

ARDSON DOS SANTOS VIANNA JR.

EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Uma visão intuitiva usando exemplos



Blucher

Ardson dos Santos Vianna Jr.

EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Uma visão intuitiva usando exemplos

Marco Aurelio Cremasco
editor

Equações diferenciais: uma visão intuitiva usando exemplos

© 2021 Ardson dos Santos Vianna Jr.

Editora Edgard Blücher Ltda.

Publisher Edgard Blücher

Editor Eduardo Blücher

Coordenação editorial Jonatas Eliakim

Produção editorial Isabel Silva

Revisão de texto Maurício Katayama

Diagramação Ardson dos Santos Vianna Jr.

Capa Leandro Cunha

Imagem da capa iStockphoto

Blucher

Rua Pedroso Alvarenga, 1245, 4º andar

04531-934 – São Paulo – SP – Brasil

Tel.: 55 11 3078-5366

contato@blucher.com.br

www.blucher.com.br

Segundo o Novo Acordo Ortográfico, conforme 5. ed. do *Vocabulário Ortográfico da Língua Portuguesa*, Academia Brasileira de Letras, março de 2009.

É proibida a reprodução total ou parcial por quaisquer meios sem autorização escrita da editora.

Todos os direitos reservados pela Editora Edgard Blücher Ltda.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Angélica Ilacqua CRB-8/7057

Vianna Jr., Ardson dos Santos

Equações diferenciais : uma visão intuitiva usando exemplos / Ardson dos Santos Vianna Jr. ; editado por Marco Aurélio Cremasco. -- São Paulo : Blucher, 2021.

548 p. : il.

Bibliografia

ISBN 978-65-5506-281-6 (impresso)

ISBN 978-65-5506-282-3 (eletrônico)

1. Matemática 2. Equações diferenciais 3. Modelos matemáticos I. Título II. Cremasco, Marco Aurélio

21-0541

CDD 515.33

Índice para catálogo sistemático

I. Equações diferenciais : Matemática

Conteúdo

Lista de figuras	15
Lista de tabelas	19
1 Introdução	21
2 Modelagem e simulação	27
2.1 Modelagem e simulação	27
2.2 Erros	32
2.3 Acurácia e precisão	37
2.4 Softwares	37
2.5 Problemas	38
2.6 Referências	40
3 Gerando uma equação diferencial	41
3.1 Gerando uma equação diferencial	41
3.1.1 Equações básicas	42
3.1.2 Balanço diferencial	44
3.1.3 Condições de contorno	46
3.2 Classificação de equações diferenciais	47
3.3 Geometrias	50
3.4 Algumas equações diferenciais	51
3.5 Problemas	53

