Universidade Federal do Oeste do Pará

Campus Santarém

Instituto de Engenharia e Geociências

L2: Modelagem Computacional- 2022/2

Prof. Claudir Oliveira

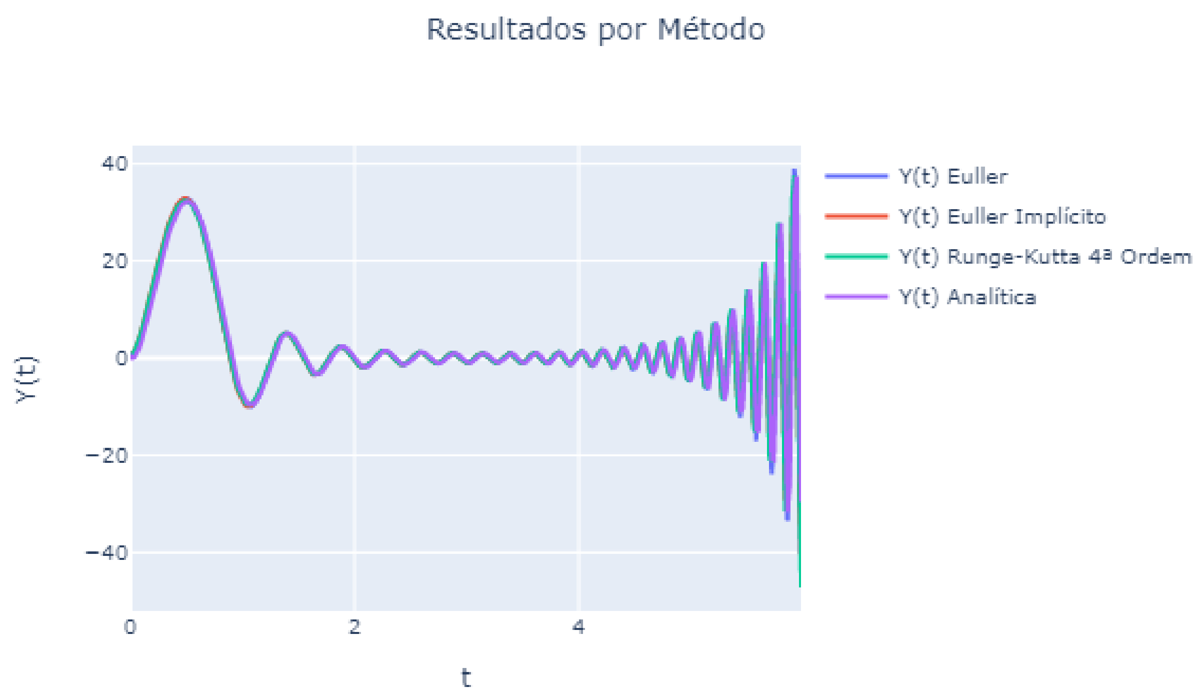
Data de aplicação: 08/05/2023

Orientações: Os resultados (gráficos, tabelas se for o caso) devem ser entregue, além do código fonte com as Equações/Sistemas de Equações funcionando, apresentados em um arquivo, devidamente enumeradas (Figura 1, etc) e com as legendas identificando cada caso. Neste exercício, não é necessário escrever comentários sobre os resultados.

1. Considere o PVI dado por

$$\frac{dy}{dt} = (t-3.2)y + 8te^{\left(\frac{(t-3.2)^2}{2}\right)}cos(4t^2)$$

cuja solução analítica é $y(t) = e^{\left(\frac{(t-3.2)^2}{2}\right)} sen\,(4t^2) + C$, onde $C = y_0 e^{\left(-\frac{(t_0-3.2)^2}{2}\right)} - sen\,(4t_0^2)$. Apresente a solução gráfica para o problema utilizando os métodos de Euler, Euler Implícito e RK. Utilize y_0 =0.75, $n = 300$ e $t_{max} = 6$.



2. Resolva os seguinte sistemas de EDO pelos métodos de Euler e RK.

a) $\begin{cases} y_1'(t) = & -\frac{8}{5}x + \frac{3}{10}y \\ y_2(t) = & \frac{8}{5}x - \frac{4}{5}y \end{cases}$ b) $\begin{cases} C_1'(t) = & -0.5x(t) \\ C_2'(t) = & 0.5x(t) - \frac{1}{4}y(t) \\ C_3'(t) = & \frac{1}{4}y(t) - \frac{1}{6}z(t) \end{cases}$ c) $\begin{cases} C_1'(t) = & -\frac{1}{6}x(t) + \frac{1}{6}z(t) \\ C_2'(t) = & \frac{1}{6}x(t) - \frac{1}{3}y(t) \\ C_3'(t) = & \frac{1}{3}y(t) - \frac{1}{6}z(t)) \end{cases}$

(a) $h = 0.2$, $t_{max} = 16$, $y_i = [0,\ 12]$

(b) $h = 0.1$, $t_{max} = 20$, $C_i = [60,\ 30,\ 60]$ (Condição inicial corrigida)

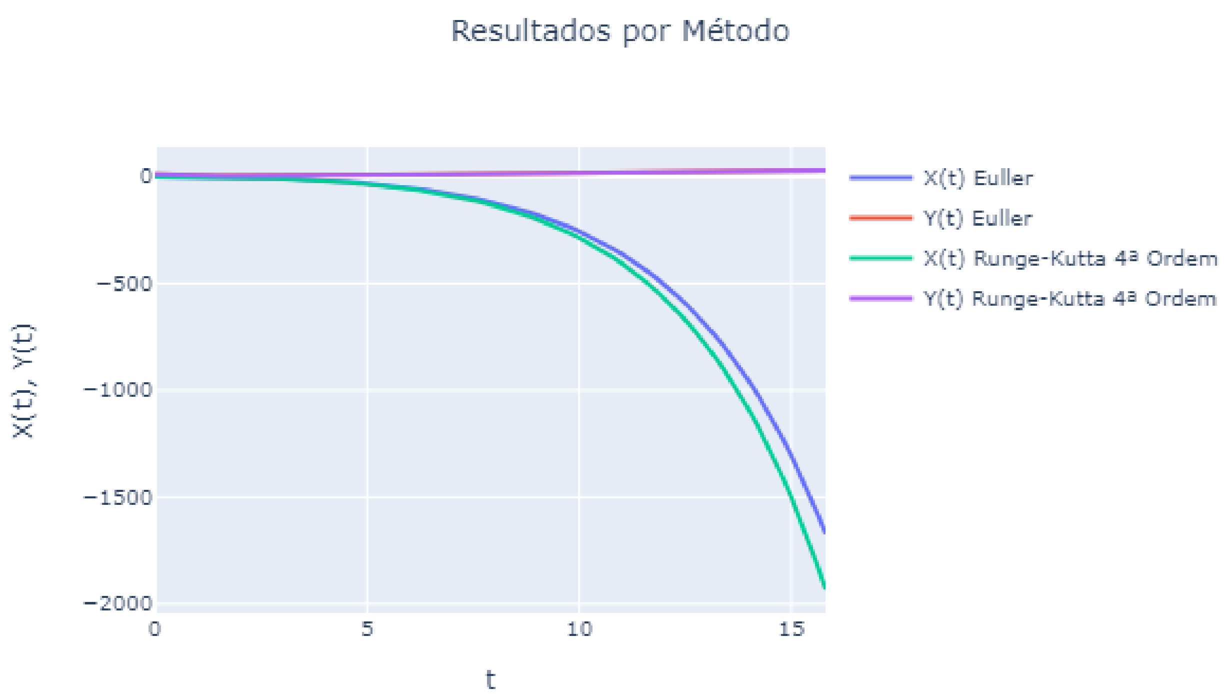
i. Solução Analítica:

