As linhas tracejadas na Figura 6.2 são curvas de nível da função objetivo

$$Z(x) = -x_1 - 2x_2, \text{ ou seja, } Z(x) = k, \quad k \in \mathbb{R}$$

Como a função objetivo é linear, suas curvas de nível são retas, além disso, sabemos que o vetor gradiente da função objetivo  $Z(x_1, x_2) = -x_1 - 2x_2$  é dado por:

$$\nabla Z(x) = (-1, -2)^t$$

e aponta no sentido em que  $Z(x)$  cresce.

Como desejamos minimizar  $Z(x)$ , buscamos pontos da região viável opostos a direção do vetor gradiente e notamos que todos os pontos viáveis satisfazem a desigualdade  $Z(x) \geq Z(x^*)$  com

$$x^* = \left(\frac{1}{4}, \frac{9}{4}\right)^t,$$

ou seja,  $-x_1 - 2x_2 \geq -\frac{19}{4}$ , o que significa que a solução  $x^* = \left(\frac{1}{4}, \frac{9}{4}\right)^t$  é a solução ótima do problema e, neste caso, é a solução única para o POL.

Podem ocorrer situações que um POL admite múltiplas soluções, ou mesmo não possui solução, situações estas que serão examinadas posteriormente.

Consideramos agora o problema dado na forma padrão, como segue:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= -x_1 - 2x_2 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} 3x_1 + x_2 + x_3 &= 3 \\ -x_1 + x_2 &+ x_4 = 2 \\ x_j \geq 0, j = 1, 2, 3, 4 \end{cases} \end{aligned}$$

Este problema possui quatro variáveis, portanto o vetor solução  $x$  pertence ao espaço vetorial  $\mathbb{R}^4$ . Entretanto, podemos interpretar suas soluções no espaço vetorial  $\mathbb{R}^2$ , como visto na Figura 6.2. Note que  $x_3 = 0$  é equivalente à reta  $3x_1 + x_2 = 3$  e  $x_4 = 0$  é equivalente à reta  $-x_1 + x_2 = 2$ .

Assim, no sistema com duas equações a quatro incógnitas, quando fixamos as variáveis  $x_3 = 0$  e  $x_4 = 0$ , temos o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 = 3 \\ -x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

cuja solução é dada por  $x^* = (\frac{1}{4}, \frac{9}{4})^t$ .

A solução correspondente no espaço  $\mathbb{R}^4$  é dada por  $x^* = (\frac{1}{4}, \frac{9}{4}, 0, 0)^t$ .

Observamos que o sistema obtido com quatro variáveis possui grau de liberdade 2, e ao fixarmos duas variáveis obtemos um sistema restante com duas variáveis, em que estas variáveis não podem assumir quaisquer valores, como veremos adiante.

Note que  $x^*$  é uma solução particular do sistema  $2 \times 4$ , com duas equações e quatro incógnitas, o qual possui infinitas soluções. Neste caso, podemos observar que esta solução corresponde a um vértice da região viável.

Vejamos outro vértice na região viável da Figura 6.2, por exemplo,  $x_1 = 1$  e  $x_2 = 0$ . Esta solução é a intersecção das retas:

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 = 3 \\ x_2 = 0 \end{cases}$$

e, no sistema  $2 \times 4$  que corresponde a fixar duas variáveis no valor zero, por exemplo,  $x_2 = 0$  e  $x_3 = 0$ , pois o sistema possui grau de liberdade 2. Assim, temos o sistema de equações lineares com duas variáveis da seguinte forma:

$$\begin{cases} 3x_1 = 3 \\ -x_1 + x_4 = 2 \end{cases}$$

cuja solução é dada por  $x_1 = 1$  e  $x_4 = 3$  e, portanto, temos a solução do sistema  $2 \times 4$  dada por  $\bar{x} = (1 \ 0 \ 0 \ 3)^t$ .

Podemos notar que tanto  $x^*$  como  $\bar{x}$  são soluções viáveis, pois satisfazem o sistema  $2 \times 4$  e as condições de não negatividade, além disso, correspondem aos vértices da região viável conforme vistos na Figura 6.2.

Podemos identificar os outros vértices na região viável da Figura 6.2 e a correspondente solução do sistema  $2 \times 4$ , com a fixação de outras variáveis com valor zero.

Posteriormente, generalizamos este exemplo, ao enunciar um teorema importante que relaciona estas soluções particulares com os vértices da região viável.

## 6.5 Sistemas de equações lineares

Na seção anterior observamos, usando um exemplo, como vértices da região viável estão associados a certas soluções viáveis, isto é, que satisfazem o sistema  $2 \times 4$  e as condições de não negatividade. Retomamos àquelas soluções do sistema para observar uma estratégia geral de obtenção de soluções para um sistema de equações lineares  $Ax = b$ .

A solução  $x^* = (\frac{1}{4}, \frac{9}{4}, 0, 0)^t$  é obtida por organizar o sistema de equações lineares  $2 \times 4$  da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} 3x_1 + x_2 \\ -x_1 + x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix},$$

o qual pode ser reescrito como:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Definindo-se:

$$B = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad x_B = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix},$$

$$N = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad x_N = \begin{bmatrix} x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

o sistema pode ser representado por:

$$B x_B + N x_N = b.$$

Assim a solução  $x^*$  é obtida por tomar  $x_N = 0$  e  $x_B = B^{-1}b$ , uma vez que a matriz  $B$  é inversível.

Analogamente, a solução  $\bar{x} = (1 \ 0 \ 0 \ 3)^t$  é obtida por organizar o sistema de equações lineares  $2 \times 4$  da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} 3x_1 \\ -x_1 + x_4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_2 + x_3 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

o qual pode ser reescrito como:

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Definindo-se:

$$B = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad x_B = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_4 \end{bmatrix},$$

$$N = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad x_N = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

o sistema é escrito conforme anteriormente por:

$$B x_B + N x_N = b$$

e, a solução é obtida por tomar

$$\bar{x}_N = 0 \quad \text{e} \quad \bar{x}_B = B^{-1}b.$$

Desta forma, podemos considerar o caso geral:

Dado um sistema de equações  $Ax = b$ ,  $x \geq 0$ , em que  $A$  é uma matriz retangular  $m \times n$ .

Supomos que  $\text{posto}(A) = m$ , pois se  $\text{posto}(A) < m$  significa que existem equações redundantes, ou o sistema é incompatível. Portanto, podemos seleccionar  $m$  colunas da matriz  $A$  que formam um conjunto linearmente independente, e sabemos que existem muitas maneiras de seleccionar estas  $m$  colunas, como no exemplo anterior tomamos:

$$B = [a_1 \ a_2] \quad \text{ou} \quad B = [a_1 \ a_4]$$

em que  $a_j$  é a  $j$ -ésima coluna de  $A$ .

Por simplicidade de notação, suponha que as  $m$  primeiras colunas da matriz  $A$  sejam linearmente independentes e o sistema  $Ax = b$  pode ser escrito de forma equivalente por:

$$[a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_m x_m] + [a_{m+1} x_{m+1} + \dots + a_n x_n] = b$$

$$[a_1 \ a_2 \ \dots \ a_m] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} + [a_{m+1} \ \dots \ a_n] \begin{bmatrix} x_{m+1} \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = b$$

Definindo-se:

$B = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_m] \rightarrow$  matriz básica, de dimensão  $m \times m$  e inversível;

$N = [a_{m+1} \ \dots \ a_n] \rightarrow$  matriz não-básica, de dimensão  $m \times (n - m)$ ;

$x_B$ : variáveis básicas;

$x_N$ : variáveis não-básicas;

Escrevemos:

$$Ax = b \Leftrightarrow B x_B + N x_N = b \Leftrightarrow x_B + B^{-1} N x_N = B^{-1}b$$

Agora, se fixarmos as  $n - m$  variáveis  $x_N$  em zero, temos  $\bar{x}_N = 0$  e as variáveis básicas determinadas de forma única por  $\bar{x}_B = B^{-1}b$ .

Assim, a solução  $\bar{x}$  dada por  $\bar{x} = \begin{bmatrix} \bar{x}_B \\ \bar{x}_N \end{bmatrix}$  é uma solução particular do sistema  $Ax = b$ .

A solução  $\bar{x} = \begin{bmatrix} \bar{x}_B \\ \bar{x}_N \end{bmatrix}$  em que,  $\bar{x}_B = B^{-1}b$  e  $\bar{x}_N = 0$ , é chamada de **solução básica** do sistema  $Ax = b$ .

Além disso, se  $\bar{x}_B \geq 0$ , então temos uma **solução básica viável**.

Considerando o exemplo da seção 6.4 anterior, obtivemos duas soluções básicas viáveis, a solução  $x^* = (\frac{1}{4}, \frac{9}{4}, 0, 0)^t$  e a solução  $\bar{x} = (1 \ 0 \ 0 \ 3)^t$ .

Para a solução  $x^*$ , tomamos  $B = [a_1 \ a_2]$  e  $N = [a_3 \ a_4]$  e para a solução  $\bar{x}$  tomamos  $B = [a_1 \ a_4]$  e  $N = [a_2 \ a_3]$ .

Podemos notar que ambas as soluções correspondem a vértices da região viável na Figura 6.2.

Consideremos outra solução básica, em que:

$$B = [a_1 \ a_3] \text{ e } N = [a_2 \ a_4]$$

e as variáveis básicas  $x_B$  e as variáveis não-básicas  $x_N$  dadas respectivamente por:

$$x_B = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} \text{ e } x_N = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_4 \end{bmatrix}$$

Fixando-se  $x_N = 0$ , obtemos um sistema  $2 \times 2$  e temos que  $Bx_B = b$  dado por:

$$\begin{cases} 3x_1 + x_3 = 3 \\ -x_1 = 2, \end{cases}$$



cujas soluções,  $\bar{x}_b = B^{-1}b$ , é dada por:

$$x_B = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 9 \end{bmatrix}$$

Podemos notar que esta solução não é viável, pois notamos que a variável  $x_1 = -2 < 0$ , o que viola as condições de não negatividade das variáveis. Na Figura 6.2, vemos que a solução  $x_1 = -2$  e  $x_2 = 0$  apesar de ser uma solução básica, não é um vértice da região viável.

## 6.6 Teoria básica de Otimização Linear

A partir das considerações feitas anteriormente sobre um POL, enunciaremos alguns teoremas:

### Teorema 6.1

Considere  $M = \{x \in \mathbb{R}^n, \text{tal que } Ax = b, x \geq 0\}$  a região do espaço  $\mathbb{R}^n$  viável. Suponha a matriz  $A_{m \times n}$  com  $\text{posto}(A) = m$ . Uma solução  $\hat{x} \in M$  de um POL é um vértice de  $M$  se e somente se  $\hat{x}$  é uma solução básica viável.

**Prova:** (BREGALDA et al, 1986).

A resolução gráfica de um POL apresentada na seção 6.4, também nos sugere um resultado importante, dado pelo seguinte teorema:

### Teorema 6.2

Se um POL possui uma solução ótima, então existe um vértice (solução básica viável) ótimo.

**Prova:** (BREGALDA et al, 1986).

Podemos notar que, se  $x'$  e  $x''$  são duas soluções viáveis, isto é,

$$Ax' = b, \quad x' \geq 0$$

e também

$$Ax'' = b, \quad x'' \geq 0$$

então, todos os pontos no segmento de reta que liga  $x'$  e  $x''$  são também soluções viáveis.

Observe que os conjuntos com esta propriedade são chamados de **conjuntos convexos** conforme definidos na seção 2.3.

Usando as definições da seção 2.3, podemos enunciar e provar o seguinte teorema:

### Teorema 6.3

O conjunto  $M = \{x \in \mathbb{R}^n, \text{ tal que } Ax = b, x \geq 0\}$  é um conjunto convexo.

#### Prova:

Seja  $M = \{x \in \mathbb{R}^n, \text{ tal que } Ax = b, x \geq 0\}$  a região viável de um POL. Suponha que  $x'$  e  $x'' \in M$  são duas soluções viáveis e considere que o ponto  $x \in [x' \ x'']$ , ou seja,  $x = (1 - \alpha)x' + \alpha x''$  para algum  $\alpha \in [0 \ 1]$ .

Mostremos que  $x \in M$ .

De fato, escrevemos

$$Ax = A((1 - \alpha)x' + \alpha x'') = (1 - \alpha)Ax' + \alpha Ax'' = (1 - \alpha)b + \alpha b = b$$

Além disso, cada uma das coordenadas do vetor  $x$  é dada por:

$$x_i = (1 - \alpha)x'_i + \alpha x''_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, n$$

uma vez que  $\alpha \geq 0$  e  $(1 - \alpha) \geq 0$ ,  $x_i \geq 0$ ,  $x'_i \geq 0$ ,  $x''_i \geq 0$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

Portanto  $x \geq 0$ , o que prova que se  $x'$  e  $x'' \in M$ , então o segmento formado por  $x'$  e  $x''$ , isto é,  $[x' \ x''] \subset M$  e o conjunto  $M$  é convexo.