3.6	Referências	54
-----	-----------------------	----

4	EDO com coeficientes constantes	55
----------	--	-----------

4.1	Introdução	56
-----	----------------------	----

4.2	EDO de primeira ordem	56
-----	---------------------------------	----

4.3	Equações redutíveis a EDO de primeira ordem	61
-----	---	----

4.3.1	Equação de Bernoulli	61
-------	--------------------------------	----

4.3.2	Equação de Riccati	63
-------	------------------------------	----

4.3.3	Consideração parcial	66
-------	--------------------------------	----

4.3.4	Problemas	67
-------	---------------------	----

4.4	Equações diferenciais com coeficientes constantes	67
-----	--	----

4.4.1	EDO 2a ordem coef. constantes	69
-------	---	----

4.4.2	EDO homogênea de ordem dois	71
-------	---------------------------------------	----

4.4.3	EDOs homogêneas de ordem n	75
-------	--	----

4.4.4	Problemas	78
-------	---------------------	----

4.5	Mais teoria	79
-----	-----------------------	----

4.5.1	Dimensão do espaço solução	79
-------	--------------------------------------	----

4.5.2	Wronskiano	80
-------	----------------------	----

4.5.3	Encontrando uma segunda solução linearmente inde- pendente	81
-------	---	----

4.5.4	Problemas	83
-------	---------------------	----

4.6	EDO não homogênea	83
-----	-----------------------------	----

4.6.1	Coeficientes a determinar	84
-------	-------------------------------------	----

4.6.2	Varição de parâmetros	88
-------	---------------------------------	----

4.6.3	Aplicação simples	92
-------	-----------------------------	----

4.6.4	Problemas	93
-------	---------------------	----

4.7	Estudo de caso: população de bactérias	94
-----	--	----

4.8	Referências	99
-----	-----------------------	----

5	EDO com coeficientes variáveis	101
5.1	Introdução	101
5.2	Equações diferenciais ordinárias com coeficientes variáveis – série de potências	102
5.2.1	Solução em torno de ponto ordinário	102
5.2.2	Problemas	108
5.3	Mais teoria	109
5.4	Solução em pontos singulares – Método de Frobenius	111
5.4.1	Problemas	128
5.5	Equação de Bessel	129
5.5.1	Introdução	129
5.5.2	Função de Bessel de primeira espécie	133
5.5.3	Equação de Bessel de segunda espécie	139
5.5.4	Equação de Bessel de terceira espécie	144
5.5.5	Equação de Bessel modificada	144
5.5.6	Equações redutíveis a Bessel	146
5.5.7	Estudo de caso – aleta triangular	148
5.5.8	Problemas	154
5.6	Referências	155
6	Método da separação de variáveis	157
6.1	Introdução	157
6.2	Sep. variáveis. coord. retang.	158
6.3	Preparando a EDP para ser resolvida	170
6.3.1	Homogeneização das condições de contorno	171
6.3.2	Adimensionando	173
6.4	Difusão em coordenadas retangulares com troca de calor	175
6.5	Difusão em coordenadas retangulares com perda por convecção	184
6.6	Equação da difusão em coordenadas cilíndricas	186
6.7	Homogeneização das C.C. em coord. cil.	195

6.8	Eq. difusão em coord. cil. com C.C. de terceiro tipo	198
6.9	Problemas	208
6.10	Referências	211
7	Método da similaridade	213
7.1	Introdução	213
7.2	Solução por similaridade	214
7.3	Solução particular	220
7.4	Solução de Laplace	222
7.5	Problemas	229
7.6	Referências	230
8	EDO-PVI	231
8.1	Introdução	232
8.2	EDO-PVI	232
8.3	Métodos de Euler	234
8.3.1	Euler explícito	234
8.3.2	Euler implícito	241
8.3.3	Euler semi-implícito	245
8.3.4	Euler modificado: predição-correção	246
8.3.5	Problemas	246
8.4	Métodos Runge-Kutta	251
8.4.1	Métodos Runge-Kutta embutidos	256
8.4.2	Fórmula geral para o método Runge-Kutta	257
8.4.3	Problemas	260
8.5	Método de múltiplos passos	261
8.5.1	Problemas	265
8.6	Métodos de diferenciação regressiva (BDF)	266
8.6.1	Problemas	272
8.7	Sistemas de EDOs	273
8.8	Estabilidade, convergência e rigidez	274

8.8.1	Estabilidade e convergência	274
8.8.2	Rigidez	277
8.9	Estudo de caso: processo oxidativo avançado	280
8.9.1	Problemas	288
8.10	Softwares	288
8.11	Referências	291
8.12	Códigos	293
8.12.1	Euler explícito	293
8.12.2	Runge-Kutta	296
8.12.3	Runge-Kutta semi-implícito	299
9	Diferenças finitas	303
9.1	Introdução	303
9.2	EDO-PCC	304
9.3	Etapas para solução por diferenças finitas	306
9.3.1	Geração de malha	306
9.3.2	Operadores diferença	308
9.3.3	Sistema de equações	313
9.3.4	Representar o sistema	317
9.3.5	Melhorias	318
9.3.6	Problemas	322
9.4	Diferenças finitas em EDPs	324
9.4.1	EDP elíptica	324
9.4.2	EDP parabólica	339
9.4.3	Estabilidade e convergência de método numérico para EDP	349
9.4.4	Problemas	354
9.5	Método das linhas – MOL	357
9.5.1	Exercícios	362
9.6	Softwares	363

9.7	Códigos	364
9.8	Referências	367
9.9	Respostas	368
10	Método dos resíduos ponderados	371
10.1	Introdução	371
10.2	EDO-PCC	373
10.3	Etapas para solução por método dos resíduos ponderados . .	376
10.3.1	Adotar uma forma funcional	377
10.3.2	Definir o resíduo	377
10.3.3	Tratar o resíduo	378
10.3.4	Representar a solução	384
10.3.5	Problemas	386
10.3.6	Aproximação de ordem superior	387
10.3.7	Problemas	396
10.4	Método da colocação ortogonal	397
10.4.1	Implementação	400
10.4.2	Estudo de caso	405
10.5	EDPs e colocação ortogonal	408
10.6	Problemas	412
10.7	Referências	413
10.8	Respostas	414
11	Análises qualitativas de EDO	417
11.1	Introdução	417
11.2	Equação diferencial ordinária de primeira ordem	418
11.2.1	Concavidade e monotonicidade	419
11.2.2	Isóclinas	424
11.2.3	Campos de direções e de vetores	426
11.2.4	Aplicações	427
11.2.5	Problemas	433