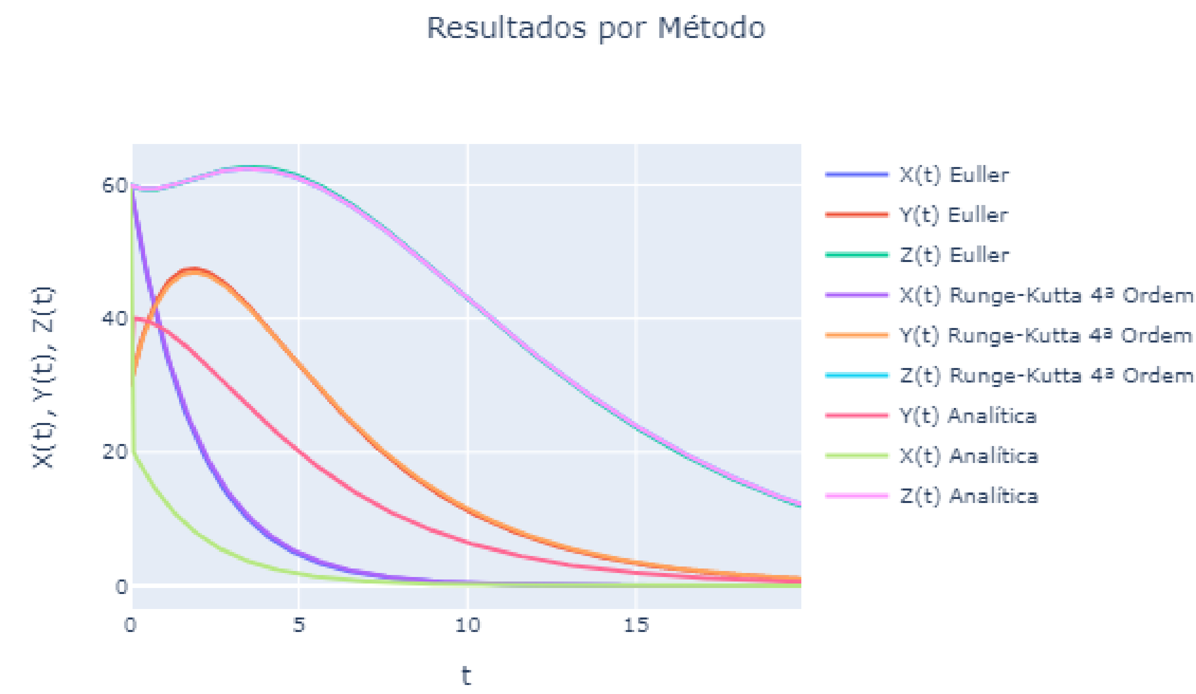
$$\begin{cases} C_1(t) = & x_0 e^{(-t/2)} \\ C_2(t) = & -2 * x_0 e^{(-t/2)} + (y_0 + 2x_0) e^{(-t/4)} \\ C_3(t) = & \frac{3}{2} x_0 e^{\left(-\frac{t}{2}\right)} - 3\left(y_0 + 2x_0\right) e^{\left(-\frac{t}{4}\right)} + \left(z_0 - \frac{3}{2}x_0 + 3\left(y_0 + 2x_0\right)\right) e^{\left(-\frac{t}{6}\right)} \end{cases}$$

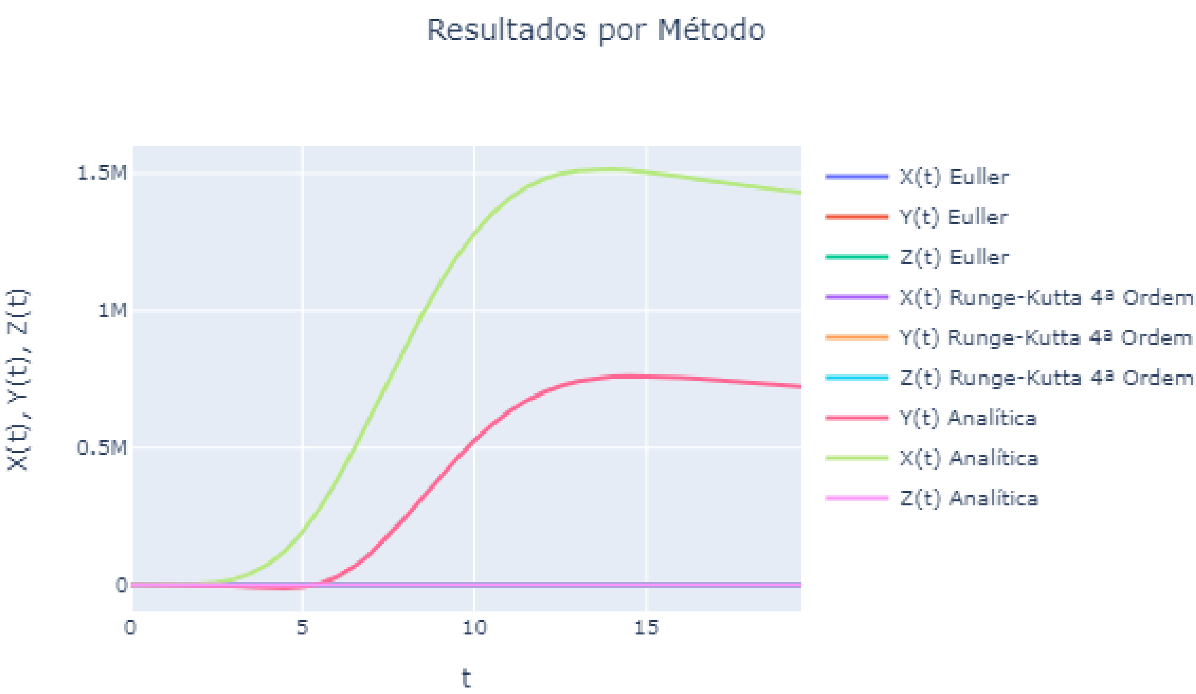
(c) $h = 0.5$, $t_{max} = 20$, $C_i =$[20, 40, 60] (Condição inicial corrigida)

i. Solução Analítica:

$$\begin{cases} C_1(t) = & c_1 + (c_2 + 2c_3)\, e^{\left(-\frac{t}{3}\right)} cos\left(\frac{t}{6}\right) + (2c_2 + c_3)\, e^{\left(-\frac{t}{3}\right)} sen\left(\frac{t}{6}\right) \\ C_2(t) = & 0.5c_1 + (-2c_2 - c_3) e^{\left(-\frac{t}{3}\right)} cos\left(\frac{t}{6}\right) + (c_2 - 2c_3)\, e^{\left(-\frac{t}{3}\right)} sen\left(\frac{t}{6}\right) \\ C_3(t) = & c_1 + (c_2 + 3c_3)\, e^{\left(-\frac{t}{3}\right)} cos\left(\frac{t}{6}\right) + (-3c_2 + c_3)\, e^{\left(-\frac{t}{3}\right)} sen\left(\frac{t}{6}\right) \end{cases}$$