Observamos ainda que se um POL tiver mais de uma solução, então possui infinitas soluções ótimas.

De fato, suponha que  $x^*$  e  $\bar{x}$  sejam duas soluções ótimas de um POL, portanto temos que  $Z(x^*) = Z(\bar{x})$ .

Mostremos que qualquer ponto  $x$  no segmento de reta que liga  $x^*$  e  $\bar{x}$  de  $M$  é também uma solução ótima do POL, ou seja, se  $x \in [x^* \ \bar{x}]$  é uma solução viável, temos que:

$$\begin{aligned} Z(x) &= c^t x \\ &= c^t ((1 - \alpha)x^* + \alpha \bar{x}) \\ &= c^t x^* - c^t \alpha x^* + c^t \alpha \bar{x} \\ &= c^t x^* - \alpha c^t x^* + \alpha c^t \bar{x} \\ &= Z(x^*) - \alpha Z(x^*) + \alpha Z(\bar{x}) \\ &= Z(x^*) + \alpha (Z(\bar{x}) - Z(x^*)) \\ &= Z(x^*), \text{ com } \alpha \in [0 \ 1]. \end{aligned}$$

Este resultado demonstra o teorema a seguir:

### Teorema 6.4

Se a função objetivo  $Z(x)$  assume valor ótimo em mais de um vértice, então esta assume infinitas soluções ótimas.

## 6.7 Método Simplex

O Método Simplex é um procedimento algébrico, iterativo e eficiente para obter a solução de um POL em um número finito de iterações.

Com isto é possível a sua codificação em programas computacionais possibilitando a solução de problemas contendo centenas ou milhares de variáveis.

É uma técnica muito utilizada para resolução de problemas lineares de otimização na forma geral:

$$\text{Min } Z(x) = \sum_{j=1}^n c_j x_j,$$

$$\text{sujeito a } \begin{cases} Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases}$$

Para mostrar o desenvolvimento do Método Simplex, consideramos o exemplo ilustrado na seção 6.4:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= -x_1 - 2x_2 \\ \text{sujeito a } &\begin{cases} 3x_1 + x_2 \leq 3 \\ -x_1 + x_2 \leq 2 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \end{cases} \end{aligned}$$

o qual pode ser escrito na forma padrão como:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= -x_1 - 2x_2 \\ \text{sujeito a } &\begin{cases} 3x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ -x_1 + x_2 + x_4 = 2 \\ x_j \geq 0, j = 1, 2, 3, 4 \end{cases} \end{aligned}$$

Analogamente aos sistemas de equações lineares, podemos apresentar um POL em forma de matriz aumentada, chamado de **quadro simplex** conforme a tabela a seguir:

### Quadro simplex

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_3$	3	1	1	0	3
$x_4$	-1	1	0	1	2
	-1	-2	0	0	$Z(x) - 0$

Neste quadro temos explicitamente as variáveis  $x_3$  e  $x_4$ , em termos das variáveis  $x_1$  e  $x_2$ , pois as colunas das variáveis  $x_3$  e  $x_4$  formam a matriz identidade. Além disso, a função objetivo está explicitamente em termos das variáveis  $x_1$  e  $x_2$ , pois os coeficientes de  $x_3$  e  $x_4$  na função objetivo são nulos.

Note também que, o termo independente é não negativo ( $b \geq 0$ ) assim, se definirmos as variáveis básicas  $x_B$  e as variáveis não-básicas  $x_N$  temos que:

$$x_B = \begin{bmatrix} x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}$$
$$x_N = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

e podemos ler diretamente no quadro simplex a solução básica, em que

$$x_N = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad x_B = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

e o valor da função objetivo é  $Z(\bar{x}) = 0$ .

Definimos os conjuntos das variáveis básicas e variáveis não-básicas por  $I = \{x_3, x_4\}$  e  $J = \{x_1, x_2\}$  respectivamente.

A função objetivo escrita em termos das variáveis não-básicas permite-nos avaliar prontamente se a solução básica é ótima, se os coeficientes das variáveis não-básicas são não negativos, então a solução é ótima.

Neste caso, temos que a função objetivo  $Z(x) = -x_1 - 2x_2$ , indica que soluções viáveis alternativas com valores menores para a função objetivo podem ser obtidas, por aumentar o valor da variável  $x_1$  ou  $x_2$ . Apenas uma delas é aumentada de valor, o que caracteriza o Método Simplex.

Como o coeficiente da variável  $x_2$  da função objetivo é o mais negativo, esta será aumentada, dizemos neste caso que a variável  $x_2$  entra na base, isto é, a coluna  $x_2$  entra na base.

Deverá deixar de ser básica, dizemos 'sair da base' aquela variável que primeiro se anula com o crescimento da variável  $x_2$ , que 'entra na base'.

### Primeiro quadro simplex

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_3$	3	1	1	0	3
$x_4$	-1	1	0	1	2
	-1	-2	0	0	$Z(x) - 0$

Considerando  $x_1 = 0$ , o primeiro quadro simplex nos permite escrever as variáveis básicas em termos da variável que entra na base e, impondo-se a não negatividade, segue que:

$$x_3 = 3 - x_2 \geq 0 \rightarrow x_2 \leq 3$$

$$x_4 = 2 - x_2 \geq 0 \rightarrow x_2 \leq 2$$

Assim, o maior valor para variável  $x_2$  é dado por  $x_2 = 2$ .

Com este valor máximo para  $x_2$  a variável  $x_4$  é a que se anula primeiro e portanto 'sai da base'.

Podemos expressar as variáveis básicas em termos das variáveis não-básicas, bem como expressar a função objetivo em termos das variáveis não-básicas, por meio de uma simples operação de pivotamento em torno do elemento (2, 2) do primeiro quadro simplex, transformando a coluna de  $x_2$  em uma coluna da matriz identidade, conforme indicado a seguir, e assim obtemos o segundo quadro simplex.

Neste caso, obtemos um novo quadro simplex, no qual, o conjunto das variáveis básicas e das variáveis não-básicas é dado por  $I = \{x_3, x_2\}$  e  $J = \{x_1, x_4\}$ .

### Segundo quadro simplex

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_3$	4	0	1	-1	1
$x_2$	-1	1	0	1	2
	-3	0	0	2	$Z(x) + 4$

A partir do segundo quadro simplex, lemos prontamente a solução básica dada por:

$$\bar{x}_B = \begin{bmatrix} \bar{x}_3 \\ \bar{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \bar{x}_N = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

e o valor da função objetivo  $Z(\bar{x}) = -4$ .

Além disso, como  $Z(x) + 4 = -3x_1 + 2x_4$ , podemos diminuir o valor da função objetivo, por aumentar o valor da variável  $x_1$ , isto é,  $x_1$  entra na base e quanto

maior o valor de  $x_1$ , menor será o valor da função objetivo.

Analogamente ao que fizemos na iteração anterior, retiramos do quadro simplex as variáveis básicas em função da variável  $x_1$ , que será aumentada de valor. Assim, temos:

$$x_3 = 1 - 4x_1 \geq 0 \rightarrow x_1 \leq \frac{1}{4}$$

$$x_2 = 2 + x_1 \geq 0 \rightarrow x_1 \text{ não é limitada}$$

Impondo-se a não negatividade sobre as variáveis básicas, determinamos o maior valor para a variável  $x_1$ , isto é,  $x_1 = \frac{1}{4}$ . Com este valor a variável  $x_3$  se anula e portanto sai da base.

Assim, temos um novo quadro simplex com  $I = \{x_1, x_2\}$ ,  $J = \{x_3, x_4\}$  e podemos escrever as variáveis básicas em termos das variáveis não-básicas, bem como a função objetivo em termos das variáveis não-básicas, por uma simples operação de pivotamento no elemento  $(1, 1)$ , do segundo quadro simplex.

### Terceiro quadro simplex

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_1$	1	0	1/4	-1/4	1/4
$x_2$	0	1	1/4	3/4	9/4
	0	0	3/4	5/4	$Z(x) + 19/4$

A partir do terceiro quadro simplex, temos imediatamente a solução básica dada por:

$$\bar{x}_B = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{9}{4} \end{bmatrix}, \quad \bar{x}_N = \begin{bmatrix} \bar{x}_3 \\ \bar{x}_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

e o valor da função objetivo dado por  $Z(\bar{x}) = -\frac{19}{4}$

Ainda, como  $Z(x) + \frac{19}{4} = \frac{3}{4}x_3 + \frac{5}{4}x_4$ , vemos que o aumento das variáveis  $x_3$  ou  $x_4$  faz aumentar o valor da função objetivo, portanto temos que a solução básica é uma solução ótima, isto é, temos:

$$x^* = \left(\frac{1}{4}, \frac{9}{4}, 0, 0\right)^t \quad \text{e} \quad Z(x^*) = -\frac{19}{4}.$$

O procedimento usado para resolver este exemplo simples é chamado de **Método Simplex**.

Estendemos agora o exemplo estudado para um problema geral de otimização e por simplicidade de notação, consideramos respectivamente os conjuntos das variáveis básicas e não-básicas representados por:

$$I = \{x_1, x_2, \dots, x_m\} \text{ e } J = \{x_{m+1}, \dots, x_n\} \quad \text{com} \quad m, n \in \mathbb{N}.$$

Suponha que,  $\hat{b}_i \geq 0, i = 1, \dots, m$  então o quadro simplex geral do problema de otimização é dado por:

### Quadro simplex geral 1

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$\dots$	$x_m$	$x_{m+1}$	$\dots$	$x_j$	$\dots$	$x_n$	$b$
$x_1$	1				$\hat{a}_{1,m+1}$	$\dots$	$\hat{a}_{1,j}$	$\dots$	$\hat{a}_{1,n}$	$\hat{b}_1$
$x_2$	0	1			$\hat{a}_{2,m+1}$	$\dots$	$\hat{a}_{2,j}$	$\dots$	$\hat{a}_{2,n}$	$\hat{b}_2$
$\vdots$			$\ddots$		$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$	$\vdots$
$x_m$	0	0		1	$\hat{a}_{m,m+1}$	$\dots$	$\hat{a}_{m,j}$	$\dots$	$\hat{a}_{m,n}$	$\hat{b}_m$
	0	0	0	0	$\hat{c}_{m+1}$	$\dots$	$\hat{c}_j$	$\dots$	$\hat{c}_n$	$Z - \hat{Z}$

Assim, a solução básica  $\hat{x} = b_i, i = 1, \dots, m$  e  $\hat{x}_j = 0, j = m + 1, \dots, n$  é viável, ou seja, um vértice da região viável.

### Teorema 6.5

Se  $\hat{c}_j \geq 0, j = m + 1, \dots, n$ , então a solução básica  $\hat{x} = (\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_m, 0, \dots, 0)$  é uma solução ótima.

**Prova:** (BREGALDA et al, 1986).

Caso exista, uma variável básica  $x_k$ , tal que  $\hat{c}_k < 0$ , então a função objetivo pode ser melhorada por aumentar a variável  $x_k$ , dizemos que a variável  $x_k$  entra na base, isto é, a coluna  $a_k$  entra na base e as demais variáveis não básicas mantêm-se com o valor nulo. Com isto, as variáveis básicas se alteram da seguinte forma:

$$\begin{aligned} x_1 &= \hat{b}_1 - \hat{a}_{1k}x_k \geq 0 \\ x_2 &= \hat{b}_2 - \hat{a}_{2k}x_k \geq 0 \\ &\vdots \\ x_m &= \hat{b}_m - \hat{a}_{mk}x_k \geq 0 \end{aligned}$$

e devem ser mantidas não-negativas para que a solução mantenha-se viável.

Se  $\hat{a}_{ik} \leq 0$ , então a variável  $x_k$  pode crescer sem que a desigualdade

$$x_i = \hat{b}_i - \hat{a}_{ik}x_k \geq 0$$

seja violada.

Se  $\hat{a}_{ik} > 0$ , então a variável  $x_k$  é limitada por:

$$x_k \leq \frac{\hat{b}_i}{\hat{a}_{ik}}$$

e portanto o maior valor que a variável  $x_k$  pode assumir é dado por:

$$x_k = \min \left\{ \frac{\hat{b}_i}{\hat{a}_{ik}}, \text{ tal que } \hat{a}_{ik} > 0 \right\} = \frac{\hat{b}_k}{\hat{a}_{rk}}.$$

Notamos que, com este valor para a variável  $x_k$ , a variável  $x_r$  se anula e dizemos que a variável  $x_r$  sai da base, isto é, a coluna  $a_r$  sai da base.