11.3 Sistema de EDOs de primeira ordem	433
11.3.1 Motivação	433
11.3.2 Definições	439
11.3.3 Gerando uma biblioteca com exemplos	441
11.3.4 Problemas	462
11.4 Sistemas não lineares	464
11.4.1 Estudo de caso: pêndulo simples	469
11.4.2 Sistemas biológicos	479
11.4.3 Problemas	480
11.5 Considerações finais sobre o tema	483
11.5.1 Estudo de caso: reator CSTR com troca térmica . . .	484
11.6 Referências	492
12 Equações diferenciais estocásticas	495
12.1 Introdução	495
12.2 Motivação	496
12.3 Processos estocásticos	499
12.3.1 Processos em tempo discreto	501
12.3.2 Processos em tempo contínuo	502
12.4 Análise por trajetórias amostrais	503
12.5 Integração de EDE	504
12.6 Gerando trajetórias	508
12.7 Estudo de caso	510
12.8 Algumas equações diferenciais estocásticas	514
12.9 Softwares	515
12.10 Problemas	516
12.11 Referências	517
A Programação	519
A.1 Introdução	519
A.2 Começando	520

A.3	Elementos de programação	521
A.3.1	Variáveis	523
A.3.2	Operadores e operações lógicas	524
A.3.3	Estruturas	525
A.4	Construção de um pseudocódigo	527
A.5	Problemas	529
A.6	Referências	530
B	Espaço vetorial	531
B.1	Introdução	531
B.2	Espaços vetoriais	532
B.3	Espaço das funções contínuas	535
B.4	Problema de Sturm-Liouville (PSL)	539
B.4.1	Identidade de Lagrange	541
B.4.2	Todos os autovalores do PSL são reais	543
B.4.3	Os autovetores são uma família de funções ortogonais	544
B.4.4	Os autovalores do PSL são simples	545
B.5	Sumário	545
B.6	Exercícios	546
B.7	Referências	547

Capítulo 1

Introdução

A Ciência Moderna procura representar fenômenos que ocorrem na Natureza por equações matemáticas. Um exemplo clássico são as leis de Newton para a Mecânica, em particular a segunda lei, que relaciona a força resultante aplicada a um corpo (\vec{F}_R) com a aceleração deste na mesma direção e sentido ($\vec{F}_R = m\vec{a}$). Algumas dessas equações estão na forma diferencial. Por exemplo, a própria segunda lei de Newton pode ser representada como a variação da quantidade de movimento do corpo $m\vec{v}$, passando assim a ser expressa por $\vec{F}_R = \frac{d(m\vec{v})}{dt}$. Outros exemplos de fenômenos que envolvem equações diferenciais estão presentes na biologia (crescimento populacional), na química (cinética de reações), na física (pêndulo simples) e na engenharia (circuitos elétricos).

Poderíamos perguntar: por que a forma diferencial? Porque a derivada exige que haja uma continuidade dos pontos vizinhos no espaço e no tempo. Portanto, se as derivadas existem no espaço e no tempo, o sistema varia de forma contínua.

Quando os fenômenos envolvem movimento, ocorrem taxas que também são representadas por equações diferenciais. Por exemplo, as conservações de massa, de quantidade de movimento e de energia possuem uma forma

diferencial e podem ser aplicadas a situações significativamente diferentes: processos químicos, análise ambiental, balanço populacional, dispersão de poluentes na água e no ar, linhas de fluxo em torno de carros de corrida, reatores, distribuição de velocidades e temperaturas em equipamentos e ambiente.

Existe uma forma generalizada de representar esses balanços, que é através de uma propriedade Φ genérica:

$$\underbrace{\frac{\partial \Phi}{\partial t}}_{\text{acúmulo}} + \underbrace{v_x \frac{\partial \Phi}{\partial x}}_{\text{advectivo}} = D \underbrace{\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}}_{\text{difusivo}} + \underbrace{R_\Phi}_{\text{fonte}} \quad (1.1)$$

O primeiro termo do lado esquerdo da igualdade representa a variação da propriedade com o tempo; trata-se, portanto, do termo de acúmulo ou transiente. O segundo termo do lado esquerdo é a contribuição advectiva, que rege a variação de uma propriedade devido à movimentação do fluido. O primeiro termo do lado direito da igualdade é o termo difusivo, responsável pelo transporte molecular e o segundo termo do lado direito é o termo fonte, que se refere ao consumo ou geração da propriedade Φ .

A equação matemática final do modelo depende da especificidade do fenômeno físico que se deseja representar/avaliar. Por exemplo, se o objetivo for avaliar a concentração C de uma espécie química com o tempo, sem considerar variações ao longo do espaço, a equação geral é reduzida aos termos de acúmulo e fonte:

$$\frac{dC}{dt} = R_C \quad (1.2)$$

O que acaba por gerar uma equação diferencial ordinária com problema de valor inicial (EDO-PVI).