Resultados por Método
X(t), Y(t), Z(t)
t
0
20
40
60
0
5
10
15
X(t) Euller
Y(t) Euller
Z(t) Euller
X(t) Runge-Kutta 4ª Ordem
Y(t) Runge-Kutta 4ª Ordem
Z(t) Runge-Kutta 4ª Ordem
Y(t) Analítica
X(t) Analítica
Z(t) Analítica


Resultados por Método
X(t), Y(t), Z(t)
t
0
0.5M
1M
1.5M
0
5
10
15
X(t) Euller
Y(t) Euller
Z(t) Euller
X(t) Runge-Kutta 4ª Ordem
Y(t) Runge-Kutta 4ª Ordem
Z(t) Runge-Kutta 4ª Ordem
Y(t) Analítica
X(t) Analítica
Z(t) Analítica

3. A modelagem matemática de neurônios tem sido uma importante ferramenta para entender como o sistema nervoso funciona. Uma forma de representar a atividade de um neurônio é por meio de um modelo matemático, que pode ser simulado via sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), por exemplo. Neste caso, o modelo de neurônio é simulado usando a seguinte expressão:

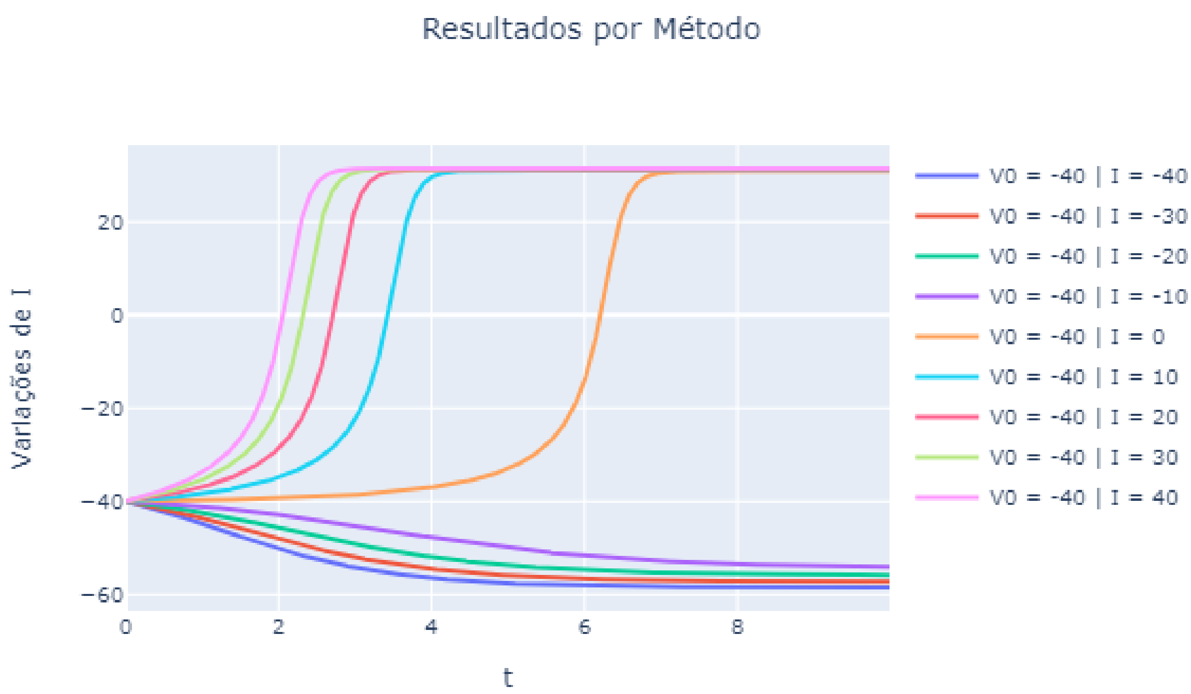
(a)

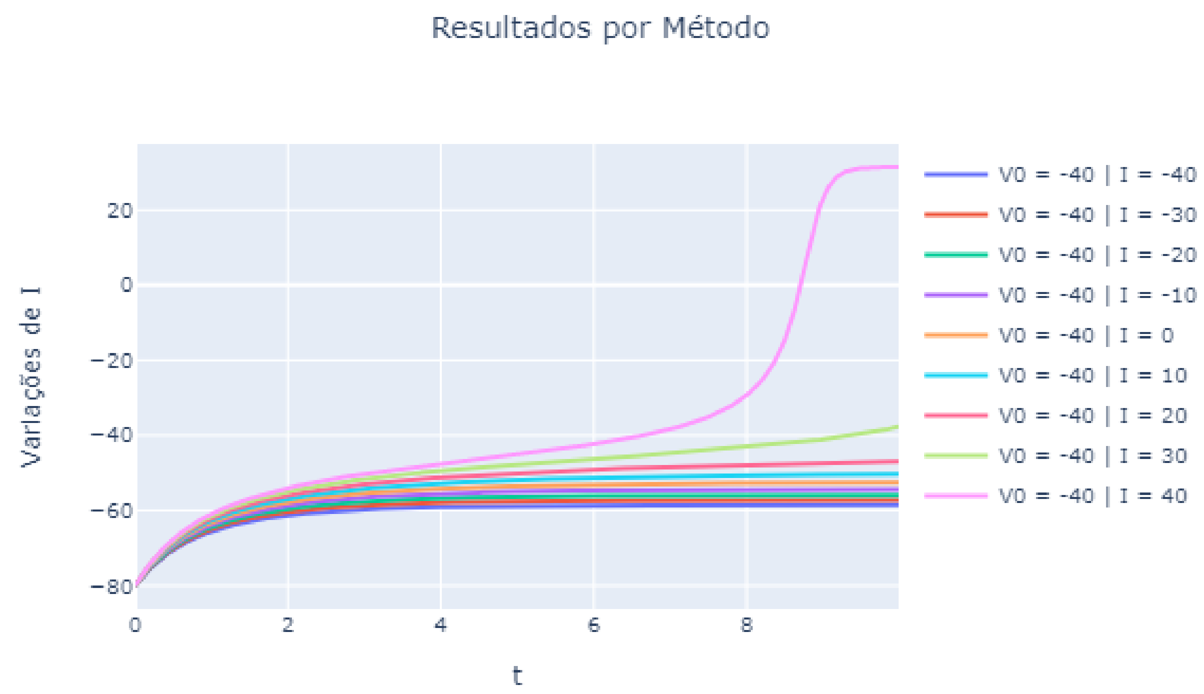
$$\begin{aligned} CV'(t) = &\quad I - g_L\left(V - E_L\right) - \overbrace{g_{Na} m_\infty(V)\left(V - E_{Na}\right)} \\ m_\infty(V) = &\qquad\qquad 1/\left(1 + e^{\left(\frac{V_{1/2}-V}{k}\right)}\right) \end{aligned}$$

considerando os seguintes parâmetros: $C = 10\mu F$, $I = 0pA$, $g_L = 19mS$, $E_L = -67mV$, $g_{Na} = 74mS$, $V_{1/2} = 1.5mV$, $k = 16mV$ e $E_{Na} = 60mV$. A expressão acima é um modelo simplificado para o potencial de um neurônio e depende de parâmetros diferentes listados acima. Não há movimento oscilatório, pois há apenas uma variável, no entanto, a entrada externa é representada por I. Avalie o modelo usando a regra do ponto médio e o método de Runge Kutta de quarta ordem, com passo igual a 0.01.

