

# Cálculo Numérico - MS211F - 1S/2024

Pedro Henrique Martins Belo RA: 267809

Isadora Santos de Souza RA: 257032

Sarah Pereira Teixeira Silva RA: 258968

11 de junho de 2024

## 0.1 Questão 1:

Abaixo segue o código feito, e neste primeiro caso optamos por colocar os valores de  $K_s$  e  $K_g$  direto no sistema.

```
1 function [t, cg, cs] = runge_kutta_4_system(f, g, t0, cg0, cs0, h, n)
2 % f = fun    o que define dy/dt = f(t, cg, cs)
3 % g = fun    o que define dcs/dt = g(t, cg, cs)
4 % t0 = valor inicial de t
5 % cg0 = valor inicial de cg
6 % cs0 = valor inicial de cs
7 % h = tamanho do passo
8 % n = n mero de passos
9
10 % Inicializando os vetores de t, cg, cs:
11 t = zeros(1, n+1);
12 cg = zeros(1, n+1);
13 cs = zeros(1, n+1);
14
15 % Definindo os valores iniciais:
16 t(1) = t0;
17 cg(1) = cg0;
18 cs(1) = cs0;
19
20 % M todo de Runge-Kutta de 4    ordem para sistemas de EDOs:
21 for i = 1:n
22     k1cg = h * f(t(i), cg(i), cs(i));
23     k1cs = h * g(t(i), cg(i), cs(i));
24
25     k2cg = h * f(t(i) + h/2, cg(i) + k1cg/2, cs(i) + k1cs/2);
26     k2cs = h * g(t(i) + h/2, cg(i) + k1cg/2, cs(i) + k1cs/2);
27
28     k3cg = h * f(t(i) + h/2, cg(i) + k2cg/2, cs(i) + k2cs/2);
29     k3cs = h * g(t(i) + h/2, cg(i) + k2cg/2, cs(i) + k2cs/2);
30
31     k4cg = h * f(t(i) + h, cg(i) + k3cg, cs(i) + k3cs);
32     k4cs = h * g(t(i) + h, cg(i) + k3cg, cs(i) + k3cs);
33
34     cg(i+1) = cg(i) + (k1cg + 2*k2cg + 2*k3cg + k4cg)/6;
35     cs(i+1) = cs(i) + (k1cs + 2*k2cs + 2*k3cs + k4cs)/6;
36     t(i+1) = t(i) + h;
37 end
38 end
39
40 % Exemplo do uso:
41
42 % Definindo as fun    es f(t, cg, cs) e g(t, cg, cs):
43 f = @(t, cg, cs) -0.92 * cg;
44 g = @(t, cg, cs) 0.92 * cg - 0.35 * cs;
45
46 % Valores iniciais:
47 t0 = 0;
48 cg0 = 0.25;
```

```

49 cs0 = 0;
50
51 % Parâmetros do modelo:
52 h = 1; % Tamanho do passo (1 hora)
53 n = 24; % Número de passos (24 horas)
54
55 % Chamando a função:
56 [t, cg, cs] = runge_kutta_4_system(f, g, t0, cg0, cs0, h, n);
57
58 % Plotando os resultados:
59 plot(t, cg, '-.', t, cs, '-.')
60 xlabel('Tempo (h)')
61 ylabel('Concentração (mg/L)')
62 legend('cg', 'cs')
63 title('Concentrações de cg e cs ao longo do tempo')

```

Listing 1: Função Runge-Kutta de 4ª ordem para Sistemas de EDOs

O método usado para resolver este sistema de EDO foi o método de Runge-Kutta de ordem 4, que é um método de Euler aprimorado que possui uma precisão tão boa quanto o método de Taylor, porém não necessita o uso de derivadas.