Assim, temos uma nova base, em que a variável  $x_k$  é trocada pela variável  $x_r$  e temos o novo conjunto formado pelas variáveis básicas e o conjunto formado pelas variáveis não básicas dados por:

$$I = \{x_1, \dots, x_k, \dots, x_m\},$$

$$J = \{x_{m+1}, \dots, x_r, \dots, x_n\},$$

com  $m, n \in \mathbb{N}$ .

O quadro simplex é obtido por uma operação de pivotamento no elemento  $\hat{a}_{rk}$  e, assim, obtemos o quadro simplex geral 2.

### Quadro simplex geral 2

$x_B$	$x_1$	...	$x_r$	...	$x_m$	$x_{m+1}$	...	$x_k$	...	$x_n$	$b$
$x_1$	1	...	$\hat{a}_{1r}$	...	0	$\hat{a}_{1,m+1}$	...	0	...	$\hat{a}_{1,n}$	$\hat{b}_1$
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
$x_k$	0	...	$\hat{a}_{rk}$	...	0	$\hat{a}_{r,m+1}$	...	1	...	$\hat{a}_{rn}$	$\hat{b}_r$
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$			0		$\vdots$	$\vdots$
$x_m$	0	...	$\hat{a}_{mr}$	...	1	$\hat{a}_{m,m+1}$	...	0	...	$\hat{a}_{m,n}$	$\hat{b}_m$
	0	...	$\hat{c}_r$	...	0	$\hat{c}_{m+1}$	...	0	...	$\hat{c}_n$	$Z - \hat{Z}$

Com os novos custos relativos calculados, isto é, os valores de  $\hat{c}_j$ , podemos aplicar o Teorema 6.5.

Se os custos relativos forem todos não negativos, então a solução básica

$$\hat{x} = (\hat{b}_1, \dots, 0, \dots, \hat{b}_m, 0, \dots, \hat{b}_k, \dots, 0)$$

é uma solução ótima.

Caso contrário, repetimos o procedimento e obtemos uma nova solução básica melhor, supondo que a solução viável básica não seja degenerada, isto é,  $\hat{b}_i > 0$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

### Algoritmo 6.1 - Método Simplex - Minimização

#### Fase I

Determine uma solução básica viável inicial, defina os conjuntos I e J das variáveis básicas e variáveis não básicas e escreva o quadro simplex.



## Fase II

1. Se todos  $\hat{c}_j \geq 0$ , para todo  $j$  não básico, então a solução básica é ótima.

**PARE.**

2. Determine  $k$  tal que  $\hat{c}_k = \min\{\hat{c}_j, j \text{ não básico}\}$ ,  $x_k$  entra na base.

3. Se  $\hat{a}_{ik} \leq 0, i = 1, \dots, m$ , então não existe solução ótima, a função objetivo  $Z(x) \rightarrow \infty$ .

**PARE**

**Senão** determine  $r$  tal que:

$$\frac{\hat{b}_i}{\hat{a}_{rk}} = \min\left\{\frac{\hat{b}_i}{\hat{a}_{ik}}, \text{ tal que } \hat{a}_{ik} > 0\right\}$$

' $x_r$  sai da base'.

4. Atualize o conjunto  $I, J$  das variáveis básicas e variáveis não básicas.

Atualize o quadro simplex por uma operação de pivotamento no elemento  $\hat{a}_{rk}$  e obtenha o novo quadro simplex com os novos conjuntos  $I, J$  e volte para o passo 1.

### Observação:

Para problemas de Otimização Linear do tipo maximização, o algoritmo anterior fica modificado apenas nos critérios de entrada de variáveis na base e no critério de otimalidade.

Assim, deve entrar na base, a variável com o maior custo relativo (coeficiente da função objetivo no quadro simplex) e, quando tivermos todos os custos relativos  $\hat{c}_j \leq 0$ , a presente solução básica viável é uma solução ótima, que maximiza a função objetivo.

## 6.8 Casos especiais

### a) Empate de variáveis para entrar na base

Esta escolha é arbitrária.

Por exemplo, se tivermos a função objetivo

$$\text{Min } Z(x) = -3x_1 - 3x_2 - x_3,$$

a variável  $x_1$  pode ser escolhida para entrar na base, ou a variável  $x_2$ .

Naturalmente, a variável  $x_3$  também poderia ser escolhida para entrar na base, pois seu coeficiente é negativo e faz decrescer a função objetivo.

### b) Empate na saída de variáveis da base

Esta escolha é também arbitrária, acarretando uma solução básica viável degenerada, isto é, uma ou mais das componentes da solução básica é nula, conforme exemplo a seguir:

#### Exemplo 6.3

Considere o seguinte POL:

$$\begin{aligned} \text{Max } Z(x) &= 4x_1 + x_2 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} 2x_1 + x_2 & \leq 2 \\ x_2 & \leq 2 \\ x_1 - x_2 & \leq 1 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \end{cases} \end{aligned}$$

cuja forma padrão é dada por:

$$\begin{aligned} \text{Max } Z(x) &= 4x_1 + x_2 + 0x_3 + 0x_4 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 & = 2 \\ x_2 + x_4 & = 2 \\ x_1 - x_2 + x_5 & = 1 \\ x_j \geq 0, j = 1, 2, \dots, 5 \end{cases} \end{aligned}$$

Aplicando o Método Simplex, temos o seguinte quadro:

#### Quadro simplex 6.3.1

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$b$
$x_3$	2	1	1	0	0	2
$x_4$	0	1	0	1	0	2
$x_5$	1	-1	0	0	1	1
	4	1	0	0	0	$Z(x)$

$$I = \{x_3, x_4, x_5\},$$

$$J = \{x_1, x_2\},$$

$$x = (0, 0, 2, 2, 1)^t \text{ e } Z(x) = 0.$$

Observando o quadro simplex, vemos que a variável  $x_1$  entra na base, pois  $\hat{c}_1 = 4$  é o maior coeficiente, uma vez que o problema é de maximização.

Para saber qual variável deixa a base, usamos o critério anterior, isto é,  $\min\{\frac{2}{2}, \frac{1}{1}\} = 1$ .

Assim, temos um empate e tanto a variável  $x_3$  como a variável  $x_5$  podem ser escolhidas para deixar a base.

i) Escolhendo a variável  $x_3$  para sair da base:

#### Quadro simplex 6.3.2

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$b$
$x_1$	1	1/2	1/2	0	0	1
$x_4$	0	1	0	1	0	2
$x_5$	0	-3/2	-1/2	0	1	0
	0	-1	-2	0	0	$Z(x) - 4$

$$I^* = \{x_1, x_4, x_5\},$$

$$J^* = \{x_2, x_3\},$$

$$x = (1, 0, 0, 2, 0)^t \text{ e } Z(x^*) = 4.$$

Neste caso, temos a solução ótima  $x^* = (1, 0, 0, 2, 0)^t$ , a qual é uma solução básica viável degenerada, pois a variável básica  $x_5 = 0$  e  $Z(x^*) = 4$ .

ii) Escolhendo a variável  $x_5$  para sair da base, obtemos o seguinte quadro simplex:

#### Quadro simplex 6.3.3

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$b$
$x_3$	0	3	1	0	-2	0
$x_4$	0	1	0	1	0	2
$x_1$	1	-1	0	0	1	1
	0	5	0	0	-4	$Z(x) - 4$

$$I = \{x_3, x_4, x_1\}, J = \{x_2, x_5\},$$

$$x = (1, 0, 0, 2, 0)^t \text{ e } Z(x) = 0.$$

Observe agora que, a condição de otimalidade não foi verificada, a variável  $x_2$  entra na base e, como  $\min\{\frac{0}{3}, \frac{2}{1}\} = 0$ , a variável  $x_3$  sai da base e desta forma o quadro simplex atualizado é dado por:

### Quadro simplex 6.3.4

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$b$
$x_2$	0	1	$1/3$	0	$-2/3$	0
$x_4$	0	0	$-1/3$	1	$2/3$	2
$x_1$	1	0	$1/3$	0	$1/3$	1
	0	0	$-5/3$	0	$-2/3$	$Z(x) - 4$

$$I^* = \{x_2, x_4, x_1\}, J^* = \{x_3, x_5\},$$

$$x^* = (1, 0, 0, 2, 0)^t \text{ e } Z(x^*) = 4$$

Desta forma, temos a solução ótima  $x^* = (1, 0, 0, 2, 0)^t$  e  $Z(x^*) = 4$ .

#### Observações:

1. Quando entramos com a variável  $x_1$  na base e saímos com  $x_3$ , obtivemos a solução ótima em uma iteração:

$$x^* = (1, 0, 0, 2, 0)^t \text{ e } Z(x^*) = 4, \text{ em que } I^* = \{x_1, x_4, x_5\}, J^* = \{x_2, x_3\};$$

2. Quando escolhemos  $x_5$  para sair da base, obtivemos a solução ótima em duas iterações:

$$\text{i) } x = (1, 0, 0, 2, 0)^t \text{ e } Z(x) = 4, \text{ em que } I = \{x_3, x_4, x_1\} \text{ e } J = \{x_2, x_5\};$$

$$\text{ii) } x^* = (1, 0, 0, 2, 0)^t \text{ e } Z(x^*) = 4, \text{ em que } I^* = \{x_2, x_4, x_1\} \text{ e } J^* = \{x_3, x_5\}.$$

O valor de  $Z(x)$  não aumentou de uma iteração para outra, embora a base tenha sido mudada.

Na realidade, a solução na primeira iteração era ótima, porém as condições de otimalidade não foram verificadas.

Isto ocorre porque a solução é degenerada, caso contrário a variável  $x_2$  teria um valor positivo e consequentemente a função objetivo crescido.

3. Em caso de degeneração, pode ocorrer o fenômeno da ciclagem, isto é, bases serem repetidas indefinidamente.

Este fenômeno é raro e erros de arredondamento, inevitáveis nos cálculos, tendem a evitar ciclos.

Quando não há degeneração, a função objetivo sempre aumenta (maximização) de modo que uma mesma base nunca se repete.

Como o número de soluções básicas é finito, concluímos que Método Simplex é finito e é um dos principais métodos de resolução de um POL.

### c) Problemas lineares com infinitas soluções

Conforme descrevemos anteriormente, no Teorema 6.4, um POL pode ter infinitas soluções.

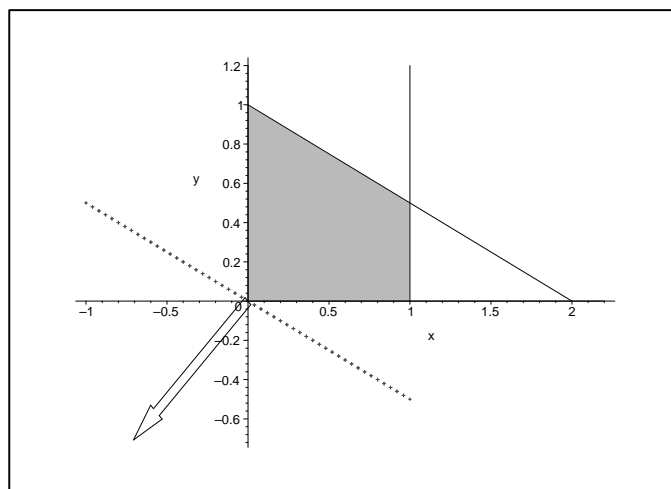
O Método Simplex reconhece este caso, quando no quadro ótimo, de uma solução não-degenerada, aparece  $\hat{c}_j = 0$ , para algum índice  $j$  não básico, conforme o exemplo a seguir:

#### Exemplo 6.4

Considere o seguinte POL:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= -x_1 - 2x_2 \\ \text{sujeito a } &\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 \leq 4 \\ x_1 \leq 1 \\ x_1 \geq 0 \\ x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Graficamente temos a Figura 6.3, em que observamos dois vértices ótimos, que são os pontos  $A = (0, 1)$  e  $B = (1, \frac{1}{2})$ .



**Figura 6.3:** Problema com infinitas soluções

Portanto, qualquer ponto no segmento que liga estes dois vértices ótimos, é também uma solução ótima para o problema, conforme o Teorema 6.4.

Aplicando o Método Simplex para o problema na forma padrão temos o seguinte quadro inicial:

### Quadro simplex 6.4.1

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_3$	2	4	1	0	4
$x_4$	1	0	0	1	1
	-1	-2	0	0	$Z(x)$

$$I = \{x_3, x_4\}, \quad J = \{x_1, x_2\},$$

$$x = (0, 0, 4, 1)^t \quad Z(x) = 0.$$

A variável  $x_2$  entra na base e, como  $\min\{\frac{4}{4}\} = 1$ , a variável  $x_3$  sai da base, levando ao seguinte quadro simplex:

### Quadro simplex 6.4.2

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_2$	1/2	1	1/4	0	1
$x_4$	1	0	0	1	1
	0	0	1/2	0	$Z(x) + 2$

$$I^* = \{x_2, x_4\}, \quad J^* = \{x_1, x_3\},$$

$$x^* = (0, 1, 0, 1)^t, \quad Z(x^*) = -2.$$

Desta forma, temos a solução ótima  $x^* = (0, 1, 0, 1)^t$  e  $Z(x^*) = -2$ , que é o vértice A na região viável da Figura 6.3 e note que  $\hat{c}_1 = 0$ .