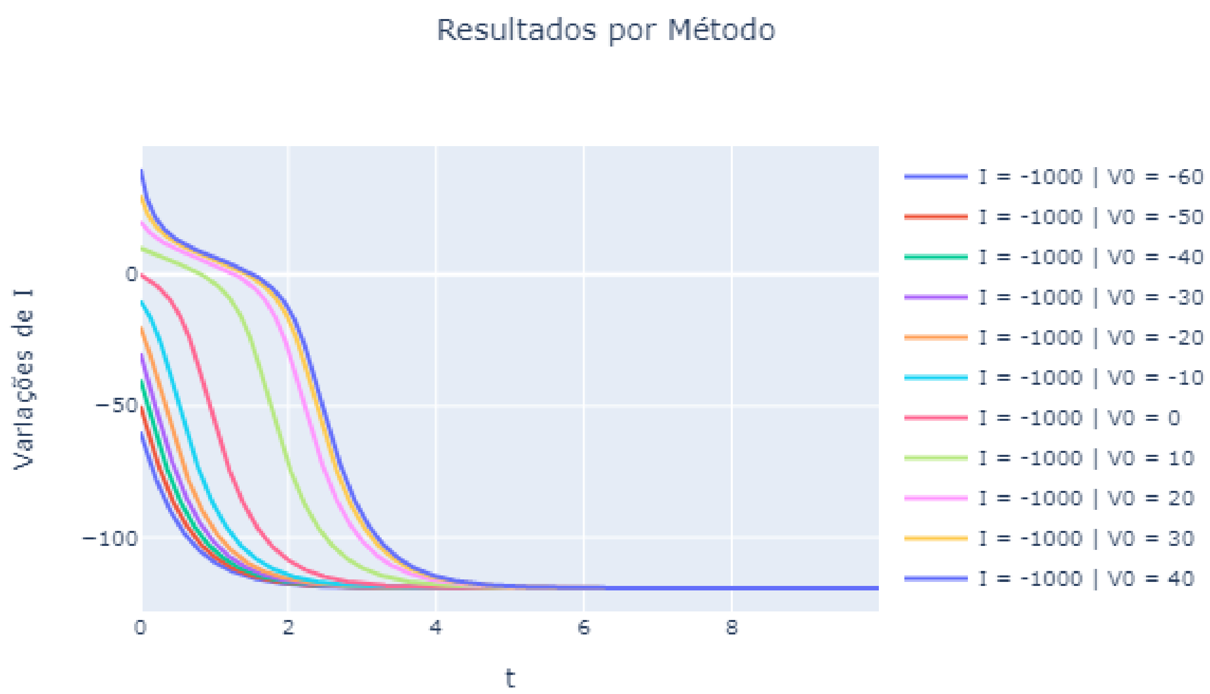
i. Considere $V(0) = -80$, $V(0) = -40$, $t_{max} = 1000$ e diferentes valores de I, variando de -40, -30, -20,... $+ 40$.

ii. Considere $I = -1000$ e diferentes valores de $V(0)$. $V(0) = -60$, -50...,+40.





Resultados por Método
Variações de I
t
20
0
−20
−40
−60
−80
0
2
4
6
8
V0 = -40 | I = -40
V0 = -40 | I = -30
V0 = -40 | I = -20
V0 = -40 | I = -10
V0 = -40 | I = 0
V0 = -40 | I = 10
V0 = -40 | I = 20
V0 = -40 | I = 30
V0 = -40 | I = 40



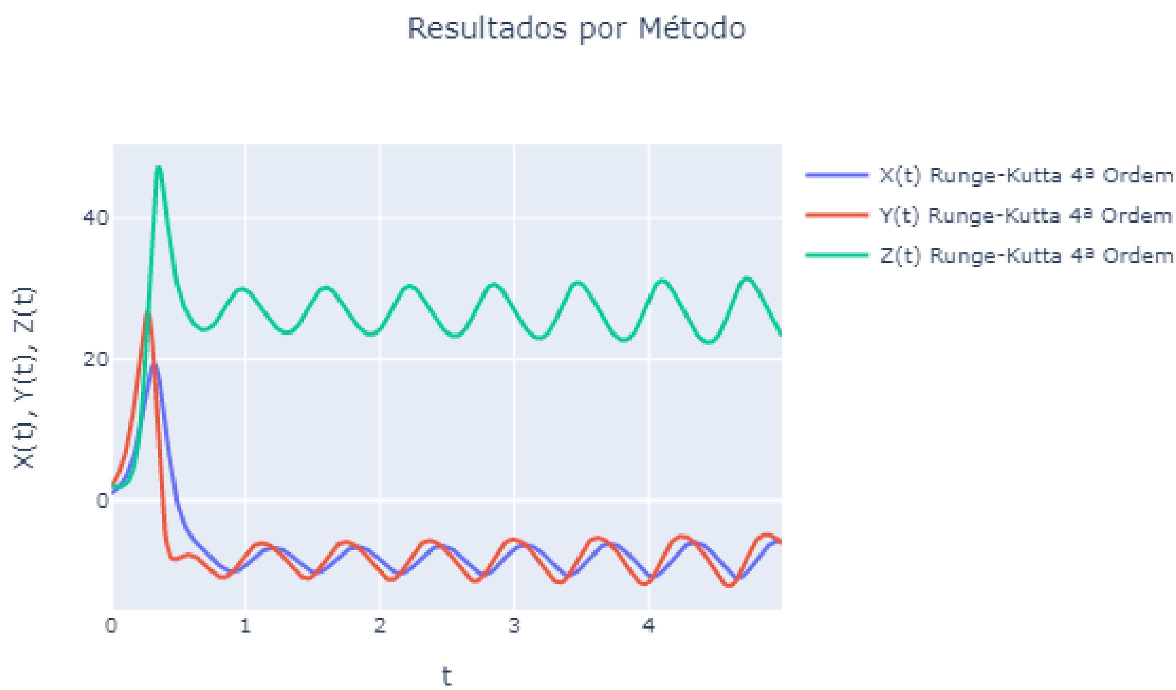
Resultados por Método
Variações de I
t
0
−50
−100
0
2
4
6
8
I = -1000 | V0 = -60
I = -1000 | V0 = -50
I = -1000 | V0 = -40
I = -1000 | V0 = -30
I = -1000 | V0 = -20
I = -1000 | V0 = -10
I = -1000 | V0 = 0
I = -1000 | V0 = 10
I = -1000 | V0 = 20
I = -1000 | V0 = 30
I = -1000 | V0 = 40