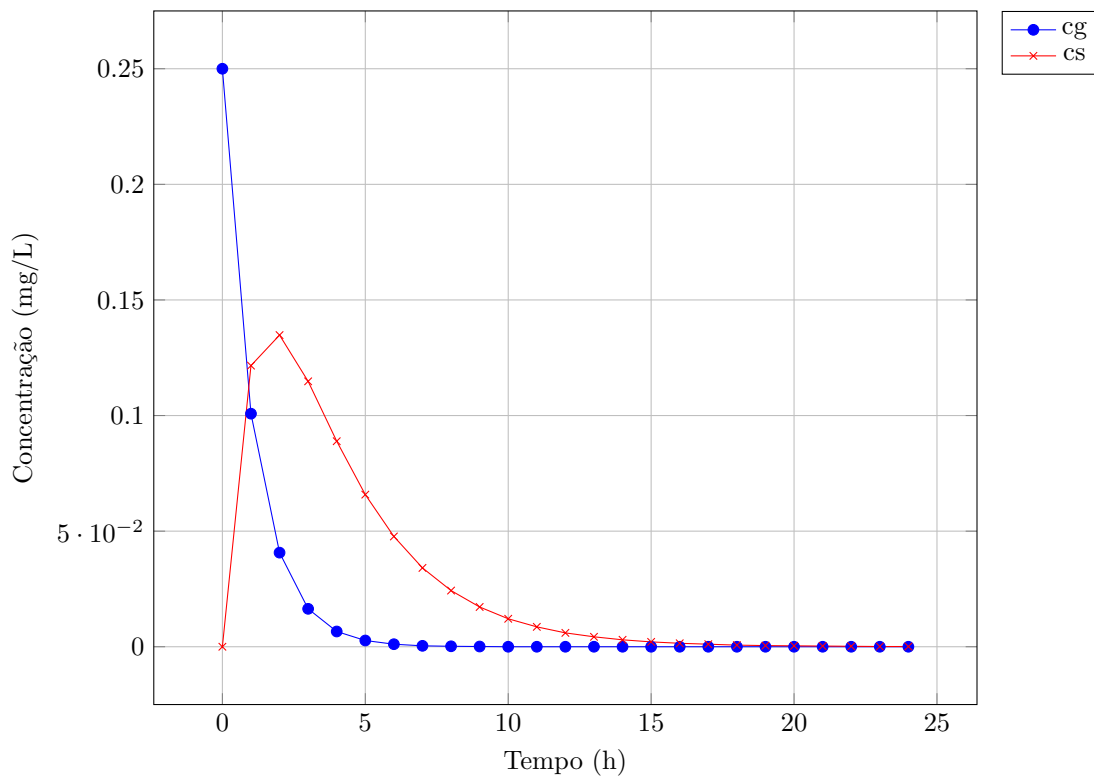


Figura 1: Gráfico das concentrações de cg e cs ao longo do tempo

## 0.2 Questão 2:

Além do gráfico obtido, também geramos uma tabela, com os pontos obtidos nos gráficos que nos ajudam a enxergar o comportamento das concentrações gastrointestinal e sanguínea.

A primeira coluna da tabela é referente ao tempo, enquanto a segunda e terceira, são referentes às concentrações gastrointestinal e sanguínea, respectivamente. Fizemos uma tabela de espaçamento de 0,5h até 12h, pois a partir das 10h ambas as concentrações são muito baixas.

```

1 disp([t', cg', cs'])

```

2	0	0.2500	0
3	0.5000	0.1579	0.0839
4	1.0000	0.0997	0.1235
5	1.5000	0.0629	0.1371
6	2.0000	0.0397	0.1362
7	2.5000	0.0251	0.1277
8	3.0000	0.0158	0.1156
9	3.5000	0.0100	0.1024
10	4.0000	0.0063	0.0893
11	4.5000	0.0040	0.0771
12	5.0000	0.0025	0.0661
13	5.5000	0.0016	0.0563
14	6.0000	0.0010	0.0478
15	6.5000	0.0006	0.0405
16	7.0000	0.0004	0.0342
17	7.5000	0.0003	0.0288
18	8.0000	0.0002	0.0243
19	8.5000	0.0001	0.0204
20	9.0000	0.0001	0.0172
21	9.5000	0.0000	0.0145
22	10.0000	0.0000	0.0121
23	10.5000	0.0000	0.0102
24	11.0000	0.0000	0.0086
25	11.5000	0.0000	0.0072
26	12.0000	0.0000	0.0060

Listing 2: Valores de  $t$ ,  $cg$  e  $cs$  ao longo do tempo

Vemos que a droga terá efeito terapêutico apenas nas primeiras 4h, mais precisamente no intervalo de tempo  $[3.5, 4.0]$ . A concentração máxima no sangue fica no intervalo de tempo  $[1.0, 2.0]$ , mais precisamente próximo de 1.5h, como visto pela tabela.