### Observação:

Para obter o outro vértice na região viável da Figura 6.3, basta no quadro anterior entrar com a variável  $x_1$  na base e, como  $\min\{\frac{1}{\frac{1}{2}}, 1\} = 1$ , temos que a variável  $x_4$  sai da base, levando ao seguinte quadro simplex:

### Quadro simplex 6.4.3

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_2$	0	1	1/4	-1/2	1/2
$x_1$	1	0	0	1	1
	0	0	1/2	0	$Z(x) + 2$

Desta maneira, temos:

$$I^* = \{x_2, x_1\}, \quad J^* = \{x_3, x_4\},$$

$$x^* = (1, \frac{1}{2}, 0, 0)^t \quad e \quad Z(x^*) = 2.$$

Esta solução ótima corresponde ao vértice B na Figura 6.3.

**d) Problema ilimitado:**  $Z(x) \rightarrow -\infty$

Quando aplicamos o Método Simplex e, em uma determinada iteração simplex, nenhuma restrição impedir o crescimento da variável a entrar na base, temos um problema ilimitado, ou seja, podemos diminuir indefinidamente o valor de  $Z(x)$ , ou seja,  $Z(x) = -\infty$ .

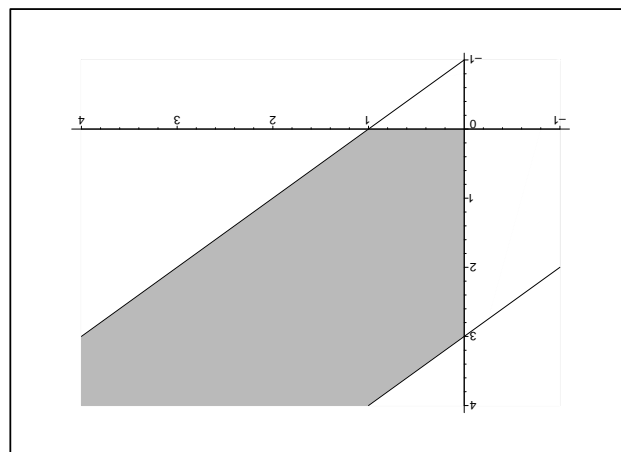
O exemplo a seguir ilustra este caso.

**Exemplo 6.5**

Considere o seguinte POL

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= -3x_1 - 3x_2 \\ \text{sujeito a } &\begin{cases} 2x_1 - 2x_2 \leq 2 \\ -x_1 + x_2 \leq 3 \\ x_1 \geq 0 \\ x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

cuja representação gráfica é dada pela Figura 6.4:



**Figura 6.4:** Problema ilimitado

Podemos observar na Figura 6.4 que o valor de  $Z(x)$  diminui indefinidamente na medida em que  $x_1$  e  $x_2$  crescem. Portanto,  $Z(x) \rightarrow -\infty$ , ou seja, temos um problema ilimitado como podemos ver graficamente.

De fato, considerando o quadro simplex a seguir:

### Quadro simplex 6.5.1

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_3$	2	-2	1	0	2
$x_4$	-1	1	0	1	3
	-3	-3	0	0	$Z(x)$

$$I = \{x_3, x_4\}, J = \{x_1, x_2\},$$

$$x = (0, 0, 2, 3)^t \text{ e } Z(x) = 0.$$

Aplicando o Método Simplex, temos:

A variável  $x_1$  entra na base e, como  $\min \{\frac{2}{2}\} = 1$ , temos que a variável  $x_3$  sai da base, levando ao quadro simplex 6.5.2:

### Quadro simplex 6.5.2

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$b$
$x_1$	1	-1	1/2	0	1
$x_4$	0	0	1/2	1	4
	0	-6	3/2	0	$Z(x) + 3$

$$I = \{x_1, x_4\}, J = \{x_2, x_3\},$$

$$x = (1, 0, 0, 4)^t \text{ e } Z(x) = -3.$$

Observando o quadro simplex, vemos que a variável  $x_2$  entra na base e que nenhuma restrição limita o crescimento desta variável, pois  $\hat{a}_{i2} \leq 0$  para todo  $i$ . Ou seja, escrevendo as variáveis básicas em função das variáveis não básicas e impondo a condição de não negatividade temos:

$$x_1 = 1 + x_2 - \frac{1}{2}x_3 \geq 0, \quad x_4 = 4 + 0x_2 - \frac{1}{2}x_3 \geq 0$$

Fixando-se a variável  $x_3 = 0$ , temos que a variável  $x_2$  pode crescer indefinidamente, sem violar estas equações e, desta forma,  $Z(x)$  decresce indefinidamente, ou seja,  $Z(x) \rightarrow -\infty$ .

## 6.9 Fase I e Fase II do Método Simplex

Considere o seguinte problema de Otimização Linear:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= c^t x \\ \text{sujeito a } &\begin{cases} Ax \leq b \\ x \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$



Acrescentando as variáveis de folga, temos o problema na forma padrão:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= c^t x \\ \text{sujeito a } &\begin{cases} Ax + I\bar{x} = b, \\ x \geq 0, \bar{x} \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

O problema acima encontra-se na forma padrão e temos uma base óbvia na forma da matriz identidade para iniciar o Método Simplex.

Neste caso, escolhemos  $I = \{\bar{x}\}$  e  $J = \{x\}$  e o Método Simplex pode ser aplicado, como fizemos nos exemplos anteriores.

Quando o problema dado estiver na forma padrão e não tivermos uma base óbvia para iniciar o Método Simplex, podemos aplicar um procedimento chamado Fase I para determinarmos uma solução básica viável, caso exista.

Suponha que o POL tenha o seguinte conjunto de restrições:

**i)**  $Ax = b, x \geq 0$

Caso, a matriz  $A$  não possua uma base óbvia, na forma da matriz identidade, acrescentamos **variáveis artificiais**  $x^a$  no sistema de equações **i)** obtendo:

**ii)**  $Ax + Ix^a = b, \quad x \geq 0, \quad x^a = 0.$

Com o acréscimo das variáveis artificiais, introduzimos uma matriz identidade que é a base inicial para começar o Método Simplex, isto é, temos  $I = \{x^a\}$  e  $J = \{x\}$ . Assim, uma solução básica viável inicial é dada por  $x^a = b$  e  $x = 0$ .

Uma solução de **ii)** é uma solução de **i)** se e somente se  $x^a = 0$  pois:

$$Ax = b \Leftrightarrow Ax + x^a = b$$

com  $x^a = 0$ .

### Função objetivo artificial

Com a introdução das variáveis artificiais o problema original foi modificado. Necessitamos anular estas variáveis para se obter uma solução do problema original, o que pode ser conseguido por definir-se uma função objetivo com esta finalidade.

Consideramos uma função objetivo artificial formada pela soma das variáveis artificiais e escrevemos o seguinte problema artificial:

### Problema artificial

$$\begin{aligned} \text{Min } W(x, x^a) &= \sum_{i=n+1}^{n+m} x_i^a \\ \text{sujeito a } &\begin{cases} Ax + Ix^a = b \\ x \geq 0, \quad x^a \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

### Algumas considerações:

**a)** O problema artificial é um problema de Otimização Linear, cuja solução básica viável inicial é  $x = 0$  e  $x^a = b$ , obtida com  $I = \{x^a\}$  e  $J = \{x\}$ .

Para se escrever o quadro simplex com esta partição básica é necessário operações de pivotamento para anular os coeficientes das variáveis artificiais, os quais são inicialmente todos iguais a 1.

**b)** Como  $x_i^a \geq 0$ , temos que  $\min W(x, x^a) \geq 0$ . Caso  $W(x^*, x^{a*}) = 0$ , temos, necessariamente que  $x^{a*} = 0$ , para todo  $i = n + 1, \dots, n + m$ .

**c)** Aplicando o Método Simplex no problema artificial, quando tivermos as variáveis artificiais  $x^a = 0$  como variáveis não básicas, significa que outra base formada pelas variáveis legítimas do problema original é detectada e, portanto, temos uma base para iniciar o Método Simplex no problema original.

**d)** O problema artificial é chamado Fase I e o retorno ao problema original, depois de determinada uma solução básica viável, é chamado Fase II do método.

**e)** Se a solução ótima do problema auxiliar  $W(x^*, x^{a*}) \neq 0$ , então não foi possível determinar uma base que excluísse as variáveis artificiais. Concluimos, portanto, que o problema original **i)** é inviável.

### Exemplo 6.6

Considere o seguinte POL:

$$\begin{aligned} \text{Max } Z(x) &= -x_1 + x_2 \\ \text{sujeito a } \left\{ \begin{array}{ll} -x_1 + x_2 & \geq 1 \\ x_1 & \geq 1 \\ x_2 & \leq 3 \\ x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0 \end{array} \right. \end{aligned}$$

Escrevendo o POL na forma padrão, temos:

$$\begin{aligned} \text{Max } Z(x) &= -x_1 + x_2 \\ \text{sujeito a } \left\{ \begin{array}{lll} -x_1 + x_2 - x_3 & = & 1 \\ x_1 & - x_4 & = 1 \\ x_2 & + x_5 & = 3 \\ x_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, 5 \end{array} \right. \end{aligned}$$

Como não temos uma base óbvia para iniciar o Método Simplex, acrescentamos variáveis artificiais  $x_6$  e  $x_7$  (por simplicidade de notação, abandonamos o índice "a" nas variáveis artificiais) nas duas primeiras equações, para obter uma

base inicial formada pelas colunas  $a_6$ ,  $a_7$  e  $a_5$  e, conseqüentemente, uma solução básica viável inicial, para o problema artificial como segue:

### Fase I : Problema artificial

$$\begin{aligned} \text{Min } W(x) &= x_6 + x_7 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} -x_1 + x_2 - x_3 & + x_6 & = 1 \\ x_1 & - x_4 & + x_7 & = 1 \\ & x_2 & + x_5 & = 3 \\ x_j \geq 0, & j = 1, \dots, 7 \end{cases} \end{aligned}$$

Aplicando o Método Simplex, temos:

#### Quadro simplex 6.6.1

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$	$x_7$	b
$x_6$	-1	1	-1	0	0	1	0	1
$x_7$	1	0	0	-1	0	0	1	1
$x_5$	0	1	0	0	1	0	0	3
	0	0	0	0	0	1	1	$W(x)$

Atualizando a função objetivo artificial  $W(x)$  em função das variáveis não básicas, isto é, fazendo operações de pivotamento para anular os coeficientes das variáveis artificiais, temos o seguinte quadro simplex:

#### Quadro simplex 6.6.2

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$	$x_7$	b
$x_6$	-1	1	-1	0	0	1	0	1
$x_7$	1	0	0	-1	0	0	1	1
$x_5$	0	1	0	0	1	0	0	3
	0	-1	1	1	0	0	0	$W(x) - 2$

$$I = \{x_6, x_7, x_5\}, J = \{x_1, x_2, x_3, x_4\},$$

$$x = (0, 0, 0, 0, 3, 1, 1)^t \quad \text{e} \quad W(x) = 2$$

A variável  $x_2$  entra na base e, como  $\min \left\{ \frac{1}{1}, \frac{3}{1} \right\} = 1$ , a variável  $x_6$  sai da base e temos o seguinte quadro simplex:

### Quadro simplex 6.6.3

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$	$x_7$	$b$
$x_2$	-1	1	-1	0	0	1	0	1
$x_7$	1	0	0	-1	0	0	1	1
$x_5$	0	0	1	0	1	-1	0	2
	-1	0	0	1	0	1	0	$W(x) - 1$

$$I = \{x_2, x_7, x_5\}, J = \{x_1, x_3, x_4, x_6\},$$

$$x = (0, 1, 0, 0, 2, 0, 1)^t \quad e \quad W(x) = 1.$$

A variável  $x_1$  entra na base e, como  $\min \{\frac{1}{1}, \frac{2}{1}\} = 1$ , a variável  $x_7$  sai da base e temos o seguinte quadro simplex:

### Quadro simplex 6.6.4

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$	$x_7$	$b$
$x_2$	0	1	-1	-1	0	1	1	2
$x_1$	1	0	0	-1	0	0	1	1
$x_5$	0	0	1	1	1	-1	-1	1
	0	0	0	0	0	1	1	$W(x) - 0$

$$I^* = \{x_2, x_1, x_5\}, J^* = \{x_3, x_4, x_6, x_7\}$$

$$x^* = (1, 2, 0, 0, 1, 0, 0)^t \quad e \quad W(x^*) = 0$$

Desta forma, chegamos ao final da **Fase I** do Método Simplex e uma nova base formada pelas variáveis legítimas é identificada e, portanto, temos uma solução básica viável.