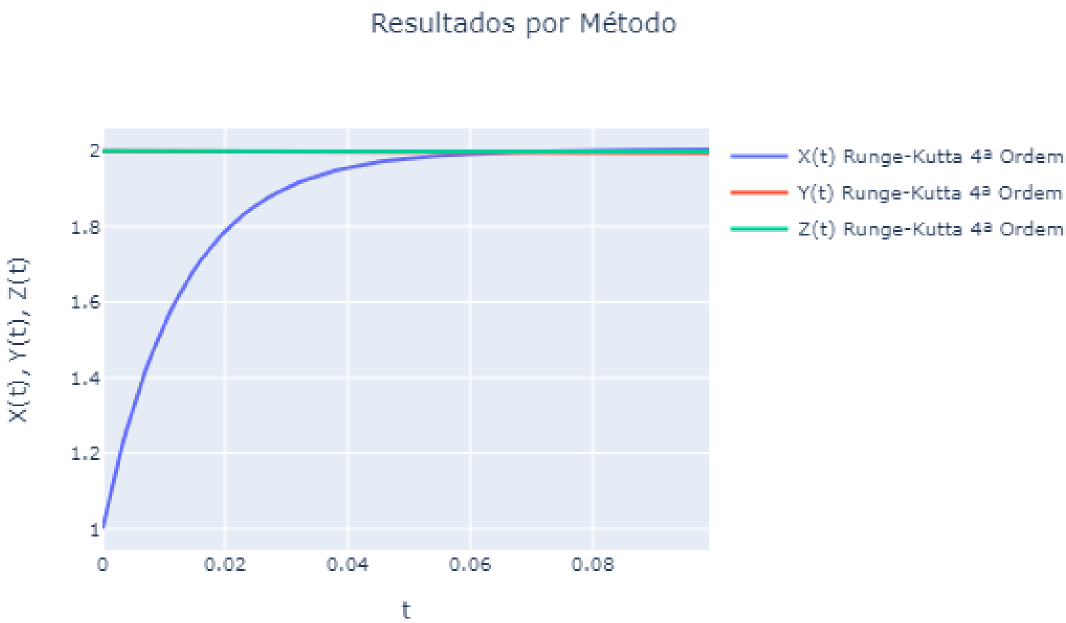
4. Considere os sistemas não lineares de equações diferenciais ordinárias rígidas e as devidas condições iniciais. Resolva-os pelo método de Runge Rutta. Considere $h = 0.1$ e $t_{max} = 5$ para ambos itens. Experimente valores de $t > 5$, se necessário.

$$a) \begin{cases} x'(t) = & 10y(t) - 10x(t); \quad x(0) = 1 \\ y'(t) = & 28x(t) - y(t) - x(t)z(t); \quad y(0) = 2 \\ z'(t) = & x(t)y(t) - \frac{8}{3}z(t); \quad z(0) = 2 \end{cases}$$

b) O sistema de equação não linear dado a seguir é chamado de oregonator. É uma reação química entre *HBrO2* , Br^{-1} e *Ce(IV)*. A solução exata não pode ser obtida por ser um sistema não linear.

$$\begin{cases} x'(t) = & 77.27\left(y(t) + x(t)\left(1 - 8.375 \times 10^{-6}x(t) - y(t)\right)\right); \quad x(0) = 1 \\ y'(t) = & \frac{1}{77.27}\left(z(t) - (1 + x(t))\,y(t)\right); \quad y(0) = 2 \\ z'(t) = & 0.161\,(x(t) - z(t)); \quad z(0) = 2 \end{cases}$$





5. **Modelo para análise da expressão gênica na célula envolvendo degradação de proteínas**. A análise da expressão gênica é um campo de estudo crucial na biologia molecular e na genética, pois nos permite entender como os genes são regulados e expressos em uma célula. Um modelo apresentado é proposto para analisar a expressão gênica em termos de variação temporal da concentração de DNA, mRNA e de proteínas, juntamente com a estabilidade de moléculas processos que ocorrem na célula. Tal modelo é obtido em termos de um sistema de equações diferenciais juntamente com condições iniciais baseadas em as condições físicas e fisiológicas do problema. Os método de Euler e Runge Kutta são ferramentas úteis para modelar a dinâmica da expressão gênica na célula envolvendo a degradação de proteínas. Usando tais métodos, podemos calcular a concentração de proteínas e mRNA em diferentes pontos do tempo

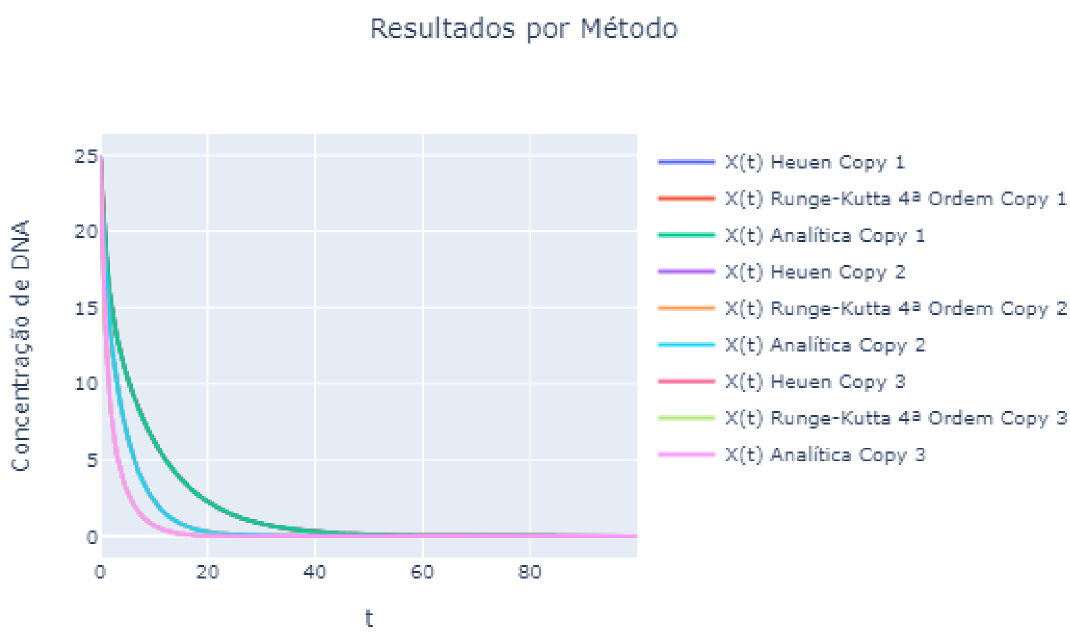
$$\begin{cases} w'(t) = & k_0 w(t) - k_1 w(t) + k_2 x(t) \\ x'(t) = & k_1 w(t) - k_2 x(t) - k_3 x(t) \\ p'(t) = & k_3 x(t) - k_4 p(t) \end{cases}$$

onde $w(t)$, $x(t)$ e $p(t)$ representam, respectivamente, a concentração de *DNA*, *mRNA* e *proteínas*. No sistema, k_0, k_1, k_2, k_3 e k_4 são as taxas de replicação, transcrição, transcrição reversa, translação e degradação da proteína, respectivamente.