### 0.3 Questão 3:

Implementamos em Octave a seguinte rotina, criando uma variável  $\Delta T$  que nos permite analisar o comportamento das concentrações com doses repetidas em diversos intervalos de tempo.

```

1 % Fun o Runge-Kutta de 4 ordem para Sistemas de EDOs
2 function [t, cg, cs] = runge_kutta_doses(f_cg, f_cs, t0, cg0, cs0, h, total_tempo,
   delta_t, dose_gastro, dose_sangue)
3 % f_cg = fun o que define dy/dt = f_cg(t, cg, cs)
4 % f_cs = fun o que define dcs/dt = f_cs(t, cg, cs)
5 % t0 = valor inicial de t
6 % cg0 = valor inicial de cg (concentracao inicial no gastro intestinal)
7 % cs0 = valor inicial de cs (concentracao inicial no sangue)
8 % h = tamanho do passo
9 % total_tempo = tempo total de simulacao
10 % delta_t = intervalo de tempo entre as doses
11 % dose_gastro = valor da dose adicional no gastrointestinal
12 % dose_sangue = valor da dose adicional no sangue
13
14 % Calculando o numero de passos:
15 n = round(total_tempo/h);
16
17 % Inicializando os vetores de t, cg, cs:
18 t = zeros(1, n+1);
19 cg = zeros(1, n+1);
20 cs = zeros(1, n+1);
21
22 % Definindo os valores iniciais:
23 t(1) = t0;
24 cg(1) = cg0;
25 cs(1) = cs0;
26
27 % Metodo de Runge-Kutta de 4 ordem para sistemas de EDOs:
28 for i = 1:n
29 % Aplicar a dose adicional a cada intervalo de delta_t:

```

```

30     if mod(t(i), delta_t) == 0 && t(i) ~= 0
31         cg(i) = cg(i) + dose_gastro;
32         cs(i) = cs(i) + dose_sangue;
33     end
34
35     % Calculando os k_1, k_2, k_3 e k_4 para cg e cs:
36
37     k1_cg = h * f_cg(t(i), cg(i), cs(i));
38     k1_cs = h * f_cs(t(i), cg(i), cs(i));
39
40     k2_cg = h * f_cg(t(i) + h/2, cg(i) + k1_cg/2, cs(i) + k1_cs/2);
41     k2_cs = h * f_cs(t(i) + h/2, cg(i) + k1_cg/2, cs(i) + k1_cs/2);
42
43     k3_cg = h * f_cg(t(i) + h/2, cg(i) + k2_cg/2, cs(i) + k2_cs/2);
44     k3_cs = h * f_cs(t(i) + h/2, cg(i) + k2_cg/2, cs(i) + k2_cs/2);
45
46     k4_cg = h * f_cg(t(i) + h, cg(i) + k3_cg, cs(i) + k3_cs);
47     k4_cs = h * f_cs(t(i) + h, cg(i) + k3_cg, cs(i) + k3_cs);
48
49     cg(i+1) = cg(i) + (k1_cg + 2*k2_cg + 2*k3_cg + k4_cg)/6;
50     cs(i+1) = cs(i) + (k1_cs + 2*k2_cs + 2*k3_cs + k4_cs)/6;
51     t(i+1) = t(i) + h;
52 end
53 end
54
55 % Exemplo do uso:
56
57 % Definindo as fun    es f_cg(t, cg, cs) e f_cs(t, cg, cs):
58
59 ks = 0.35; % Constante de eliminacao
60 kg = 0.92; % Constante de absorcao
61
62 f_cg = @(t, cg, cs) -kg * cg;
63 f_cs = @(t, cg, cs) -ks * cs + kg * cg;
64
65 % Valores iniciais:
66 t0 = 0;
67 cg0 = 0.25; % Concentracao inicial no gastrointestinal
68 cs0 = 0; % Concentracao inicial no sangue
69
70 % Parametros do metodo:
71 h = 1;
72 total_tempo = 24; % Tempo total de simulacao
73 delta_t = 4; % Intervalo de tempo entre as doses
74 dose_gastro = 0.25; % Valor da dose adicionar no trato gastrointestinal
75 dose_sangue = 0; % Valor da dose adicionar no sangue (se houver)
76
77 % Chamando a funcao:
78 [t, cg, cs] = runge_kutta_doses(f_cg, f_cs, t0, cg0, cs0, h, total_tempo, delta_t,
    dose_gastro, dose_sangue);