Retornamos ao problema original e procedemos com a Fase II do Método Simplex, como segue:

### Fase II

Esta fase consiste em abandonarmos as variáveis artificiais e função objetivo artificial. Tomando a base no final da Fase I, retomamos o problema original, com a função objetivo original, sendo necessárias operações de pivotamento para anular os coeficientes das variáveis básicas e obter o quadro simplex a seguir:

### Quadro simplex 6.6.5

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$b$
$x_2$	0	1	-1	-1	0	2
$x_1$	1	0	0	-1	0	1
$x_5$	0	0	1	1	1	1
	-1	1	0	0	0	$Z(x)$

Em seguida, atualizando a função objetivo original  $Z(x)$  em função das variáveis não básicas, temos o seguinte quadro simplex:

### Quadro simplex 6.6.6

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$b$
$x_2$	0	1	-1	-1	0	2
$x_1$	1	0	0	-1	0	1
$x_5$	0	0	1	1	1	1
	0	0	1	0	0	$Z(x) - 1$

$$I = \{x_2, x_1, x_5\}, J = \{x_3, x_4\}, x = (1, 2, 0, 0, 1)^t \text{ e } Z(x) = 1.$$

Como o problema original é de maximização, a variável  $x_3$  entra na base e, como  $\min \left\{ \frac{1}{1} \right\} = 1$ , a variável  $x_5$  sai da base e temos o seguinte quadro simplex:

### Quadro simplex 6.6.7

$v_B$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$b$
$x_2$	0	1	0	0	1	3
$x_1$	1	0	0	-1	0	1
$x_3$	0	0	1	1	1	1
	0	0	0	-1	-1	$Z(x) - 2$

Como todos os custos relativos  $\hat{c}_j \leq 0$ , temos que a solução básica viável obtida é ótima, isto é, temos:

$$I^* = \{x_2, x_1, x_3\}, J^* = \{x_4, x_5\}$$

$$x^* = (1, 3, 1, 0, 0)^t \text{ e } Z(x^*) = 2.$$

## 6.10 Problemas propostos

1. **Escrevendo um POL na forma padrão:** Escreva o seguinte POL na forma padrão

$$\begin{aligned} \text{Max } Z(x) &= 3x_1 - 4x_2 - x_3 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3x_3 + x_4 \leq -4 \\ x_1 + 3x_2 - x_3 + 2x_4 \geq 6 \\ 2x_1 + 4x_2 - x_3 + x_4 = 0 \\ x_1 \geq 0, x_2 \text{ livre}, x_3 \leq 0, x_4 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

2. **Solução ótima de um POL:** Considere o seguinte POL:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x_1, x_2) &= -3x_1 - 5x_2 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 & \geq 18 \\ x_1 & \leq 4 \\ x_2 & \leq 6 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

- a) Escreva o POL na forma padrão;  
b) Determine a solução ótima do POL utilizando o método gráfico;  
c) Resolva o POL utilizando o Método Simplex.
3. **Solução ótima de um POL:** Considere o seguinte POL

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= -x_1 - 2x_2 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} 3x_1 + x_2 & \leq 3 \\ -x_1 + x_2 & \leq 2 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

- a) Escreva o POL na forma padrão;  
b) Determine a solução do POL utilizando o método gráfico, identificando todos os vértices da região de viabilidade;  
c) Resolva o POL utilizando o Método Simplex.
4. **Modelagem Matemática de um POL:** Um lavrador cultiva continuamente dois tipos de alimentos, um alimento  $A_1$  com lucro de R\$150.00 por arroba e outro  $A_2$  com lucro de R\$100.00 por cada arroba vendida. Sabendo-se que o produtor dedica diariamente 2 horas para produzir  $A_1$  e de 3 horas para produzir  $A_2$ , formule um modelo de Otimização Linear que maximize o lucro do lavrador se ele pode investir um tempo de 120 horas semanais para

produzir esses alimentos se a demanda semanal de  $A_1$  é 40 arrobas e de  $A_2$  é de 30 arrobas.

5. **Solução ótima de um POL:** Considere o seguinte POL:

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x) &= -2x_1 + 4x_2 \\ \text{sujeito a } &\begin{cases} 4x_1 - 8x_2 & \leq 8 \\ x_1 + x_2 & \leq 4 \\ x_2 & \leq 3 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Determine a solução ótima do problema dado graficamente, identificando todos os vértices da região de viabilidade.

6. **Modelagem Matemática de um POL:** Deseja-se produzir 200 kg de uma liga metálica contendo 30% de chumbo, 30% de zinco e 40% de estanho.

Sabendo-se que no mercado são encontradas quatro misturas com composições e preços conforme a Tabela de dados:

**Tabela de dados**

Misturas	1	2	3	4	Desejado %
% Chumbo	20	20	50	30	30
% Zinco	10	20	30	50	30
%Estanho	70	60	20	20	40
Custo(UM/kg)	60	50	70	20	

Formule um modelo matemático de Otimização Linear para obter a liga metálica com o menor custo possível.

Sugestão: Defina  $x_i$  a quantidade (kg) da mistura  $i$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$  utilizada na fabricação da liga.

# UNIDADE 7

Ferramentas computacionais





## 7.1 Introdução as ferramentas computacionais

Na maioria dos problemas ambientais é necessário a realização de um grande número de cálculos e, muitos deles não possuem solução analítica de modo que a utilização de métodos numéricos e consequentemente o uso das ferramentas computacionais se torna imprescindível.

Neste sentido, os softwares computacionais livres como **Octave**<sup>1</sup>, **Scilab**<sup>2</sup>, **wxMaxima**<sup>3</sup> ou os softwares de autoria como **MatLab**<sup>4</sup>, **Maple**<sup>5</sup> ou **Mathematica**<sup>6</sup> são fáceis de serem utilizados nos cálculos aritméticos com números, matrizes, sistemas de equações algébricas, cálculos simbólicos etc. e podem nos auxiliar muito na resolução de problemas ambientais, antes mesmo de se fazer uma programação numa linguagem científica tipo C++ ou um software específico para cada tópico.

Os dados observados ou obtidos de experimentos podem ser tratados com os softwares computacionais geométricos ou gráficos disponíveis como o **Geogebra**<sup>7</sup>, **Winplot**<sup>8</sup> ou outros.

Na maioria dos softwares computacionais, principalmente no ambiente do Octave ou MatLab (VENDRAMETTO JR., C. E. & ARENALES, 2000) indicamos os operadores lógicos ou relacionais em ordem de precedência mais alta são os parênteses, em seguida exponenciação, lógica NOT (˜) e as operações aritméticas com números

- ^ potenciação
- ! fatoração
- \* multiplicação
- / divisão direta
- \ (barra invertida) indica a divisão indireta.
- + adição ou
- subtração

Os operadores relacionais utilizados são: <, >, >=, <=, ==, , =, a lógica

---

<sup>1</sup> <http://www.gnu.org/software/octave>

<sup>2</sup> <http://www.scilab.org>

<sup>3</sup> <http://sourceforge.net/projects/wxmaxima/>

<sup>4</sup> [www.matworks.com.br](http://www.matworks.com.br)

<sup>5</sup> <http://www.maplesoft.com>

<sup>6</sup> <http://www.wolfram.com>

<sup>7</sup> [www.geogebra.org](http://www.geogebra.org)

<sup>8</sup> <http://math.exeter.edu/rparris>

AND (&) e a lógica OR (|).

Se duas ou mais operações estiverem na mesma ordem de precedência, a operação mais a esquerda é executada primeiro, depois as demais vão sendo resolvidas uma a uma até encontrar a operação mais a direita.

Quando utilizamos o símbolo % numa linha ou após um comando queremos indicar um comentário.

O ; (ponto e vírgula) indica que o comando é executado e o seu resultado fica guardado, mas ele não é mostrado na tela.

## 7.2 Cálculos aritméticos e gráficos

Alguns modelos de problemas ambientais apresentam soluções analíticas podendo exigir muitos cálculos ou mesmo podem não apresentar soluções analíticas de modo que surge a necessidade de se utilizar métodos numéricos e ferramentas computacionais.

Definimos variáveis ou parâmetros com o comando de atribuição no Octave (e também na maioria dos softwares eventualmente com poucas modificações) como:

```
H = 30 % nome da variável = valor
```

Obtemos como resposta

```
H =
```

```
30
```

O símbolo >> aparece na linha inicial aguardando o comando a ser executado. Após digitarmos um comando se colocarmos ; (ponto e vírgula) no final o resultado não aparecerá na tela, mas fica armazenado e quando precisamos dele, o chamamos pelo nome atribuído a ele. Realizamos operações aritméticas com

```
Ai = 50^2 * 1.85/2 - 2 * H * 20
```

```
Ai =
```

```
1118
```

Os comandos são executados diretamente na janela do programa, em geral na ordem em que são digitados, mas quando se tem um número muito grande deles a serem executados em série e encadeados logicamente entre si constituindo um programa é conveniente criar um procedimento, rotina ou programa chamado

de arquivo.m

```
clear % limpa as variáveis que estiverem na área de trabalho do Octave  
ou Matlab
```

```
clc % limpa a tela
```

Para calcular o volume d'água  $V$  de uma caixa de abastecimento em função da altura  $h$  de uma boia. Como é necessário vários comandos para fazer os cálculos dos valores de uma função editamos um arquivo.m. Assim caso sejam necessárias modificações é só abrí-lo com o editor, modificá-lo, salvá-lo e executá-lo novamente.

Considere uma caixa d'água formada por um cilindro de raio  $r = 10$  m e altura 20 m e na sua parte superior é um tronco de cone invertido de raio maior igual a 24 m e altura igual a 15 m.

A função volume d'água  $V$  quando a boia esta numa altura  $h$  é dada por:

$$V = \begin{cases} \pi 10^2 h & 0 \leq h \leq 20 \\ \pi 10^2 20 + 1/3 \pi (h - 20)(20^2 - 12r_h + r_h^2) & 20 < h \leq 29, \end{cases}$$

em que  $h$  é a altura da boia,  $r_h$  é o raio do tronco do cone no nível d'água quando ela está a uma altura do solo  $h$ .

Para  $20 < h \leq 29$  o volume de água da caixa é igual ao volume do cilindro mais o do tronco de cone de altura  $h - 20$  dado por:

$$V = \pi * 10^2 * 20 + 1/3 * \pi * (h - 20)(20^2 - 12 * r_h + r_h^2),$$

em que  $r_h = 10^2 + 14/9 * (h - 20)$

Editamos um pequeno programa vdagua.m

```
function v = vdagua(h)
```

```
if h < 20
```

```
v = pi * 10^2 * h;
```

```
else
```

```
r_h = 10 + 14 * (h - 20)/9;
```

```
v = pi * 10^2 * 20 + pi * (h - 20) * (10^2 + 10 * r_h + r_h^2)/3;
```

```
end
```

Então é só chamar o valor da função vdagua num ponto  $h$  (altura) diretamente do diretório em que o arquivo vdagua.m foi salvo e obtemos os seguintes resultados:

```
>> vdagua(0) % para h=0
```

```
ans =
```

```
0
```

```
>> vdagua(10) % para h = 10
```

```
ans =
```

```
3.1416e+003
```

Aqui a notação que obtivemos e+003 corresponde a  $10^3$ .

```
>> vdagua(20) % para h = 20
```

```
ans =
```

```
6.2832e+003
```

```
>>vdagua(29) % para h = 29
```

```
ans =
```

```
1.4916e+004
```

### 7.3 Sequências, funções e gráficos

É conveniente representar um conjunto de dados graficamente. Em duas dimensões podemos utilizar o Octave (ou Matlab, Geogebra ou Winplot) para plotar os gráficos dos dados de um problema ou de uma função.