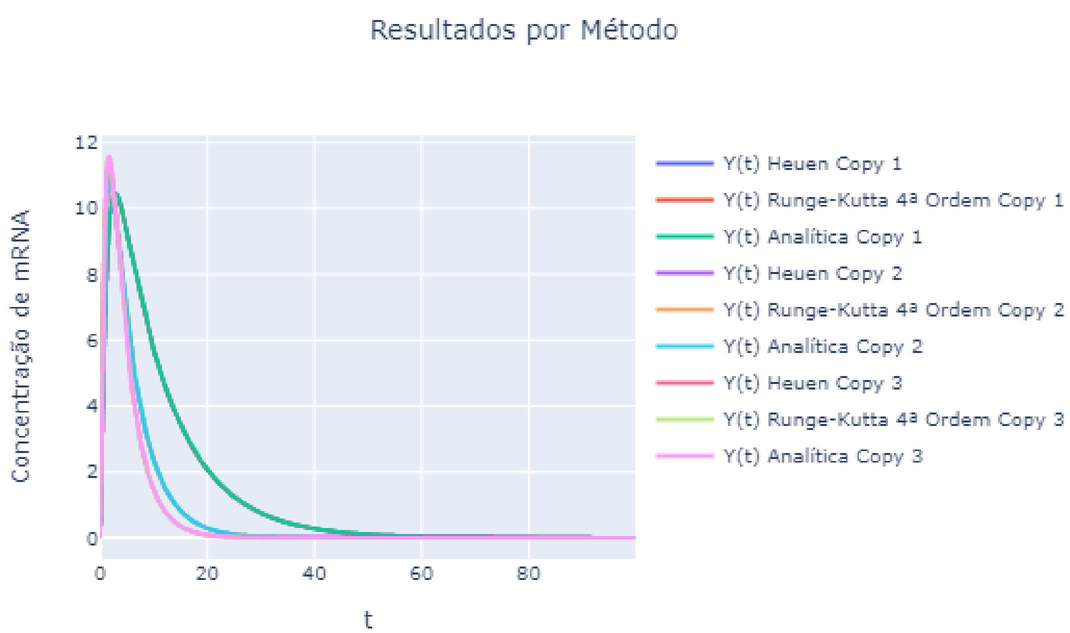
Os método de Euler e Runge Kutta, por exemplo, são ferramentas úteis para modelar a dinâmica da expressão gênica na célula envolvendo a degradação de proteínas. Usando tais métodos, podemos calcular a concentração de proteínas e mRNA em diferentes pontos do tempo. A solução analítica para o modelo apresentado são dadas por

$$\begin{cases} w(t) = & \frac{w_0}{\lambda_3-\lambda_2}\left[e^{\lambda_3 t}\left(\lambda_3+k_2+k_3\right) - e^{\lambda_2 t}\left(\lambda_2+k_2+k_3\right)\right] \\ x(t) = & \frac{w_0 k_1}{\lambda_3-\lambda_2}\left(e^{\lambda_3 t} - e^{\lambda_2 t}\right) \\ p(t) = & \frac{w_0 k_1 k_3}{\lambda_2\lambda_3(\lambda_3-\lambda_2)} e^{\lambda_1 t}\left[\frac{e^{(\lambda_3-\lambda_1)t}-1}{\lambda_3-\lambda_1} - \frac{e^{(\lambda_2-\lambda_1)t}-1}{\lambda_2-\lambda_1}\right] \end{cases}$$

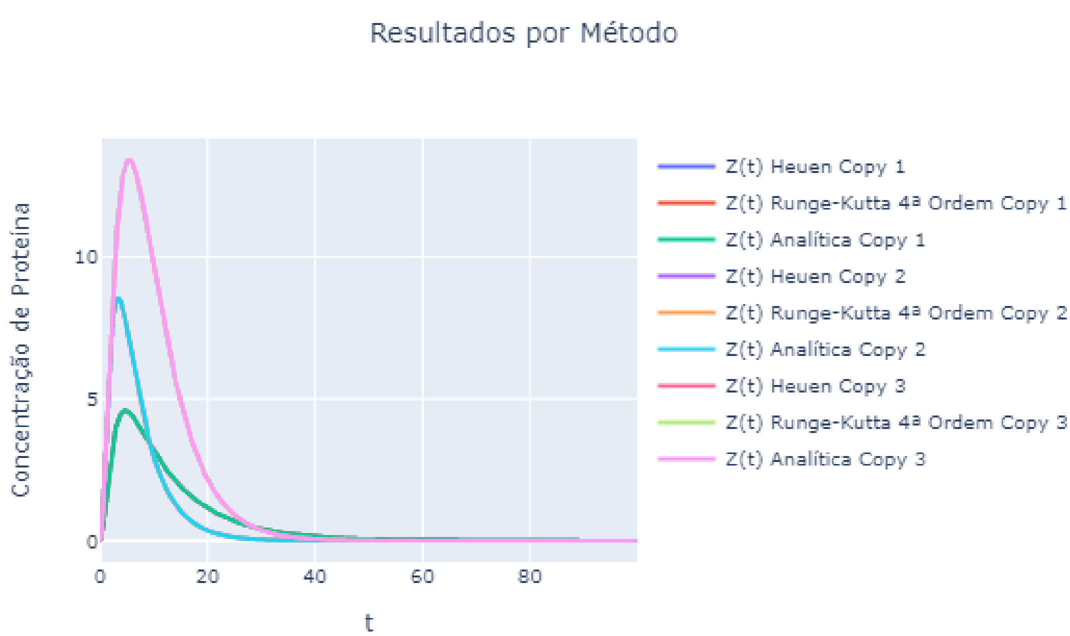
(a) Apresente a solução numérica para o sistema por meio dos métodos de **Heun** e **Runge Kutta de quarta ordem**. Exprima os resultados por meio de gráficos usando as taxas dos casos 1, 2 e 3, apresentado nas tabelas do **Anexo I**. Considere $w_0 = 25$.



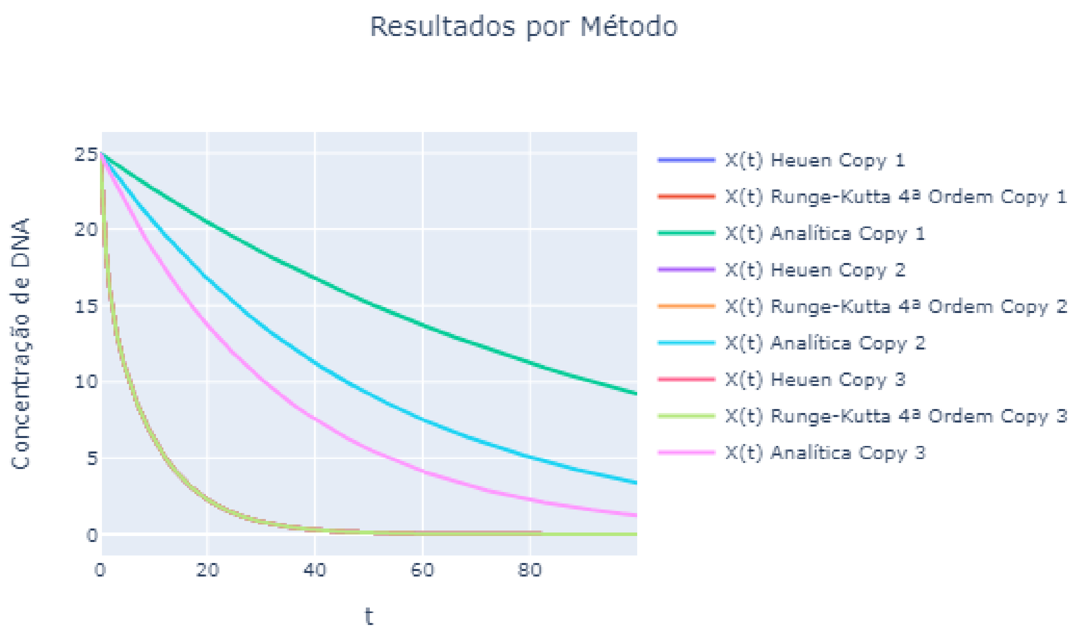
Resultados por Método
Concentração de DNA
t
X(t) Heuen Copy 1
X(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 1
X(t) Analítica Copy 1
X(t) Heuen Copy 2
X(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 2
X(t) Analítica Copy 2
X(t) Heuen Copy 3
X(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 3
X(t) Analítica Copy 3



Resultados por Método
Concentração de mRNA
t
Y(t) Heuen Copy 1
Y(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 1
Y(t) Analítica Copy 1
Y(t) Heuen Copy 2
Y(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 2
Y(t) Analítica Copy 2
Y(t) Heuen Copy 3
Y(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 3
Y(t) Analítica Copy 3