```

Listing 3: Função Runge-Kutta de 4ª ordem para Sistemas de EDOs

## 0.4 Questão 4:

Abaixo os gráficos das concentrações, sanguínea e gastrointestinal, num intervalo de tempo  $[0, 24]$  e com um  $\Delta T = 4h$ .

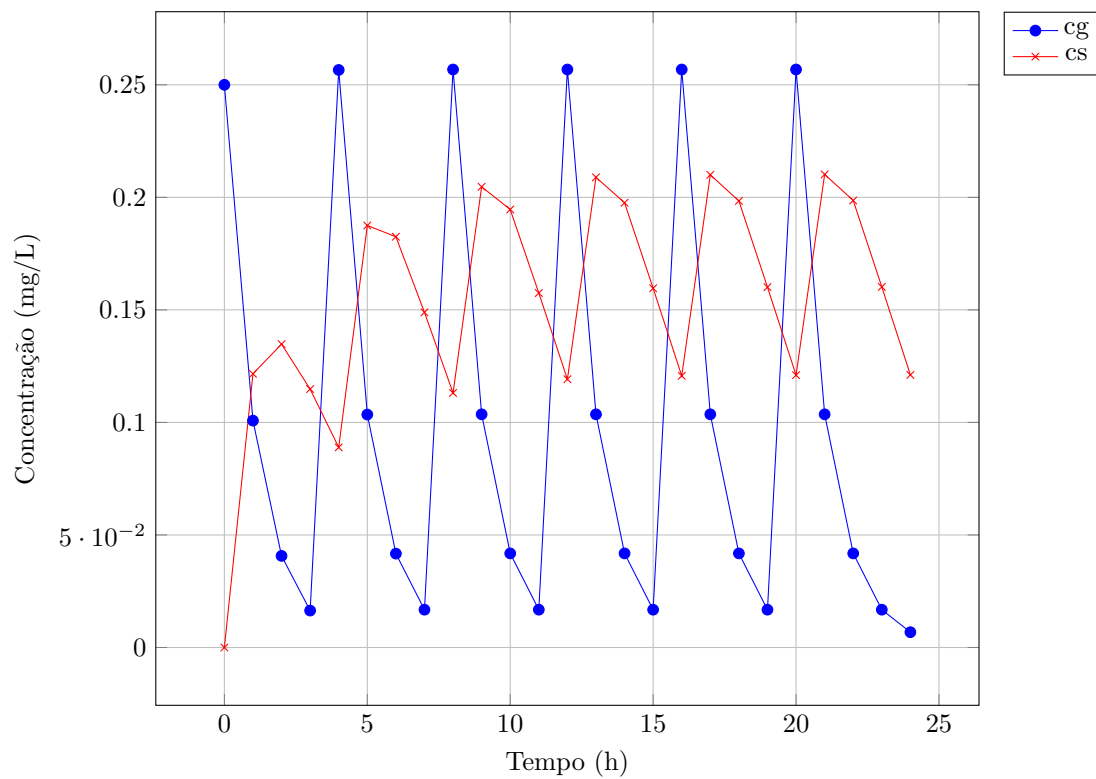


Figura 2: Gráfico das concentrações de cg e cs ao longo do tempo

### 0.5 Questão 5:

Analisando a tabela abaixo vemos que a concentração mínima da droga na corrente sanguínea do paciente, acontece no tempo  $t = 4h$  é de 0.0889 mg/L. A concentração máxima ocorre no tempo  $t = 21$  e é de 0.2102 mg/L.

```
1 disp([t', cg', cs']);
2
3     0         0.2500         0
4     1.0000     0.1008     0.1216
5     2.0000     0.0407     0.1348
6     3.0000     0.0164     0.1148
7     4.0000     0.2566     0.0889
8     5.0000     0.1035     0.1875
9     6.0000     0.0417     0.1825
10    7.0000     0.0168     0.1489
11    8.0000     0.2568     0.1131
12    9.0000     0.1036     0.2047
13   10.0000     0.0418     0.1946
14   11.0000     0.0168     0.1575
15   12.0000     0.2568     0.1192
16   13.0000     0.1036     0.2089
17   14.0000     0.0418     0.1976
18   15.0000     0.0168     0.1596