Por outro lado, para se avaliar somente a difusão de calor por transporte molecular em uma barra metálica para um perfil inicial de temperatura

previamente estabelecido, a equação final fica:

$$D \frac{d^2 T}{dx^2} = R_q \quad (1.3)$$

que é uma equação diferencial ordinária de segunda ordem com problema de condição de contorno (EDO-PCC).

Também é possível obter as variações da temperatura ao longo do tempo do mesmo processo difusivo, gerando a equação:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + R_q \quad (1.4)$$

que é uma equação diferencial parcial (EDP), do tipo parabólica.

Como resultado dessa reflexão inicial é possível concluir que as equações diferenciais, em suas diversas formas, estão intensamente presentes em fenômenos na Natureza. Neste livro são avaliadas diversas técnicas de solução de equações diferenciais. No entanto, diferentemente de outras publicações do gênero, a ideia central deste livro é focar na solução sem se ater demasiadamente a demonstrações formais de existência e unicidade. É um livro de matemática aplicada com exemplos práticos. Esta é a ideia intuitiva que permeia todo o livro.

Para levar adiante essa estratégia, o livro está dividido em doze capítulos, distribuídos em duas partes. A primeira parte apresenta soluções analíticas para equações diferenciais ordinárias e parciais. Na segunda parte, são apresentadas algumas técnicas numéricas para solução de equações diferenciais ordinárias e parciais.

No presente Capítulo 1, está a Introdução, que resume o que está apresentado no livro. O Capítulo 2 coloca conceitos fundamentais que estão presentes em todo o livro, como o processo de progresso conceitual, para

gerar modelos matemáticos, e os erros que são inseridos ao longo desta construção.

No Capítulo 3 são discutidos os objetos de análise do livro, as equações diferenciais. Primeiro, são gerados os balanços generalizados de massa em coordenadas retangulares e, depois, em coordenadas cilíndricas.

As soluções analíticas de EDOs são tema dos Capítulos 4 e 5. O ponto de partida deste item são as EDOs de primeira ordem. Depois, são resolvidas as EDOs de ordem superior com coeficientes constantes. Em seguida, a não homogeneidade é considerada e, finalmente, no Capítulo 5 são resolvidas as EDOs com coeficientes variáveis.

O Capítulo 6 trata da solução analítica de equações diferenciais parciais por método de separação de variáveis. Primeiro, a técnica é aplicada para problema em coordenadas retangulares, para, depois, se ater à geometria cilíndrica, o que requer o conceito de ortogonalidade das funções de Bessel.

Outra técnica analítica para EDP é apresentada no Capítulo 7, a solução por similaridade ou por agrupamento de variáveis. Essa solução aparece para resolver condições de contorno no infinito.

Já no Capítulo 8 são introduzidos métodos numéricos para a solução de EDO com problema de valor inicial (PVI). A análise se inicia com o método de Euler, passando pelo método de Runge-Kutta, métodos de passos múltiplos e, por fim, pelo método BDF, o método da diferenciação regressiva.

O método das diferenças finitas é tratado no Capítulo 9. O método é aplicado à solução de EDO com problema de condições de contorno (PCC). Para isso, são colocados conceitos como convergência e estabilidade. Uma extensão natural do método levou a solução de equações diferenciais parciais pela mesma técnica, as diferenças finitas.

Outra forma de resolver equações diferenciais se dá por aproximações

funcionais, ou seja, adota-se um forma funcional, por exemplo, a função linear $y(x)=ax+b$, e os parâmetros a e b são determinados de forma a minimizar o erro associado a essa aproximação. Esta técnica é introduzida no Capítulo 10, junto com sua aplicação mais nobre, que é a abordagem por colocação ortogonal.

No Capítulo 11 está apresentada uma ideia diferente de todo o resto do livro, que é tirar informações sobre a solução sem efetivamente resolver a equação. São as técnicas qualitativas e geométricas de avaliar EDOs. O foco principal é em sistemas lineares, em que os pontos de sela, nós, centro e espiral são apresentados.

O livro é concluído com uma introdução à solução de equações diferenciais estocásticas. Para isso, no Capítulo 12, é aplicada a análise e solução de equações diferenciais utilizando as trajetórias amostrais em tempos discretos, como acontece no movimento browniano do pólen na superfície da água.

