

UERJ – IPRJ – DMC  
Métodos Numéricos para Equações Diferenciais – 2022/2  
Grazione de Souza

Os trabalhos devem ser entregues com relatórios dedicados à descrição dos casos abordados e à apresentação de resultados, com uso de gráficos, tabelas e/ou listas de itens do que se observou, em função da pertinência do teste realizado. Não são necessárias seções de Introdução, Revisão Bibliográfica, Metodologia, Discussão e Conclusões. Deve-se incluir a bibliografia consultada e os códigos desenvolvidos. Questões específicas em avaliações estarão ligadas aos trabalhos, incluindo discussão/conclusões com relação aos resultados obtidos (a não entrega dos trabalhos inviabiliza a correção das questões a eles relacionadas). Mais orientações serão repassadas nas aulas.

**Trabalho 1 – Parte 1**

As seguintes equações definem as concentrações de três reagentes:

$$\frac{dc_a}{dt} = -\alpha c_a c_c + c_b,$$

$$\frac{dc_b}{dt} = \beta c_a c_c - c_b$$

e

$$\frac{dc_c}{dt} = -\gamma c_a c_c + c_b - 2c_c.$$

Se as condições iniciais são  $c_a = A$ ,  $c_b = 0$  e  $c_c = C$ , determine as concentrações para tempos de  $t = 0$  até  $t = t_{max}$ . Utilize o método de Runge-Kutta de 3ª ordem já apresentado em aula. Cada equipe deve adotar seu próprio conjunto de dados em termos dos valores de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $t_{max}$ , observando que a escala de  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  é por volta de uma dezena,  $A$  e  $C$  tem a escala de algumas dezenas e  $t_{max}$  tem valor de algumas unidades. Teste diferentes valores de passo de tempo para obter uma faixa de valores para qual não ocorram problemas de estabilidade. Realize um estudo de refinamento de malha computacional e um estudo de análise de sensibilidade quando da variação de parâmetros do modelo.

**Trabalho 1 – Parte 2**

A concentração  $C$  de um componente químico ao longo de um tubo de comprimento  $L$  (na escala de algumas unidades) é modelada pela equação

$$D \frac{d^2 C}{dx^2} - kC = 0.$$

Em  $x = 0$ , existe uma quantidade tal de reagentes de forma que  $C = 0, 1$ . Em  $x = L$ , existe um material absorvente de ação rápida, de forma que é razoável utilizar a hipótese de  $C = 0$ . Determine a concentração ao longo do tubo, considerando que  $D$  está na escala de  $\alpha 10^{-6}$  e  $k$  na escala de  $\beta 10^{-6}$ , onde  $\beta$  pode ser de 2 a 5 vezes maior do que  $\alpha$  (este, na escala da unidade). Cada equipe deve adotar seu próprio conjunto de dados em termos destes parâmetros. Realize um estudo de refinamento de malha computacional e um estudo de análise de sensibilidade quando da variação de parâmetros do modelo.

**Entrega: arquivo .pdf (com códigos anexados) até o final do dia 19/12/2022 e códigos para o email [grazione.iprj@gmail.com](mailto:grazione.iprj@gmail.com).**

### Trabalho 2 – Parte 1

A concentração  $C$  de um componente químico ao longo de um tubo de comprimento  $L$  (na escala de algumas dezenas) é modelada pela equação

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

com condições auxiliares

$$C(x, 0) = C_i,$$

$$C(0, t) = C_E$$

e

$$\left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x=L} = 0.$$

Utilize uma formulação totalmente implícita e determine a concentração ao longo do tubo, considerando que  $\alpha$  está na escala de  $\beta 10^{-6}$  ( $\beta$  na escala da unidade). Cada equipe deve adotar seu próprio conjunto de dados em termos destes parâmetros. Realize um estudo de refinamento de malha computacional e um estudo de análise de sensibilidade quando da variação de parâmetros do modelo.

### Trabalho 2 – Parte 2

A concentração  $C$  de um componente químico ao longo de um tubo de comprimento  $L$  (na escala de algumas dezenas) é modelada pela equação

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} = 0$$

com condições auxiliares

$$C(x, 0) = C_i,$$

$$C(0, t) = C_E$$

e

$$\left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x=L} = 0.$$

Utilize uma formulação explícita e determine a concentração ao longo do tubo, considerando que  $\bar{u}$  está na escala da unidade). Cada equipe deve adotar seu próprio conjunto de dados em termos destes parâmetros. Realize um estudo de refinamento de malha computacional e um estudo de análise de sensibilidade quando da variação de parâmetros do modelo.

**Entrega:** arquivo .pdf (com códigos anexados) até o final do dia 07/02/2023 e códigos para o email [grazione.iprj@gmail.com](mailto:grazione.iprj@gmail.com).