19   16.0000     0.2568     0.1207
20   17.0000     0.1036     0.2100
21   18.0000     0.0418     0.1984
22   19.0000     0.0168     0.1601
23   20.0000     0.2568     0.1210
24   21.0000     0.1036     0.2102
25   22.0000     0.0418     0.1986
26   23.0000     0.0168     0.1602
27   24.0000     0.0068     0.1211
```

Listing 4: Concentração mínima do medicamento na corrente sanguínea

Com isso, concluímos que o tratamento não é eficaz se separarmos a repetição de doses em intervalos  $\Delta T = 4h$  pois como podemos perceber, em  $t = 4h$  não ficamos acima de limiar  $Cl = 0.1mg/L$ .

## 0.6 Questão 6:

Analisando a tabela e o gráfico abaixo vemos que a concentração mínima da droga na corrente sanguínea do paciente, acontece no tempo  $t = 6h$  é de  $0.0477 \text{ mg/L}$ . A concentração máxima ocorre no tempo  $t = 20$  e é de  $0.1624 \text{ mg/L}$ . Com isso, concluímos que o tratamento não é eficaz se separarmos a repetição de doses em intervalos  $\Delta T = 6h$  pois como podemos perceber, em  $t = 6h$  não ficamos acima de limiar  $Cl = 0.1 \text{ mg/L}$  (para  $\Delta T = 6h$  isso ocorre mais vezes, inclusive).