Resultados por Método
Concentração de Proteína
t
Z(t) Heuen Copy 1
Z(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 1
Z(t) Analítica Copy 1
Z(t) Heuen Copy 2
Z(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 2
Z(t) Analítica Copy 2
Z(t) Heuen Copy 3
Z(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 3
Z(t) Analítica Copy 3


Resultados por Método
Concentração de DNA
0
5
10
15
20
25
0
20
40
60
80
t
X(t) Heuen Copy 1
X(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 1
X(t) Analítica Copy 1
X(t) Heuen Copy 2
X(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 2
X(t) Analítica Copy 2
X(t) Heuen Copy 3
X(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 3
X(t) Analítica Copy 3

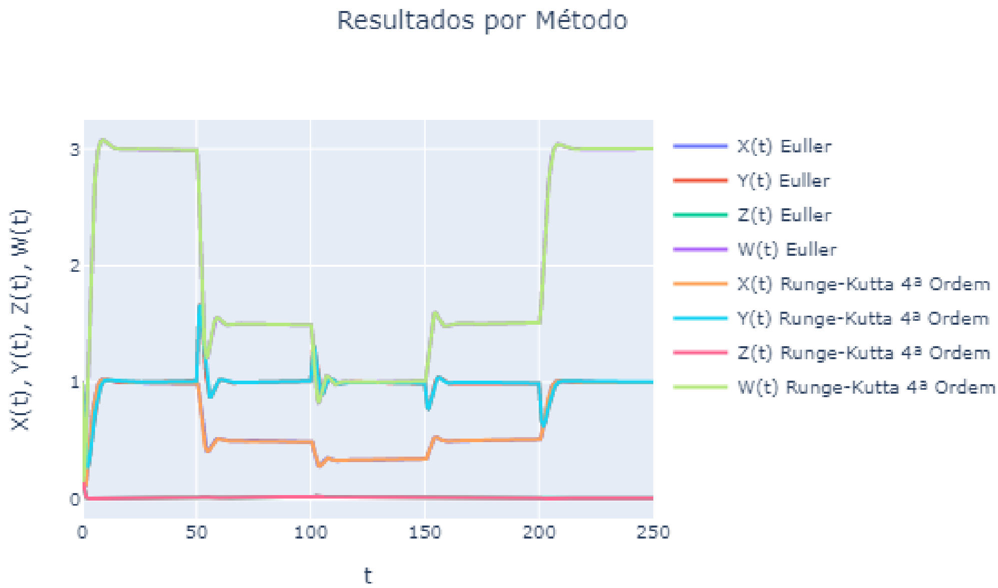

Resultados por Método
Concentração de mRNA
0
2
4
6
8
10
0
20
40
60
80
t
Y(t) Heuen Copy 1
Y(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 1
Y(t) Analítica Copy 1
Y(t) Heuen Copy 2
Y(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 2
Y(t) Analítica Copy 2
Y(t) Heuen Copy 3
Y(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 3
Y(t) Analítica Copy 3


Resultados por Método
Concentração de Proteína
0
1
2
3
4
0
20
40
60
80
t
Z(t) Heuen Copy 1
Z(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 1
Z(t) Analítica Copy 1
Z(t) Heuen Copy 2
Z(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 2
Z(t) Analítica Copy 2
Z(t) Heuen Copy 3
Z(t) Runge-Kutta 4ª Ordem Copy 3
Z(t) Analítica Copy 3

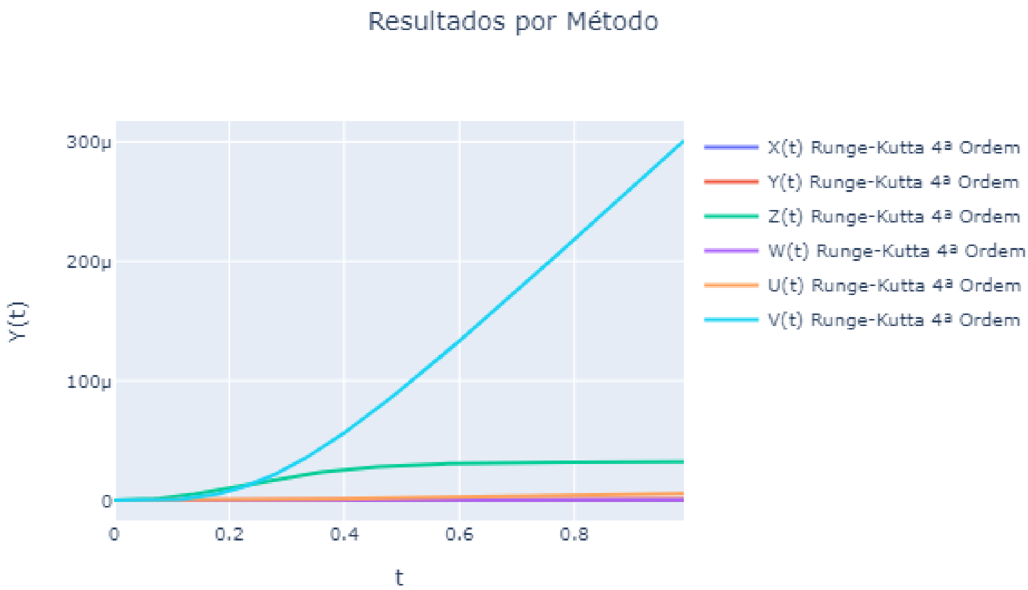
6. **Modelo Cinético**: Considere as seguintes condições iniciais: x_0, y_0, z_0, $w_0 = [1, 1, 1, 1]$, com passo 0.01 e as taxas $k_1 = 1$, $k_2 = 3$, $k_3 = 2$, $k_4 = k_1$, $k_5 = 50$ e $k_6 = k_4$.

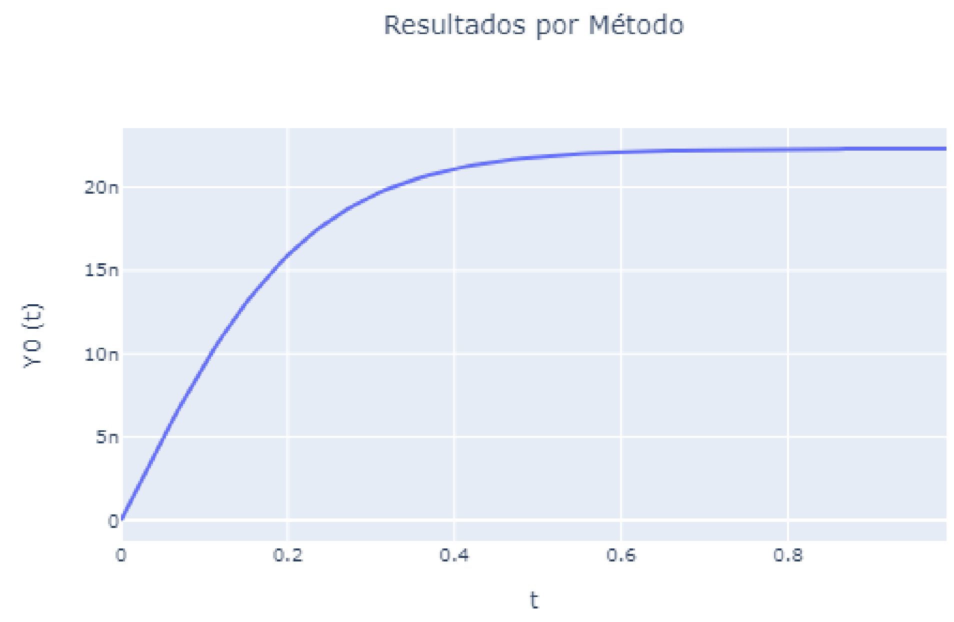
$$\begin{cases} x'(t) = & k_1 w(t) - k_2 x(t) \\ y'(t) = & k_3 input \times x(t) - k_4 y(t) \\ z'(t) = & k_4 y(t) - k_5 z(t) w(t) \\ w'(t) = & k_6 - k_5 z(t) w(t) \end{cases}$$