Para fazer o gráfico de uma sequência de dados observados no plano ( $n \times x$ ) definimos:

```
n = 1:1:N % sequência dos números de 1 a N
```

```
x = [x_1 x_2 ... x_n] % sequência dos números dados de  $x_1$  a  $x_n$ ,
```

que podem ser espaçados ou seguidos de vírgula entre eles.

```
plot(n, x) % gráfico bidimensional dos dados
```

```
legend( 'Recursos naturais ') % opções gráficas de legenda
```

```
xlabel('n') % opção de nomear o eixo x
```

```
ylabel('p') % opção de nomear o eixo y
```

```
grid on % é uma opção para deixar a malha na janela gráfica
```

Considere os dados

```
t = 1:72;
```

% indicando o tempo em horas desde 1 até 72 (horas) e

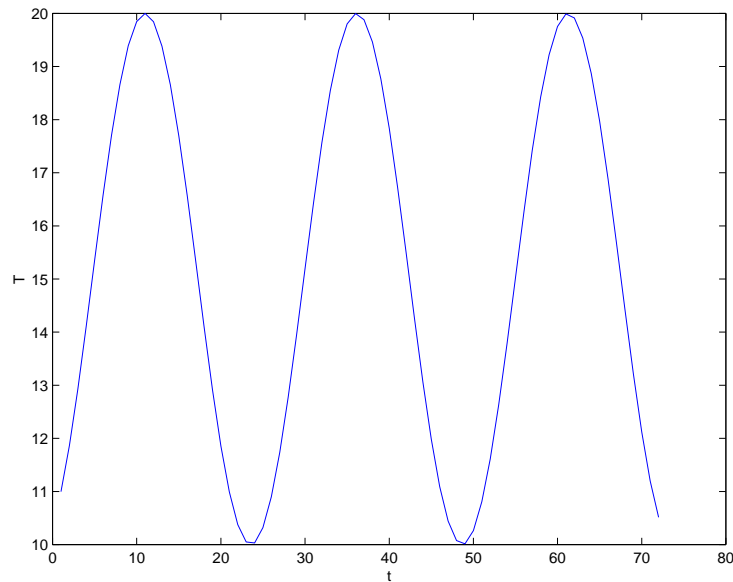
```
T = 5* sin(1/4*(t-18*pi/12)) + 15;
```

```
% os valores da temperatura T nos pontos t considerados
```

```
plot(t, T)
```

```
% Aparece uma janela como no gráfico dos dados (t × T) mostrado na Figura
```

7.1



**Figura 7.1:**  $t \times T$

```
xlabel('t') % para indicar o nome do eixo horizontal t.
```

```
ylabel('T') % para indicar o nome do eixo vertical T.
```

O gráfico da sequência dada pela população do Brasil de 1950 até o ano 2000 conforme visto na Figura 7.2, introduzimos os dados de 10 em 10 anos;

```
x = [1950: 10: 2000]
```

ou

`x = 1950 1960 1970 1980 1990 2000 2010` % ou podemos utilizar o comando `p = linspace(1950, 2010, 7)` para gerar 7 pontos entre 1950 e 2010.

```
p = [57 70 93 119 147 170 190]
```

```
p =
```

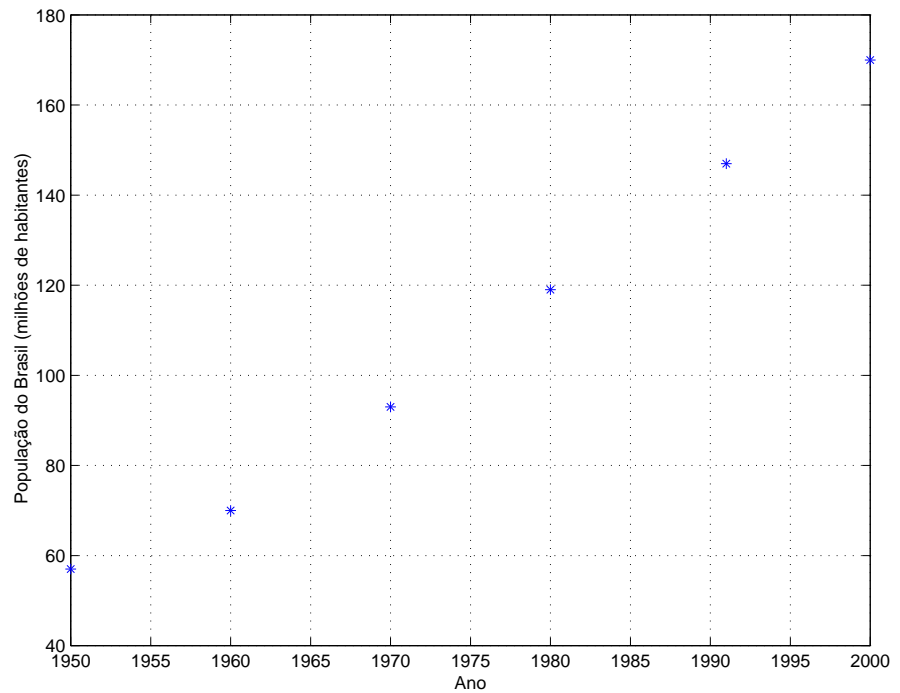
```
57 70 93 119 147 170 190
```

```
plot(x, p, '*')
```

```
xlabel('Ano')
```

```
ylabel('População do Brasil')
```

`grid on` % para mostrar a grade no gráfico



**Figura 7.2:** População do Brasil 1950 – 2000

```
p = [57 70 93 119 147 170 190]
```

```
p =
```

```
57 70 93 119 147 170 190
```

```
plot(x, p, '*')
```

```
xlabel('Ano')
```

```
ylabel('População do Brasil')
```

```
grid on % mostra a grade
```

```
vs = p(1, 6) - p(1, 5) % variação simples da população entre 1991  
e 2000
```

```
vs = 2.3000
```

A interpolação de dados também pode ser obtida da seguinte forma:

```
p_n = interp1(X, Y, n)
```

% retorna um vetor linha p de coeficientes do polinômio interpolador em ordem decrescente.

No caso do exemplo 2.7 entramos com os dados

```
x = [0 0.5 1]
```

```
y = [1 1.3 2.7]
```

Fazendo a interpolação linear,

```
y075 = interp1(x,y, 0.75, 'linear')
```

Obtemos o valor  $y(0.75) = 2$ , que é um valor diferente do valor obtido pela interpolação quadrática.

O ajuste linear pode ser obtido do seguinte modo:

```
p_n = polyfit([x_1 x_2 ... x_n],[y_1 y_2 ... y_n], n)
```

% retorna um vetor linha p de coeficientes do polinômio de grau n em ordem decrescente.

Os coeficientes da função polinomial ajustada nos pontos dados aparecem em ordem decrescente no vetor linha ans (answer), como no caso do exemplo 2.9:

```
n = 6
X = [1 2 3 4 5 6]
Y = [158 317 793 1823 3170 5310]
polyfit(X, Y, 1)
ans =
1.0e+003 *
1.00997142857143 -1.60640000000000
```

Indicando que o ajuste linear dos dados é  $y = 1009.9x - 1606.4$

Para um polinômio interpolador de grau n temos o comando:

```
p_n = polyfit([x_1 x_2 ... x_n], [y_1 y_2 ... y_n], n)
```

É interessante que façamos nosso próprio programa ajuste.m para realizar os ajustes como o de ajuste linear e ajuste exponencial, incluindo o cálculo o erro de cada um para compararmos, como segue:

### Ajuste linear e exponencial

% Entrando inicialmente com os dados

```
x = [1950 1960 1970 1980 1991 2000 2010]
```

```
y = [ 57 70 93 119 147 170 190]
```

% 1. Ajuste Linear

```
la = polyfit(x, y, 1)
```

```
lxx = 1950: 5: 2020
```



```

    lyy = la(1)*lxx la(2) +
% Construção do sistema de equações normais
    lsx = sum(x)
    lsx2 = sum(x.^2)
    lsy = sum(y)
    lsyx = sum(y.*x)
    n = size(x)
    ln = n(2)
    laa = [ lsx2 lsx; lsx ln]
    lbb = [ lsyx; lsy ]
    lbb\laa
% Cálculo do erro do ajuste linear
    lvalyy = la(1)*x la(2)+
    lerr = sum((lvalyy-y).^2)
% 2. Ajuste Exponencial
    ea = polyfit(x, log(y), 1)
    ea(2) = exp(ea(2))
    exx = lxx
    eyy = ea(2)*exp(ea(1)*exx)
% Construção do sistema de equações normais
    esx = lsx
    esx2 = lsx2
    esly = sum(log(y))
    eslyx = sum(log(y).*x)
    en = ln
    eaa = [ esx2 esx; esx en ]
    ebb = [ eslyx; esly ]
    ebb\eaa
% Cálculo do erro do ajuste exponencial
    evalyy = ea(2)*exp(ea(1)*x)
    eerr = sum((evalyy-y).^2)

```

% Grafico dos ajustes linear e exponencial para comaparação

```
subplot(2,1,1)
plot(x,y,'*r', lxx,lyy)
xlabel('t (anos)')
ylabel('p(t) (milhões de habitantes)')
subplot(2,1,2)
plot(x,y,'*r', exx,eyy)
xlabel('t (anos)')
ylabel('p(t) (milhões de habitantes)')
```

Com isso, podemos visualizar os gráficos dos pontos com os dois tipos de ajustes e comparar o erro para decidir qual é a melhor função que se ajusta.

Obtida uma função polinomial  $y = x^2 - 0.5x + 1$  pode-se derivá-la assumindo a variável simbólica  $x$ :

```
syms x % definindo a variável simbólica x
y = x.^2- 0.5 * x + 1
y =
x^2-1/2*x+1
pretty(diff(y))
2x- 1/2
```

Da mesma forma, definimos um polinômio pelos seus coeficientes ordenados da maior ordem pela menor

```
p = [1 -0.5 1]; %  $x^2 - 0.5x + 1$ 
y = polyder(p) % são os coeficientes da derivada do polinômio
y =
2 -0.5 %  $2x - 0.5$ 
```

Também podemos definir uma função inline de uma ou mais variáveis, inclusive dentro de uma rotina para em seguida calcular seu valor em algum ponto do seu domínio

```
fa = inline('exp(-2*t) .* sin(x)')
fa(0, 0)
ans =
0
```

Ilustramos agora o decrescimento da quantidade de poluentes na represa num gráfico cartesiano, tempo versus quantidade de poluentes. O gráfico pode ser feito definindo os comandos básicos

```
n = 1:5 % uma sequência de valores da variável independente n
p = 100 * (3/4)^n % uma sequência de valores da variável p gerando
valores correspondente a cada valor de n
```

```
plot(n, p) % gráfico de  $n \times p$ 
legend('quantidade de poluentes') % legenda do gráfico
xlabel('n') % label nos eixo x
ylabel('p') % label nos eixo y
grid on % gráfico com grade
```

Ver por exemplo as Figuras 3.3 e 3.11.

```
format long % usando format long
```

Plotamos diretamente uma função como  $f(x) = \frac{x}{1+x}$  num intervalo  $[0, 5]$  com o comando:

```
>> fplot('x/(1+x)', [0, 5])
```

Para resolver uma equação ou inequação como a (3.3) entramos com o comando:

```
solve('n * log(0.75) = log(0.05)' )
ans =
10.413343619304302547440815994360
```

Muitos modelos matemáticos de problemas ambientais necessitam de operações com matrizes ou resolução de um sistema de equações lineares. Ilustramos as operações entre duas matrizes A e B de mesma ordem

```
A + B % adição de matrizes;
```

```
A - B % subtração de matrizes;
```

$A/B$  % divisão direta entre as matrizes A e B que corresponde a multiplicar a matriz A pela inversa da matriz B.

$A \setminus B$  % A barra invertida significa a divisão indireta entre as matrizes A e B que corresponde a multiplicar a matriz B pela inversa de A. ( $BA^{-1}$ )

```
A*B % multiplicação de matrizes;
```

```
inv(A) % inversa da matriz A
```

```
A' % transposta de uma matriz A
```

```
det(A) % determinante de uma matriz quadrada A
```

```
eig(A) % são os autovalores de A
```

Para obter a matriz de autovetores  $V$  de  $A$  e os autovalores  $D$  de modo que  $A V = V D$  escrevemos

```
[V, D] = eig(A)
```

De fato, considerando a matriz  $A$  dada por:

```
A = [ 1 2 3; 0 1 2; 1 0 1] % entrando com as 3 linhas da matriz
```

```
A(1,2) % Extraindo o elemento 2 situado na linha 1 e coluna 2 da matriz
```

```
A(:, 3) % Extraindo a terceira coluna da matriz A
```

```
ans =
```

```
3
```

```
2
```

```
1
```

```
b = [ 1 2 3]'; % entrando com a matriz coluna b que é a transposta da  
matriz linha
```

```
A * b % multiplicando a matriz A pela matrix coluna b
```

```
ans =
```

```
14
```

```
8
```

```
4
```

```
[A b] % ampliando a matriz A com a coluna b
```

```
ans =
```

```
1      2      3      1
```

```
0      1      2      2
```

```
1      0      1      3
```

```
x = A \ b % resolvendo o sistema  $A x = b$ 
```

```
x =
```

```
0
```

```
-4
```

```
3
```

Outro modo de encontrar a solução do sistema  $A x = b$  é obtermos a inversa da matriz  $A$

```
C = inv(A)
```

Em seguida, multiplicamos a inversa de A pela matriz b

```
x = C*b
```

## 7.4 Solução de equações discretas

Para resolução numérica de equações discretas passo a passo podemos utilizar os seguintes comandos:

```
n = 100; % Entrando com o número de iterações
x(1) = 1; % entrando com o(s) dado(s) inicial(is)
for i = 1:n; % uso do loop para a variável i
    x(i+1) = 0.8*x(i)
end
i = 1:n; % Entrando com as abscissas para fazer o gráfico
x(i) % Entrando com as ordenadas para fazer o gráfico
plot( i, x(i), 'o')
xlabel('n')
ylabel('x(n)', 'rotation', 0)
```

A resolução de um sistema de equações discretas do tipo predador-presa pode ser elaborando um arquivo.m ou editando os comandos:

```
n = 20; % número de iterações
x(1) = 20;
y(1) = 10;
a = 0.01; b = 0.001; c = 0.005; d = 0.0001;
for i = 1 : n;
    x(i+1) = x(i) + a * x(i) - b * x(i)*y(i)
    y(i+1) = y(i) + c * x(i) - d * x(i)*y(i)
end
k = 1 : n
x(k);
y(k);
subplot(1,2,1)
```

```

plot(k, x(k), '*r')
xlabel('n (dias)')
ylabel('x(n)', 'rotation', 0)
subplot(1,2,2)
plot(k, y(k), '*b')
xlabel('n (dias)')
ylabel('y(n)', 'rotation', 0))

```

Teste e verifique o comportamento das populações de presa e predador.