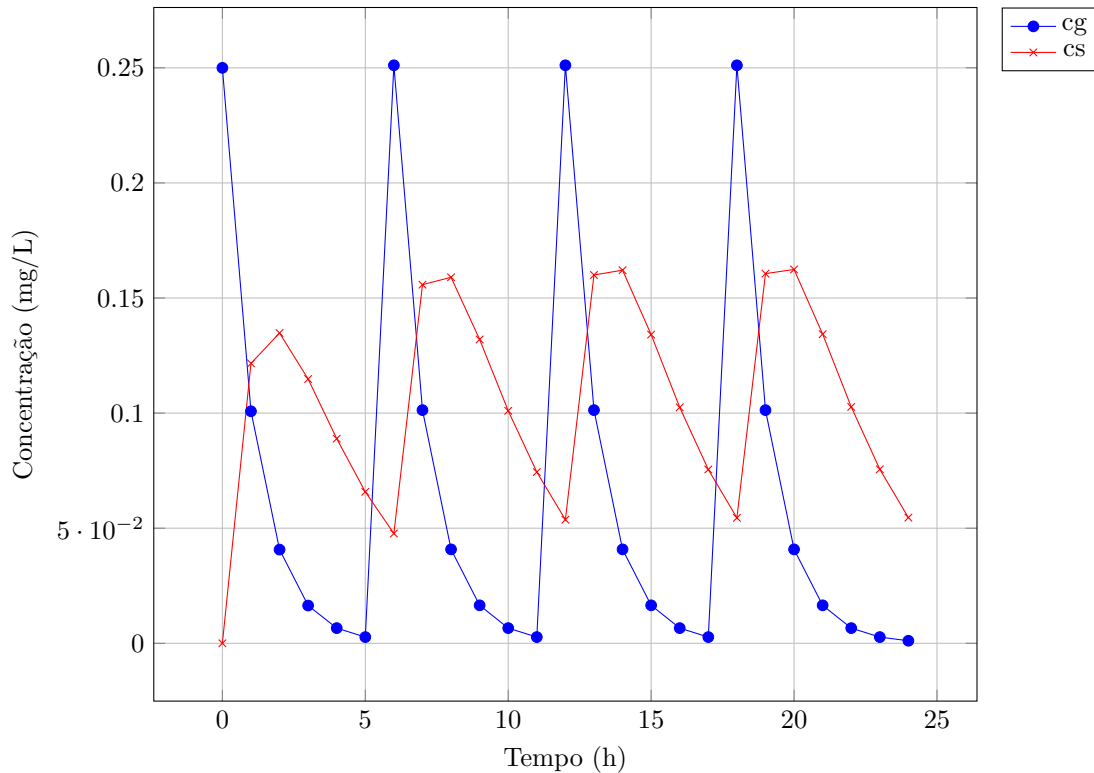


Figura 3: Gráfico das concentrações de cg e cs ao longo do tempo

```

1 disp([t', cg', cs']);
2
3     0         0.2500         0
4     1.0000     0.1008     0.1216
5     2.0000     0.0407     0.1348
6     3.0000     0.0164     0.1148
7     4.0000     0.0066     0.0889
8     5.0000     0.0027     0.0658
9     6.0000     0.2511     0.0477
10    7.0000     0.1013     0.1558
11    8.0000     0.0408     0.1590
12    9.0000     0.0165     0.1320
13   10.0000     0.0066     0.1010
14   11.0000     0.0027     0.0744
15   12.0000     0.2511     0.0537
16   13.0000     0.1013     0.1600
17   14.0000     0.0408     0.1621
18   15.0000     0.0165     0.1341
19   16.0000     0.0066     0.1025
20   17.0000     0.0027     0.0755
21   18.0000     0.2511     0.0545

```

22	19.0000	0.1013	0.1606
23	20.0000	0.0408	0.1624
24	21.0000	0.0165	0.1343
25	22.0000	0.0066	0.1027
26	23.0000	0.0027	0.0756
27	24.0000	0.0011	0.0546

Listing 5: Concentração mínima do medicamento na corrente sanguínea

## 0.7 Questão 7:

Pelo gráfico e a tabela abaixo, para uma melhor eficácia na política de doses repetidas com  $\Delta T = 8h$ , poderíamos aumentar a dose inicial de 0.25mg/L para 1.04mg/L e a partir da segunda dose, recomenda-se a ingestão de 0.98mg/L. Dessa forma teríamos a concentração da droga no sangue sempre acima da Limiar  $Cl = 0.1mg/L$  e sempre abaixo da concentração máxima  $Cm = 0.6mg/L$  como mostramos no gráfico e tabela abaixo.