Espero que vocês gostem do livro! Todos os tópicos já foram apresentados em outras publicações, inclusive clássicos. No entanto, diferentemente do que ocorre com aquelas produções, este livro se estrutura a partir da compilação de informações, reflexões e estratégias vividas ao longo da nossa carreira como professor. Por isso, o processo resultou em uma visão pessoal para o tópico. Iniciado no passado com a bibliografia, provavelmente composta pelos livros usados ao longo de nossa formação. Passando ao presente, que é própria a elaboração do livro, mas também o futuro, quando inserimos tópicos que fazem parte da nossa pesquisa ou do que achamos que será o futuro. Boa viagem!

Capítulo 2

Modelagem e simulação

Ao final deste capítulo você estará apto a:

- compreender a sistemática da geração de um modelo matemático;
- reconhecer os erros inseridos nesse processo;
- aplicar procedimentos que sejam capazes de remediar esses erros.

2.1 Modelagem e simulação

As equações diferenciais resolvidas neste livro são resultado de um processo voltado para a geração de modelo, que neste caso é um modelo matemático. Aris [2] define o conceito de modelo matemático como:

Def.: Modelo matemático é o conjunto consistente e completo de equações matemáticas que se espera corresponder à outra entidade (protótipo).

O processo de construção de um modelo segue uma sequência de etapas que é a mesma usada na construção de uma teoria científica. Esta lógica está sintetizada na Figura 2.1.

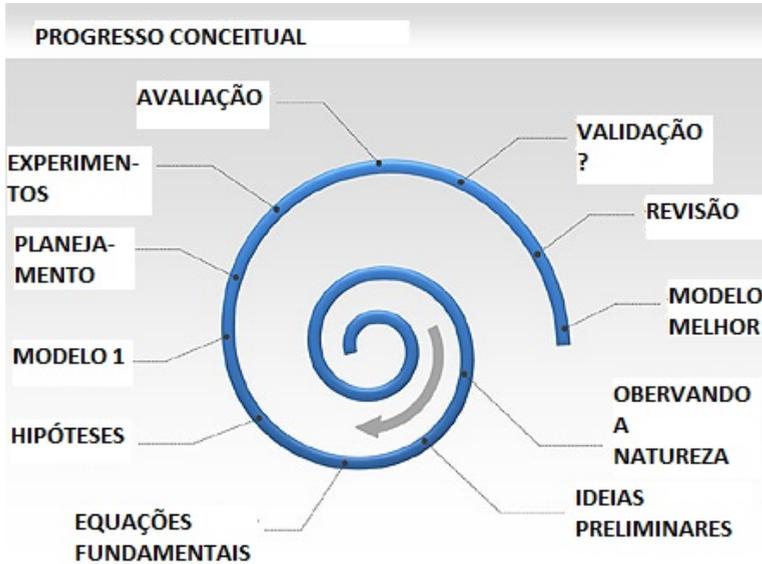


Figura 2.1 Progresso conceitual.

Primeiro deve-se observar a Natureza, como esta se comporta e como são as relações de causa e efeito. Por exemplo, a maçã que cai da árvore segue um padrão? Na movimentação de fluidos o fluxo pode ser laminar ou turbulento.

A partir dessas informações, é possível gerar um conjunto de hipóteses. Isso posto, é chegada a hora de fazer uso das equações fundamentais, os balanços de propriedades, as equações constitutivas, as equações de estado etc. Por exemplo, após observar sucessivos eventos, é possível observar que a maçã cai sempre com a mesma aceleração. Essa constatação, associada a métodos tradicionais de tratamento de propriedades, gera uma equação matemática simples para descrever a forma de ação da força peso:

$$\vec{P} = m\vec{g} \quad (2.1)$$

Até este ponto é o que chamamos de modelagem, ou seja, o processo de construção de um modelo, que gera uma equação ou conjunto de equações matemáticas que devem ser resolvidas! Para ir adiante é necessário fazer uso da matemática fundamental. Para tanto, utilizamos soluções de equações algébricas ou de sistemas de equações diferenciais, que são aplicadas a todos os ramos da ciência. É o que chamamos de simulação. A partir daí, estamos aptos a gerar gráficos, variar parâmetros para ver como se comporta o modelo e encontrar máximos ou mínimos, analisar resultados. Missão cumprida? Ainda não! É necessário continuar caminhando ao longo do progresso conceitual.

Surge, então a grande pergunta: o modelo é bom? Diz a metodologia científica tradicional que o modelo deve explicar um conjunto de dados experimentais. Aqui a teoria científica se separa do processo de construção de um modelo para a engenharia. Os cientistas começam a elaborar experimentos para verificar se o modelo consegue explicá-los. É uma procura frenética por situações que tragam dificuldades para o modelo. Só após uma sequência exaustiva de testes é que se pode considerar que a teoria científica foi aceita.