Para a análise da poluição de um rio com 3 compartimentos podemos simular como:

```

% Algoritmo para poluição de um rio com 3 compartimentos
clear all % Limpa todas as variáveis e funções
m = [0.8 0 0; 0.20 0.8 0; 0 0.20 0.8];
% condição inicial
p = [1000; 0; 0];
% Entrada de poluentes em cada compartimento
q = [0; 0; 0];
% numeros de iterações
nfinal = 40;
% matriz que recebera as iterações
ver = zeros(40,3);
ver(1,:) = p';
for i = 1:nfinal
    pf = m*p + q;
    subplot(1,2,1)
    bar(pf), grid, axis([0 4 0 1000]),xlabel('Compartimentos'),ylabel('Quantidade
de poluente')
    pause(0.4)
    p = pf
    for j=1:3
        ver(i+1,j)=p(j);
    end
end

```

```

end

% grafico de todos os compartimentos
c1 = ver(:,1);
c2 = ver(:,2);
c3 = ver(:,3);
ch = [0:40];
subplot(1,2,2)
plot(ch, c1, ch, c2, ch, c3), xlabel('tempo'), ylabel('níveis de poluição')
grid on

```

## 7.5 Resolução de equações diferenciais ordinárias

Ilustramos inicialmente a busca de soluções analíticas de equações diferenciais ordinárias e problemas de valor inicial. Resolvemos equações diferenciais definindo os comandos básicos:

```

p = dsolve( 'Dp = 0.005134816803*p', 'p(0)=6000000000')
p =
6000000000*exp(5134816803/1000000000000*t)

```

Conhecendo-se a solução de um problema de valor inicial, podemos entrar com os parâmetros e obter os valores em determinados instantes, como explicitado na rotina `malthus.m` que nos dá o valor da taxa de crescimento e da população segundo a lei de Malthus conhecendo-se a população em dois instantes distintos:  $p_0$ , a população no instante inicial  $t = 0$  e  $p_1$ , a população no instante  $t_1$ , implementamos um arquivo executável `malthus.m`:

```

function malthus = exponencial(p0, p1, t1, t)
r = log(p1/p0)/t1 % determinação da constante de variação considerando a população em 2 instantes distintos
malthus = p0*exp(r*t); % determinação da população num instante t

```

Em seguida adotando mais casas decimais, saindo do default que é o format short de 5 dígitos para 15 dígitos

```
format long % sai do formato default de 5 dígitos e adota 15 dígitos
```

Chamamos a função definida anteriormente com os parâmetros:

`malthus(600 000 000, 2 500 000 000, 300, 350)`

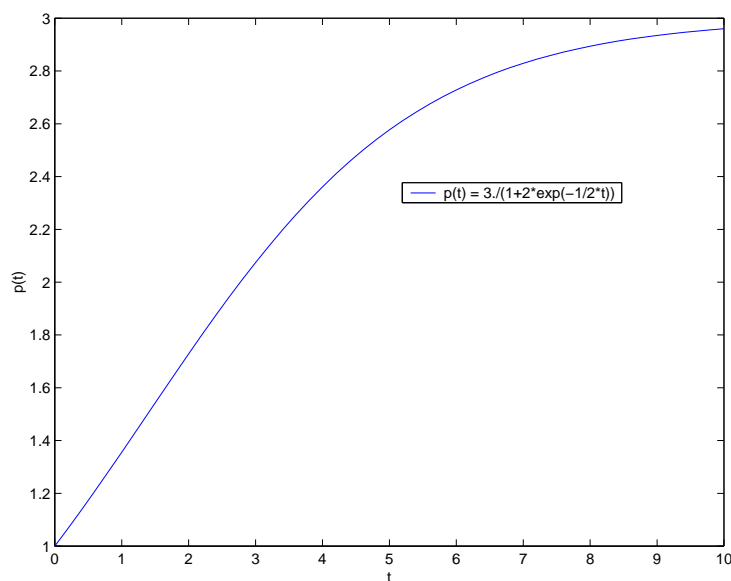
e obtemos o valor  $3.1713e + 009 = 3\,171\,300\,000$  como solução de

$$\frac{dp(t)}{dt} = 0.0051 * p(t), \quad p(0) = 600\,000\,000$$

em  $t = 350$ .

Resolvendo a equação logística:

```
p = dsolve( 'Dp = 0.5*p*(3-p)/3')
p =
3/(1+3*exp(-1/2*t)*C1)
p = dsolve( 'Dp = 0.5*p*(3-p)/3', 'p(0)=1')
p =
3/(1+2*exp(-1/2*t))
t = 0: 0.2: 10;
p = 3./(1+2*exp(-1/2*t));
plot(t, p) % gráfico de p
xlabel('t'), ylabel('p(t)')
legend('p(t) = 3./(1+2*exp(-1/2*t))')
```



**Figura 7.3:** Função logística  $P(t)$

Além disso, podemos ilustrar os gráficos das respectivas soluções das equações diferenciais ordinárias, das equações de equilíbrio e analisá-los.

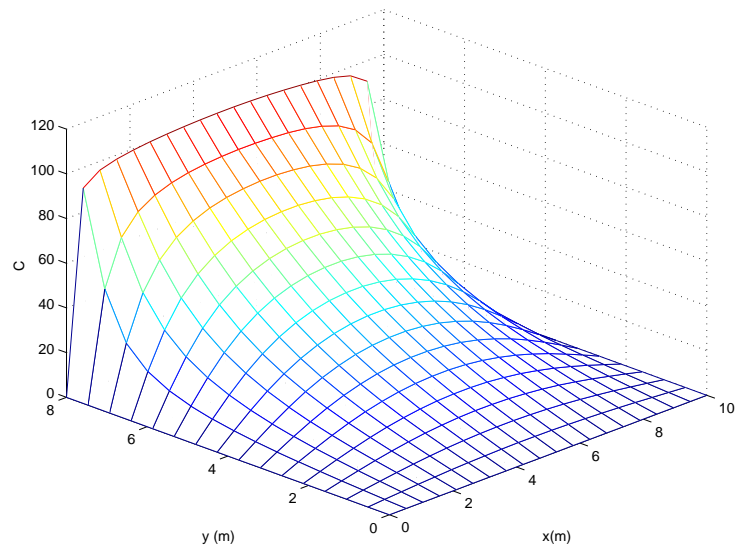


## 7.6 Resolução de equações diferenciais parciais

Para um problema de distribuição de poluentes numa região retangular contaminada representado pela equação do potencial  $c_{xx} + c_{yy} = 0$  numa região retangular com as condições de contorno  $c(x, 0) = 0$ ,  $c(0, y) = 0$ ,  $c(a, y) = 0$  e num dos lados onde está sendo lançada  $c(x, b) = 100$  cuja solução é dada por

$$C(x, y) = 4 \frac{C(x, b)}{\pi} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{(2n-1)\pi x}{a}\right) * \sinh\left(\frac{(2n-1)\pi y}{b}\right)}{(2n-1) \sinh\left(\frac{(2n-1)\pi b}{a}\right)}$$

A solução obtida pela série de Fourier considerando poucos termos possui muitas oscilações, mas com  $k = 18$  termos conforme a Figura 7.4 a seguir fica mais suave



**Figura 7.4:** Difusão da concentração de poluentes

Resultado gráfico da Figura 7.4 foi gerado da seguinte forma:

```
clear
% valores da malha a ser calculada
a = 10;    % 0 < x < a
b = 8;    % 0 < y < b
na = 20;  % (a-0)/20 dividindo o intervalo no eixo x em 20 partes
nb = 16;  % (b-0)/16 dividindo o intervalo no eixo y em 16 partes
k = 18;    % número de termos da série de Fourier a considerar
C0 = 100; % poluição inicial diferente de zero num lado do retângulo zero
nos outros lados
```

```

clear C

x = linspace(0, a, na); % gerando uma partição no eixo x
y = linspace(0, b, nb); % gerando uma partição no eixo y
[X, Y] = meshgrid(x,y); % gerando uma malha retangular no plano
(x × y)

for i = 1:nb % primeiro loop para i (linhas da grade)
    for j = 1:na % colunas da grade)
        C(i,j) = 0;
        for n = 1: k % índice para o termo da série de Fourier solução
            m = 2*n - 1;
            C(i,j) = C(i,j) +
            sin(m*pi*X(i,j)/a) .* sinh(m*pi*Y(i,j)/a) /(sinh(m*pi*b/a)*m);
        end
        C(i,j) = C(i,j) * 4 * C0/pi;
    end
end

mesh(X, Y, C)

xlabel( 'x(m)'); ylabel('y (m)'); zlabel('C') % labels

```

Resolvendo o problema de valor inicial para  $u(x, t)$  numa região  $R$  dada por  $R = (x, t)$ ,  $0 < x < 5$ ,  $t > 0$  e com  $V = 0.75$ , podemos implementar o esquema de diferenças finitas usando um loop dentro de outro.

Consideramos a condição inicial  $f$  dada por um arquivo.m e entramos com

```

V = 0.75;

deltax = 0.1; % é o passo na direção x
x = 0:deltax:5 % variação de x desde 0 até 5 com passo
J = 5/deltax;

deltat = 0.1; % é o passo no tempo
rho = V * deltat/deltax;
n = 20; % número de passos
u = f(x);

for n = 1:n
    v = u

```

```

for j = 2:J+1
    u(j) = (1- rho)*v(j) + rho*v(j-1)
end
end
end

```

## 7.7 Resolução de um POL

Para exploração de modelos matemáticos de otimização linear além de softwares específicos como **LINDO**<sup>9</sup>, temos o Octave ou MatLab, Maple, Mathematica ou wMaxima que apresentam rotinas específicas de programação linear

Para resolver problemas de otimização linear no Software Octave usamos a rotina `lpk` e no Matlab usamos `lp`.

A função `lp` - '*linear programming*' resolve problemas de otimização linear na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \text{Min } c^t x \\ \text{sujeito a } \begin{cases} Ax \leq b \\ x \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

A descrição:

`x = lp(c,A,b)` % retorna o vetor  $x$  que minimiza  $c^t x$  sujeito a  $Ax \leq b$ .

Considere o problema de programação linear do tipo

$$\begin{aligned} \text{Min } Z(x_1, x_2) &= -5x_1 - 2x_2 \\ \text{sujeito a } \begin{cases} x_1 \leq 3 \\ x_2 \leq 4 \\ x_1 + 2x_2 \leq 9 \\ x_1 \geq 0 \\ x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Além de poder desenhar a região viável no plano, podemos escrever os seguintes comandos:

`c = [-5 -2]` % matriz linha dos coeficientes da função objetivo

`c =`

`-5      -2`

`A = [1 0 ; 0 1 ; 1 2]` % matriz dos coeficientes das restrições na forma padrão

<sup>9</sup><http://www.lindo.com/>

```

A=
1   0
0   1
1   2

b = [3 4 9] % matriz transposta dos termos independentes das restrições

b =
3   4   9

lpk(c, A, b) % busca a solução ótima do POL utilizando o Octave

ans =
3
3

```

Desta forma, obtivemos a resposta ótima para o problema de otimização que são os valores  $x_1 = 3$  e  $x_2 = 3$ .