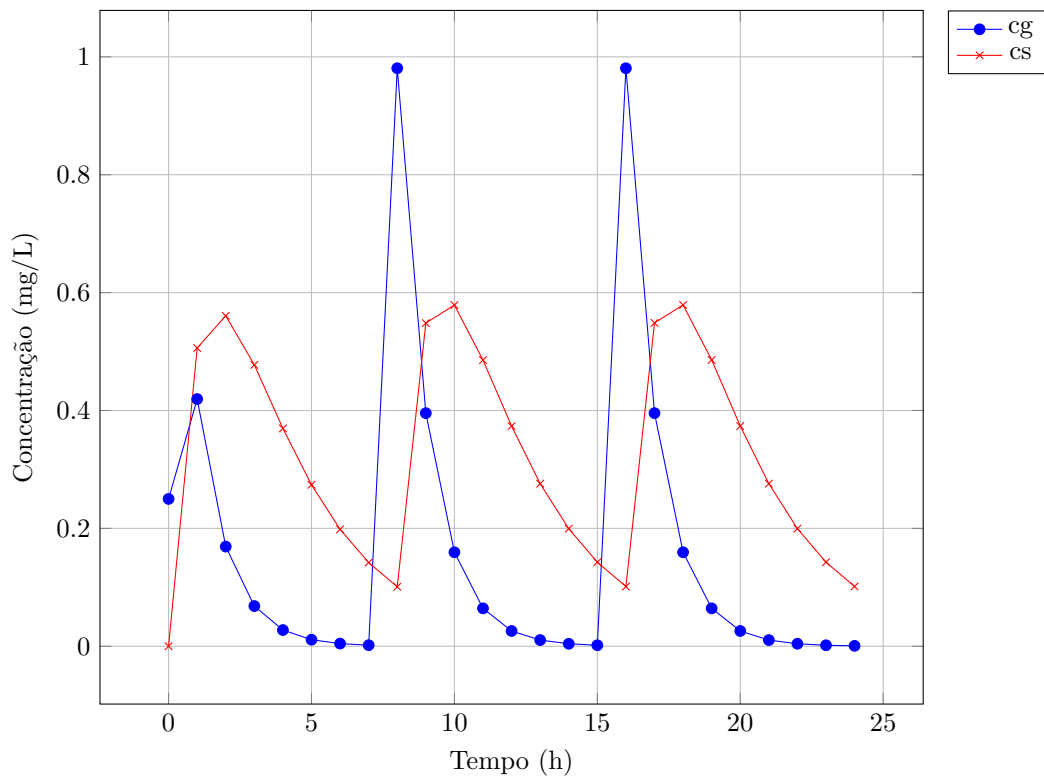


Figura 4: Gráfico das concentrações de cg e cs ao longo do tempo

1	<code>disp([t', cg', cs']);</code>		
2			
3	0	0.2500	0
4	1.0000	0.4194	0.5060
5	2.0000	0.1691	0.5607
6	3.0000	0.0682	0.4774
7	4.0000	0.0275	0.3696
8	5.0000	0.0111	0.2739
9	6.0000	0.0045	0.1984
10	7.0000	0.0018	0.1420
11	8.0000	0.9807	0.1009
12	9.0000	0.3955	0.5483
13	10.0000	0.1595	0.5789
14	11.0000	0.0643	0.4855
15	12.0000	0.0259	0.3735
16	13.0000	0.0105	0.2758

17	14.0000	0.0042	0.1995
18	15.0000	0.0017	0.1426
19	16.0000	0.9807	0.1013
20	17.0000	0.3955	0.5486
21	18.0000	0.1595	0.5790
22	19.0000	0.0643	0.4857
23	20.0000	0.0259	0.3736
24	21.0000	0.0105	0.2759
25	22.0000	0.0042	0.1995
26	23.0000	0.0017	0.1426
27	24.0000	0.0007	0.1014


Listing 6: Concentração mínima do medicamento na corrente sanguínea

## 0.8 Questão 8:

As perguntas abaixo surgiram nas discussões do grupo acerca do trabalho:

- Se ao tomar o remédio eu ingerir uma certa quantidade de água para diminuir a concentração dele no sangue?
- Isso tornaria as doses intervalares mais eficazes?
- Qual seria a quantidade de água necessária para manter a concentração do medicamento no sangue entre os limites mínimos e máximos estabelecidos?
- Qual seria o tempo ótimo de ingestão da dose, com a ingestão de água para que o remédio tenha eficácia máxima?

Eu, Isadora S. de Souza, comprometo-me a ter uma atitude ética e compreendo que um trabalho que não seja meu pode resultar em reprovação sumária nesta disciplina, sem prejuízo a demais sanções previstas no regimento geral da graduação da Unicamp.



Eu, Pedro Henrique Martins Belo, comprometo-me a ter uma atitude ética e compreendo que um trabalho que não seja meu pode resultar em reprovação sumária nesta disciplina, sem prejuízo a demais sanções previstas no regimento geral da graduação da Unicamp.

Pedro H.M. Belo.

Eu, Sarah Luísa Siqueira Silva, comprometo-me a ter uma atitude ética e compreendo que um trabalho que não seja meu pode resultar em reprovação sumária nesta disciplina, sem prejuízo a demais sanções previstas no regimento geral da graduação da Unicamp.

Sarah P.