A etapa do planejamento para a obtenção de um modelo em Ciências Naturais procura, primeiro, identificar quais parâmetros são mais significativos; ou seja, aqueles que geram mudanças perceptíveis nas respostas. Após isso, faz-se um planejamento de experimentos, em que se variam determinados dados, em certas quantidades e em faixas definidas. São técnicas que acabam por gerar resultados mais confiáveis.

Um exemplo interessante de se fazer isso é por meio de um planejamento fatorial de experimentos. São considerados dois níveis para cada

variável, um alto e um baixo, por exemplo, temperaturas de 40 e 50 °C. Então são feitas todas as associações possíveis de níveis de todas as variáveis, temperatura, pressão, concentração etc. Agora um plano aleatório deve ser elaborado; ou seja, não se deve seguir uma sequência, e sim um conjunto aleatório de experimentos. Desse planejamento são obtidos resultados com significado estatístico [1]. O que isso quer dizer? Que você vai realizar um número menor de experimentos, mas estes atendem a condições previamente estabelecidas pela estatística e, por isso, são considerados formalmente confiáveis. Portanto, longos conjuntos de dados, por exemplo, variar temperatura de 10 em 10 °C, pode ser extenso e não resultar em um conjunto experimental consistente.

Agora temos dois conjuntos de dados: os experimentais, que são os pontos, e as simulações, que são as linhas – ver Figura 2.2. Uma comparação visual simples pode ser feita. Poucas vezes é possível concluir algo com muita certeza a partir desta comparação qualitativa. De uma forma geral, não é possível concluir sem dúvida que o modelo representa bem os dados experimentais. Uma saída elegante para resolver a questão é recorrer à estatística de novo. Os testes de aderência ¹ são bastante úteis nesta etapa.

Após terem sido cumpridas todas essas etapas, já é possível responder à pergunta principal: o modelo representa os dados experimentais? O modelo foi validado? Se a resposta for sim, ótimo, missão cumprida! Se a resposta for não, dá-se início ao longo processo de encontrar erros ou falhas. De uma forma geral, quem elaborou o modelo tem bastante orgulho dele, confia cegamente e pode até dizer que os dados experimentais estão incorretos. Um passo mais sensato é retornar às soluções matemáticas e reavaliar se o método matemático usado foi adequado ou se não há nenhum erro grosseiro. Finalmente, as hipóteses adotadas são revistas. Se foi adotada uma hipó-

¹Os testes de aderência consistem em testar a adequabilidade de um modelo matemático a um conjunto de dados, por exemplo, teste χ^2 .

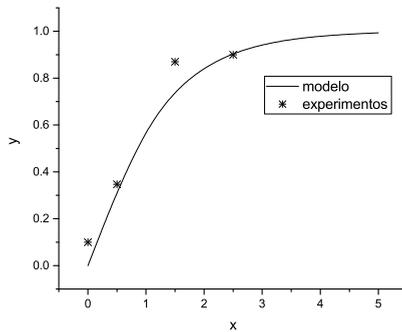


Figura 2.2 Comparando modelo e dados experimentais.

tese inadequada, nenhum método matemático será eficiente, por mais que a ferramenta seja elaborada. Por exemplo, o fluxo observado é turbulento e não laminar. Daí, reavaliemos as hipóteses, retornamos às equações fundamentais e geramos um modelo melhorado. Tempo perdido? Claro que não! Passamos a entender melhor o fenômeno que está sendo estudado. Por isso o fluxograma é chamado de progresso conceitual [2]. Em vista disso uma representação é feita por uma figura em espiral, não um organograma linear, porque caminhou-se na direção da compreensão do fenômeno de interesse.

Diversos outros aspectos poderiam ser adicionados ao conteúdo que acabamos de discutir. Vou acrescentar dois deles. A revisão de ideias e o desenvolvimento do modelo não caminham necessariamente na direção da maior complexidade ou no aumento do número de parâmetros. O modelo deve representar os dados experimentais e explicar comportamentos que se desejem dele. Deve fazer previsões adequadamente, indicar máximos, mínimos, ou singularidades. Mas não apresenta necessariamente maior complexidade. O princípio de Ocam indica que: o modelo deve ser o mais simples possível! Mas, é claro, e como disse antes, este deve explicar os dados experimentais e o comportamento que está sendo estudado.

A modelagem e simulação envolve uma teoria muito maior que a apresentada aqui. Por exemplo, o conceito de paradigma, discutido amplamente por Thomas Kuhn [3]. Outro exemplo é a própria teoria do conhecimento que engloba a origem (epistemologia), a essência e as espécies de conhecimento, além do critério da verdade.

2.2 Erros

Ao percorrer o progresso conceitual podem ocorrer três tipos de erros. São estes:

- inerente;
- de truncamento;
- de arredondamento.