No problema de otimização do lixo contaminado da unidade de Otimização Linear obtemos

```

c = [4 3 2 6 2 4 3 5 7] % matriz linha dos coeficientes da função
objetivo

c =
4 3 2 6 2 4 3 5 7

A = [1 1 1 0 0 0 0 0 0;
     0 0 0 1 1 1 0 0 0;
     0 0 0 0 0 0 1 1 1;
     1 0 0 1 0 0 1 0 0;
     0 1 0 0 1 0 0 1 0;
     0 0 1 0 0 1 0 0 1]

```

% matriz dos coeficientes das restrições na forma padrão

```

A=
1 1 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 1 1
1 0 0 1 0 0 1 0 0
0 1 0 0 1 0 0 1 0

```

```
0 0 1 0 0 1 0 0 1
```

```
b = [100 500 800 300 500 600] % matriz transposta dos termos in-  
dependentes das restrições
```

```
b =
```

```
100 500 800 300 500 600
```

```
lpk(c, A, b) % busca a solução ótima do POL utilizando o Octave,  
obtendo os valores  $x_{11}$ ,  $x_{12}$  etc. ou indica um alerta do tipo:
```

Warning: The solution is unbounded and at infinity; the constraints are not restrictive enough.

A solução do problema é  $x_{11} = 0$ ,  $x_{21} = 0$ ,  $x_{33} = 0$ ,  $x_{12} = 0$ ,  $x_{22} = 0$ ,  $x_{13} = 100$ ,  $x_{31} = 300$ ,  $x_{23} = 500$ ,  $x_{32} = 500$ .

Considerando o POL da seção 6.4:

```
c = [-1 -2]
```

```
A = [ 3 1; -1 1]
```

```
b = [3 2]
```

```
lp(c, A, b)
```

Obtemos como solução

```
ans =
```

```
0.2500    2.2500
```

Exatamente os valores de  $x^* = (0.25, 2.25) = (\frac{1}{4}, \frac{9}{4})^t$ .

Esperamos que a introdução às ferramentas computacionais apresentadas nesta unidade possa contribuir para a resolução e a simulação de vários modelos matemáticos ambientais.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

A arte de explorar os fenômenos da natureza nos leva a muitos questionamentos dos quais surgem problemas que por sua vez podem ser resolvidos pela representação de modelos matemáticos e usando métodos de resolução apropriados.

Este processo leva a uma motivação necessária para o aprendizado dos conteúdos matemáticos e suas conexões, articulados com outras disciplinas e o interesse pela pesquisa científica.

Não é fácil pesquisar e formular corretamente um problema real, uma vez que estamos acostumados a receber modelos prontos e ao depararmos com um novo problema exige-se esforço, reflexão e dedicação a pesquisa.

Por outro lado, isto nos leva ao incremento do aprendizado significativo que ocorre nesse processo de busca, exploração e modelagem matemática dos problemas. Cada vez que resolvemos novos problemas adquirimos mais habilidade, confiança e segurança neste processo.

Observamos que não existe uma única forma para abordagem de um problema, nem mesmo uma única forma de descrever a modelagem matemática correspondente, dado que cada ramo do conhecimento tem seus próprios aspectos teóricos e práticos e outros que são baseados na experiência e observação.

As tentativas de transpor o problema para uma linguagem matemática, perceber as conexões entre conteúdos e outras áreas, simulações, implicações práticas e científicas até encontrar a sua solução e a interpretação final dos resultados obtidos é um processo longo, mas muito interessante, que certamente constitui-se em atividades de prazer no processo de pesquisa e descobertas.

Esperamos que as ideias iniciais semeadas neste texto possam despertar um olhar mais amplo aos problemas ambientais incluindo as possibilidades de uma abordagem utilizando a modelagem matemática.

# Referências Bibliográficas

ALVES, L. F. B. *Modelagens matemáticas para simulações computacionais de impacto ambiental no Rio Balsas*, Dissertação(Mestrado) - UNICAMP, Campinas - SP, 2009.

ALVES, L. F. B. & MEYER, J. F. C. A. *Modelagem matemática e simulação computacional do comportamento evolutivo de manchas superficiais de poluentes: o caso do Rio Balsas em Balsas, MA*, Anais do XXXIII CNMAC, Águas de Lindóia - SP, 2009.

ARENALES, M., ARMENTANO, V., MORABITO, R. & YANASSE H. *Pesquisa Operacional*, São Paulo, Editora Campus, 2007.

ARENALES, S. H. V. & DAREZZO FILHO, A. *Cálculo Numérico: Aprendizagem com Apoio de Software*, São Paulo, Editora Thomson, 2008.

ARENALES, S. H. V. & SALVADOR, J. A. *Cálculo Numérico, Uma abordagem para o ensino a distância*, São Carlos - SP, EDUFSCar, 2009.

BASMADJIAN, D. *The art of modeling in science and engineering*, Boca Raton, Florida, Chapman e Hall/CRC, 1999.

BASSANEZI, R. C. *Ensino-aprendizagem com modelagem matemática*, São Paulo, Editora Contexto, 2002.

BASSANEZI, R. C. & FERREIRA Jr. W. C. *Equações Diferenciais com Aplicações*, São Paulo, Editora Harbra, 1988.

BARROS, L.C. ; BASSANEZI, R.C. *Tópicos de Lógica Fuzzy e Biomatemática*, UNICAMP, Coleção IMECC, Livros didáticos, vol. 5, 2006.

BAZARAA, M. S. & Javis, J. J. *Linear Programming and Network Flows*, John Wiley e Sons, Inc., 1990.

BELTRAMI, E. *Mathematics for Dynamics Modeling*, Academic Press, 1997.

BOYCE W. E. & DIPRIMA, R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, Rio de Janeiro, Editora LTC, 6ª. Ed., 1999.

BREGALDA, P. F.; OLIVEIRA, A. A. F. & BORNSTEIN, C. *Introdução à Programação Linear*, Editora Campus, 1986.

BURDEN, R. L. & FAIRES, J. D. *Análise Numérica*, São Paulo, Ed. Pioneira Thomson Learning, 2003.

CHAPRA, S. C. & CANALE, R. P., *Métodos Numéricos para Engenharia*, São Paulo, McGraw-Hill, 2008.

- CERIGIOLI, M. M. *Curva de crescimento e taxas de alimentação de dois ciliados de água doce*, Tese (doutorado), UFSCar, São Carlos - SP, 1999.
- CLARK, C. W. *Mathematical Bioeconomics: The optimal management of renewable resources*, New York, John Wiley e Sons, 2<sup>nd</sup>. ed., 1990.
- FIGUEIREDO, D. G. *Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais*, Projeto Euclides, IMPA, Rio de Janeiro, 1977.
- GILAT, A. *Matlab com aplicações em engenharia*, Porto Alegre, Bookman, 2<sup>a</sup>. Ed., 2006.
- GOLDEMBERG, J. & LUCON, O. *Energia, meio ambiente e desenvolvimento*, São Paulo, Edusp, 2008.
- EDELSTEIN-KESHET, L. E. *Mathematical Models in Biology*, The Randon House Ed., Toronto - CA, 1988.
- FARLOW, S. J. *Differential Equations and their Applications*, New York, Mac-Graw-Hill, 1994.
- FRANCO, N. B., *Cálculo Numérico*, São Paulo, Pearson Prentice Hall, 2007.
- JAFELICE, R. S. M., BARROS, L. C. & BASSANEZZI, R. C. *Teoria dos Conjuntos Fuzzy com Aplicações*, São Carlos - SP, Notas em Matemática Aplicada, SBMAC, 2005.
- KAPUR, J. N. *Mathematical modelling*, New Delhi, John Willey & Sons, 1988.
- LAY, W. M., RUBIN, D. & KREMPL, E. *Introduction to Continuum Mechanics*, Pergamon Press, 1978.
- LIU, I-SHIH, *A continuum mechanics primer, On constitutives Theories of Materials*, Rio de Janeiro, IMUFRJ, 2009.
- MACULAN, N. & FAMPA, M. H. C. *Otimização Linear*, Brasília, Editora da UnB, 2006.
- MESTERTON-GIBBONS, M. *A concrete approach to mathematical modeling*, New York, John Willey & Sons, INC., 1989.
- MAY, R. M. *Simple Mathematical Models with very complicate Dynamics*, Nature, vol. 261, 1976.
- MOONEY, D. & SWIFT, R. J. *A course in mathematical modeling*, USA, MAA, 1999.
- MURRAY, J. D. *Mathematical Biology*, Berlin, Springer-Verlag, 1990.
- OLIVEIRA, E. C. de & TYGEL, M. *Métodos Matemáticos para a Engenharia*, São Carlos, SP, SBMAC, 2001.



- POLYA, G. *A arte de resolver problemas*, Rio de Janeiro, Editora Interciência, 1977.
- POOLE, D. *Álgebra Linear*, São Paulo, Editora Pioneira Thomson Learning, 2004.
- ROCKSTROM, J. et al. *A safe operating space for humanity*, *Nature*, vol. 461, 472-475, 2009.
- RUGGIERO, M. A. & LOPES, V. L. da R. *Cálculo Numérico, Aspectos Teóricos e Computacionais*, São Paulo, Makron Books, 1997.
- RINCON, M. & LIU, I-SHIH *Introdução ao Método dos Elementos Finitos e Controle ótimo*, IMUFRJ, 2001.
- SALVADOR, J. A. *Hipertexto de Métodos de Matemática Aplicada com Maple*, São Carlos - SP, EDUFSCar, 2002.
- *Equações Diferenciais Parciais com Maple*, São Carlos - SP, EDUFSCar, 2002.
- SALVADOR, J. A., ARENALES, S. H. V., DAREZZO FILHO, A. & SANTOS-WAGNER, V. M. P. *Mapas Conceituais / Software Numérico: Experiência no Estudo de Cálculo Numérico*, São carlos - SP, TEMA, vol. 4, no. 1, 2003.
- SANDEFUR, J. T. *Discrete dynamical systems, Theory and applications*, Oxford, Clarendon Press, 1990.
- SCHEINERMAN, E. R. *Matemática Discreta. Uma introdução*, São Paulo, Pioneira Thomson Learning, 2003.
- SZATHMÁRY, E. *Simple growth laws and selection consequences*, *TREE*, vol. 6, no.11, November, 1991.
- SPEZAMIGLIO, A. & PEREIRA, W. F. *Ordem no caos de Devaney*, , Rio de Janeiro, *Matemática Universitária*, SBM, v. 35, 31-40, 2003.
- THOMAS, G. B. et all, *Cálculo*, vol. 1 e 2 in
- TUCCI, C. E. M. *Modelos Hidrológicos*, Porto Alegre, Ed. UFRGS, 1998.
- da SILVEIRA, M. A. *Questões pedagógicas da modelagem em engenharia*, Brasília, *Revista de Ensino de Engenharia*, ABENGE, vol. 24, no. 1, 11-22, 2000.
- VENDRAMETTO JR., C. E. & ARENALES, S. H. V. *Matlab: Fundamentos e Programação*, São Carlos - SP, EDUFSCar, 2000.
- WENDELANDER, E. *Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Águas Subterrâneas*, São Carlos - SP, *Notas em Matemática Aplicada*, SBMAC, 2003.
- ZILL, D. G. *Equações Diferenciais*, São Paulo, Editora Thomson, 2003.

## **SOBRE OS AUTORES**

### **José Antonio Salvador**

- *Professor associado do DM - CCET - UFSCar, Licenciado em Matemática pela UNESP em São José do Rio Preto e astrônomo pelo IGUFRJ. Mestre e doutor em Ciências na área de Matemática Aplicada pelo IMUFRJ e pós-doutor pela Universidade da Califórnia em San Diego - USA. Tem experiências em projetos de pesquisa, ensino e de extensão envolvendo Matemática Aplicada e Ensino de Ciências com as tecnologias e trabalhos apresentados em congressos nacionais e internacionais. Publicou os livros: CD-ROM Matemática Universitária Básica com Maple, co-autores: I. M. Costa, P. L. A. Malagutti, R. R. Paterlini, Y. Furuya e Y. Y. Baldin, São Carlos, SP, EDUFSCar, 2000.*

*Hipertexto de Métodos de Matemática Aplicada com Maple, São Carlos, SP, EDUFSCar, 2002.*

*Equações Diferenciais Parciais com Maple, São Carlos, SP, EDUFSCar, 2002.*

*Calculo Numérico: uma abordagem para o ensino a distância, co-autora S. H. V. Arenales, São Carlos, SP, EDUFSCar, 2009.*

### **Selma Helena de Vasconcelos Arenales**

- *Professora aposentada do DM - CCET - UFSCar, Licenciada em Matemática pela UNESP em Presidente Prudente e Mestre em Matemática Aplicada pela UNICAMP. Tem experiências em projetos de pesquisa e ensino nas áreas de Análise Numérica e Otimização e trabalhos apresentados em congressos de Matemática Aplicada e Computacional e de Ensino de Engenharia. Publicou os livros:*

*Matlab: Fundamentos e Programação, co-autor C. E. Vendrametto Jr., São Carlos, SP, EDUFSCar, 2000.*

*Cálculo Numérico: Aprendizagem com Apoio de Software, co-autor A. Darezzo Filho, São Paulo, SP, Editora Thomson, 2007.*

*Calculo Numérico: uma abordagem para o ensino a distância, co-autor J. A. Salvador, São Carlos, SP, EDUFSCar, 2009.*