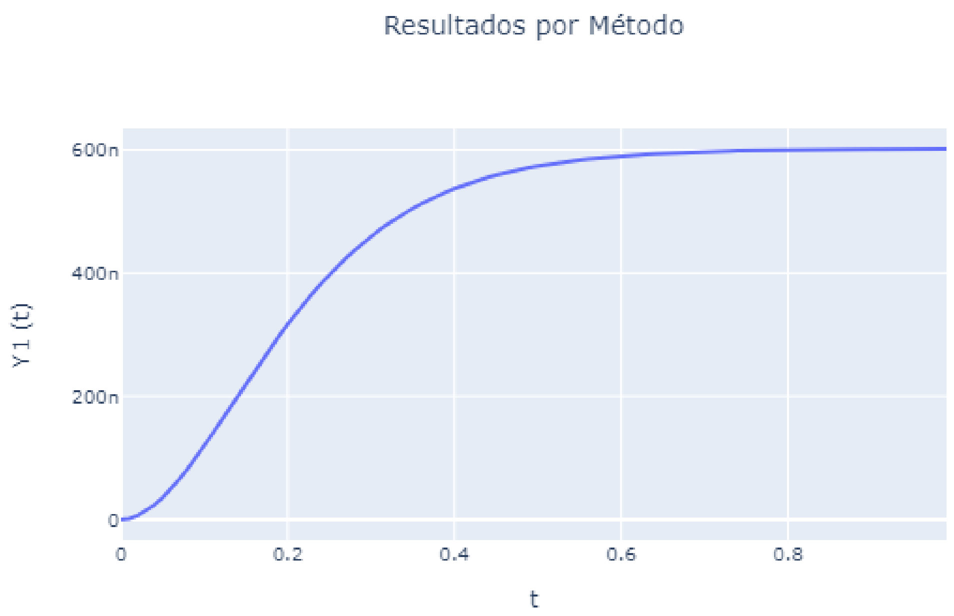
Para a variável "*input*" considere 0.5 para $t < 50$; 1 para $t < 100$; 1.5 para$t < 150$; 1 para $t < 200$ e 0.5 para $t < 250$. Resolva o sistema usando o método de Runge Kutta e compare com o método de Euler.

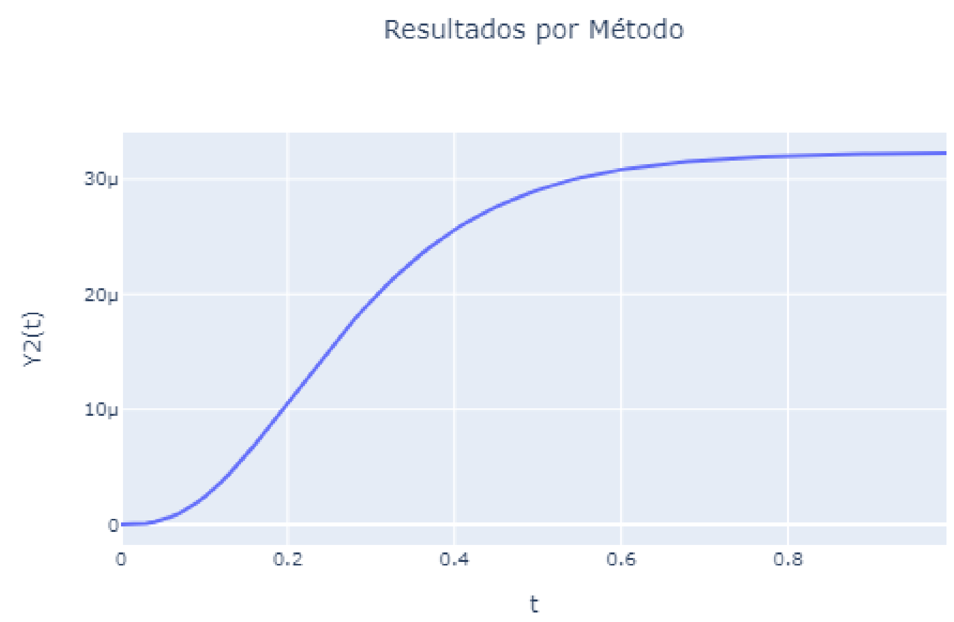


7. Reproduzir o **Anexo II**.

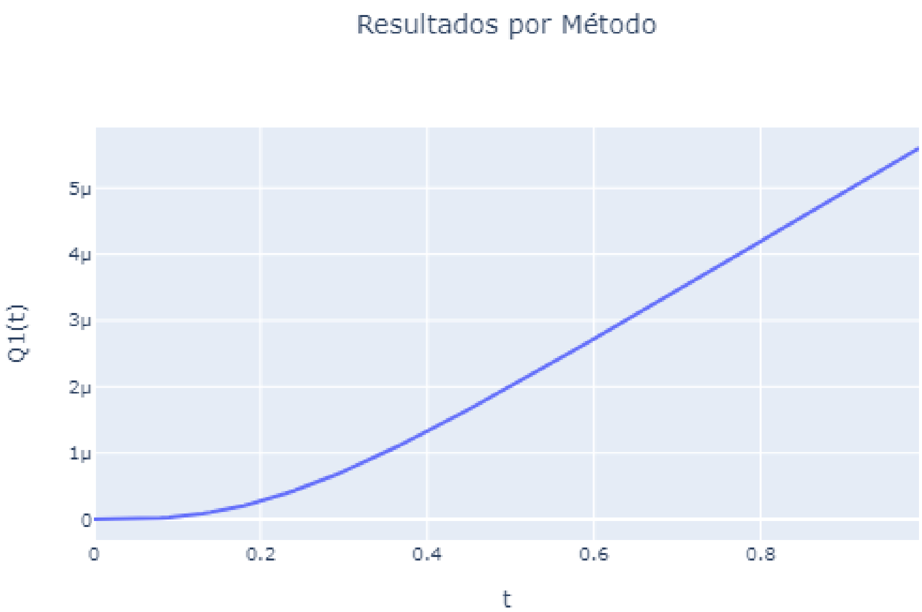



Resultados por Método
Y0 (t)
20n
15n
10n
5n
0
0.2
0.4
0.6
0.8
t


Resultados por Método
Y1 (t)
600n
400n
200n
0
0.2
0.4
0.6
0.8
t


Resultados por Método
Y2(t)
30μ
20μ
10μ
0
0.2
0.4
0.6
0.8
t


Resultados por Método
Q0(t)
200n
150n
100n
50n
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
t


Resultados por Método
Q1(t)
5μ
4μ
3μ
2μ
1μ
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
t


Resultados por Método
Q2(t)
300μ
200μ
100μ
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
t