# Aula 6 - EDO-PVI

Ardson dos S. Vianna Jr.

Departamento de Engenharia Química - USP

15 de fevereiro de 2021

# Introdução

As equações diferenciais ordinárias com problema de valor inicial (EDO-PVI) podem ser representadas por:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \qquad\qquad em \quad x = 0 \quad y = y_0 \tag{1}$$

# Sistema de EDOs

Onde havia y passa a se ter $\vec{y}$, onde havia derivada $df/dy$ passa a se ter o Jacobiano $\partial f_i/\partial y_j$. A definição do sistema de equações fica:

$$\frac{d\vec{y}}{dx} = \vec{f}(x, \vec{y}) \qquad em \quad x = 0 \quad \vec{y} = \vec{y}_0 \tag{2}$$

# Algoritmo para o sistema

Um método de integração, como o método Runge-Kutta-Gil (**RKG**), fica:

$$
\begin{cases}
\vec{k}_1 = h\ \vec{f}(x_i, \vec{u}_i) \\
\vec{k}_2 = h\ \vec{f}(x_i + h/2, \vec{u}_i + \vec{k}_1/2) \\
\vec{k}_3 = h\ \vec{f}(x_i + h/2, \vec{u}_i + a\ \vec{k}_1 + b\ \vec{k}_2) \\
\vec{k}_4 = h\ \vec{f}(x_i + h, \vec{u}_i + c\ \vec{k}_3 + d\ \vec{k}_4) \\
\vec{u}_{i+1} = \vec{u}_i\ +\ \frac{1}{6}(\vec{k}_1 + \vec{k}_4)\ +\ \frac{1}{3}(b\ \vec{k}_2 + d\ \vec{k}_3)
\end{cases}
$$

$$
a = \frac{\sqrt{2}-1}{2} \qquad b = \frac{2-\sqrt{2}}{2} \qquad c = \frac{-\sqrt{2}}{2} \qquad a = 1 + \frac{\sqrt{2}}{2}
$$

# Estabilidade

Alguns conceitos a discutir:

- a acurácia está relacionado com erros absolutos ou relativos de uma quantidade aproximada
- A precisão está relacionada com acurácia de operações como $+$, -, x e $\div$ de quantidades aproximadas.
- instabilidade do modelo: problema mal posto, problema mal condicionado, sistema dinamicamente instável
- instabilidade do algoritmo: estabilidade numérica

# Rigidez

Rigidez (*stifness*) é um fenômeno observado em EDOs onde certos métodos numéricos tornam-se instáveis. A solução é reduzir bastante o passo de integração (tamanho de passo)
exemplo: Avalie o sistema dinâmico com coeficientes constates a seguir:

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \begin{pmatrix} -500,5 & 499,5 \\ 499,5 & -500,5 \end{pmatrix} \vec{y} \qquad y_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

# Rigidez

Análise por autovalores do sistema linear:

- Forma similar ao equivalente unidimensional $\frac{dy}{dt} = k\ y$, que tem como solução $y = c^{te}\ e^{kt}$
- A solução é gerada a partir de operadores diferenciais $\vec{y} = \vec{c}\, e^{\lambda\ t}$.
- Sendo que r são os autovalores e $\vec{c}$ os autovetores associados a matriz A (de $\frac{d\vec{y}}{dt} = A\vec{y}$).

# Rigidez

exemplo: Avalie o sistema dinâmico com coeficientes constates a seguir:

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \begin{pmatrix} -500,5 & 499,5 \\ 499,5 & -500,5 \end{pmatrix} \vec{y} \qquad y_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$\begin{vmatrix} -500,5 - r & 499,5 \\ 499,5 & -500,5 - r \end{vmatrix} = 0 \longrightarrow r_1 = -1 \quad r_2 = -1000$$

$$r_1 = -1 \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$r_2 = -1000 \longrightarrow \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

# Rigidez

A solução geral é:

$$\vec{y}(t) = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-t} + c_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-1000t}$$

$$y_1(t) = c_1 e^{-t} - c_2\ e^{-1000t} \qquad y_2(t) = c_1 e^{-t} + c_2\ e^{-1000t}$$

Aplicando a condição inicial:

$$y_1(t) = 3/2 e^{-t} + 1/2\ e^{-1000t} \qquad y_2(t) = 3/2 e^{-t} - 1/2\ e^{-1000t}$$

# Rigidez

A relação entre autovalores pode servir como uma análise, o grau de rigidez (*stiffness ratio* SR):

$$SR = \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|} \begin{cases} < 20, \text{ problema sem rigidez} \\ > 1.000, \text{ problema apresenta rigidez} \\ > 1.000.000, \text{ problema apresenta muito rigidez} \end{cases}$$

# Rotinas do Scilab

Tabela: Rotinas do Scilab

| nome | sistemas de equações | método |
|---|---|---|
| adams | sem rigidez | método de Adams do lsode |
| stiff | com rigidez | DASSL |
| rk | sem rigidez | Runge-Kutta |
| rkf | sem rigidez | Runge-Kutta-Fehlberg de ordens 4 e 5 |
| fix | sem rigidez | Runge-Kutta-Fehlberg de ordens 4 e 5 |

# Conclusões

i. Grande espectro de algoritmos
ii. Estabilidade
iii. Tempo de máquina e eficiência

# Bibliografia


- A.S. Vianna Jr., *Equações Diferenciais*, Blucher, 2021.
- M.E. Davis, *Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers*, John Wiley & Sons, 1984.
- R.G. Rice, D.D. Do, *Applied Mathematics and modeling for Chemical Engineers*, 2nd edition, Wiley-AIChE,2012.