O erro inerente é inserido nas primeiras etapas da geração do modelo. As primeiras hipóteses adotadas podem não ser as mais adequadas. Por exemplo, foi considerado que o gás segue a lei dos gases ideais, mas este desvia desse comportamento. Também são os erros inseridos pelas equações fundamentais, que também adotam simplificações. Mais ainda, erros oriundos da medição de parâmetros, das condições de contorno ou das condições iniciais. Em um estudo cinético, as constantes cinéticas carregam imprecisões. As concentrações iniciais de reagente também podem ter incertezas.

São três os procedimentos usuais para reduzir, minimizar ou até erradicar o erro inerente.

Remédios para o erro inerente:

- reavaliar hipóteses;

- considerar mais termos das equações fundamentais;
- obter parâmetros mais precisos.

O erro de truncamento está associado com o truncamento da série de Taylor. Portanto, está relacionado com o método numérico. Ao longo deste livro, o ponto de partida para diversos métodos numéricos é a série de Taylor, dada por:

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)\frac{f'(x_0)}{1!} + (x-x_0)^2\frac{f''(x_0)}{2!} + (x-x_0)^3\frac{f'''(x_0)}{3!} + \dots \quad (2.2)$$

A série de Taylor é composta por infinitos termos e exige que a função $f(x)$ seja infinitamente derivável. Em um cálculo real, o que se faz é TRUNCAR a série em algum ponto, por exemplo:

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)\frac{f'(x_0)}{1!} \quad (2.3)$$

Assim, ao se isolar a derivada, obtém-se uma aproximação para esta, do tipo:

$$f'(x_0) = \frac{f(x) - f(x_0)}{(x-x_0)} \quad (2.4)$$

Essa equação é uma fórmula diferença, que pode ser usada em diferenças finitas ou para gerar a fórmula de Euler explícita. Contudo, o truncamento gera um erro local, que pode ser calculado pela forma de Lagrange:

$$R_{n+1} = (x-x_0)^{(n+1)}\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} \quad (2.5)$$

sendo R_{n+1} o erro de truncamento associado ao método numérico para a expansão de Taylor até a derivada $n+1$ da Equação 2.2. ξ é um valor entre x e x_0 , $\xi \in [x, x_0]$.

A redução do erro de truncamento pode ocorrer a partir da aplicação dos seguintes procedimentos:

remédios para o erro de truncamento:

- reduzir o tamanho de passo: $h=(x-x_0)$;
- aumentar o número de termos da série.

O erro de arredondamento é a soma de incertezas relacionadas com a forma que o computador, ou a máquina de cálculo, representa os números. Todos já ouvimos de falar de bits. É mais fácil para o computador ver um apagado ou aceso, ou seja, 0 ou 1. Os números que vamos manipular em nossos cálculos são representados por sequências de zeros ou uns e isso insere erro, porque um número na base decimal tem de ser transformado em um número na base binária. O problema é que, após muitas interações numéricas, esses erros podem prevalecer e acabar por levar a uma divergência do processo numérico. Os primeiros computadores usavam um número menor de bits para representar os números, e isso era mais perceptível [4]. A grande capacidade computacional de hoje permite a utilização de mais bits; são os reais com dupla precisão, que tornam a ocorrência desse erro muito menos provável.

remédio para o erro de arredondamento:

- utilizar tipos com precisão dupla nos cálculos.

Toda esta discussão sugere que a manipulação de modelos seja impossível. Mas não é! O que se faz, na prática, é tomar a frente dos processos

iterativos impondo um erro prático. Escolhemos uma tolerância (tol) e desenvolvemos o processo iterativo até que a diferença entre iterações seja menor que esse valor. Por exemplo, para processos que se desenvolvem a partir de etapas sucessivas, deve-se comparar a interação x_i com a posterior x_{i+1} . O erro absoluto é definido como

$$erro_{absoluto} = |x_{i+1} - x_i| \quad (2.6)$$

Para números com menores ordens de grandeza, como 10^{-3} , 10^{-4} , é mais interessante utilizar erro relativo:

$$erro_{relativo} = \left| \frac{(x_{i+1} - x_i)}{x_{i+1}} \right| \quad (2.7)$$

Basta agora realizar seus cálculos até que o processo alcance determinada tolerância, provavelmente valores diferentes para cada um dos erros:

$$|x_{i+1} - x_i| \leq tol_1 \quad e \quad \left| \frac{(x_{i+1} - x_i)}{x_{i+1}} \right| \leq tol_2 \quad (2.8)$$

A escolha da tolerância deve levar em conta a precisão do resultado e o tempo computacional necessário para alcançá-lo. Ao escolher um valor preciso, por exemplo, tolerância igual a 10^{-8} , o computador deverá executar um número maior de iterações. Portanto, essa escolha é um cobertor curto: ao cobrir os pés, o dorso fica de fora e, ao cobrir o dorso, os pés ficam de fora. São situações conflitantes em que se deve fazer uma escolha, havendo ganho por um lado, mas perda por outro. A maior precisão vem acompanhada de maior tempo computacional.

exemplo: uma estimativa para e^{10} é o valor de 22000. Quais são os erros relativo e absoluto desta estimação?

solução: erro absoluto = $|e^{10} - 22000| = 26$

$$\text{erro relativo} = \left| \frac{e^{10} - 22000}{e^{10}} \right| = 0,001042 \rightarrow 0,104\%$$

Observe que um erro absoluto igual a 26 poderia induzir que é um erro elevado. Contudo, o erro relativo igual a 0,104% indica que é uma estimativa aceitável.

exemplo: o processo de encontrar uma raiz de uma equação não linear por iterações sucessivas, ou iteração linear, é um exemplo de processo iterativo. Calculemos o valor x , que é igual a sua exponencial negativa, ou seja, $x = e^{-x}$. Esta é uma equação transcendental, porque apresenta como solução numérica um valor numérico irracional. Quais são os erros relativo e absoluto dessa estimação?

solução: a equação sugere um caminho $x_{i+1} = e^{-x_i}$, ou seja, faz-se uma estimativa inicial x_0 , calcula-se x_1 a partir da equação e, se a diferença for menor que uma tolerância, considera-se que o valor estimado foi encontrado.

Um pseudocódigo para essa sequência é:

1. Entrar com a estimativa inicial x_1 e tolerância tol
2. Iniciar loop com $i=1$; $x_2 = e^{-x_1}$
3. Fazer até que o módulo de $(x_{i+1} - x_i) < tol$
 - (a) Calcular $x_{i+1} = e^{-x_i}$
 - (b) Calcular $|x_{i+1} - x_i|$
 - (c) Calcular $\left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right|$
 - (d) Atualizar $i = i+1$
4. Fim do loop
5. Fazer raiz= x_{i+1}

O pseudocódigo é a sequência lógica para resolver o problema, que pode ser transformado em qualquer código, Matlab, C, Fortran ou Python. Um código em Fortran90 está no Apêndice A. Os resultados estão na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 Erros para $x = e^{-x}$

est. inicial	iterações	raiz estimada	erro absoluto	relativo
1,0	22	0,56715	0,55954E-05	0,98659E-05
0,5	19	0,56714	0,39604E-05	0,69830E-05
0,1	22	0,56715	0,55954E-05	0,98659E-05
0,01	23	0,56714	0,38553E-05	0,67977E-05

2.3 Acurácia e precisão

Acurácia e precisão são conceitos frequentes em soluções de EDOs. Vamos seguir aqui as definições dadas por Higham ([5]).

A **acurácia** está relacionada com o erro absoluto ou o erro relativo.

A **precisão** é a acurácia com que se realizam as operações aritméticas básicas $+$, $-$, \times e \div .

2.4 Softwares

Existem muitas ferramentas computacionais disponíveis para cálculos numéricos, alguns softwares proprietários e outros *opensource*. Os proprietários são bastante amigáveis, com diversos exemplos e um *help* completo,

mas há um custo monetário. Os softwares abertos são gratuitos, mas não são tão amigáveis. Contudo, seguem a lógica de software aberto pela qual se dá uma intensa troca de informações em grupos de discussão. Essa interação acaba por reduzir o grau de complexidade de tais ferramentas.

As linguagens matemáticas são as ferramentas mais adequadas para cálculos intensos, ou seja, para processamentos que duram semanas em máquinas mais potentes. Podemos citar o Fortran, nas versões mais modernas Fortran95, 2003 e 2007; o C, C++ e C#; o Python é uma opção bastante interessante.

É possível obter diversas soluções já prontas na internet. Um repositório extenso, composto por diversos programas em diversas linguagens, é o netlib, que pode ser acessado no endereço:

<http://www.netlib.org/>

Bibliotecas tradicionais, como a IMSL, NAG ou a Numerical Recipes, fazem parte de algumas linguagens ou podem ser acessadas diretamente, por meio dos seguintes endereços:

- [http://www.roguewave.com/products-services/imsl-numerical-libraries;](http://www.roguewave.com/products-services/imsl-numerical-libraries/)
- <https://www.nag.co.uk/content/nag-library;>
- [http://numerical.recipes/.](http://numerical.recipes/)

2.5 Problemas

1. Defina os três erros que são inseridos ao longo do progresso conceitual e em que etapas são inseridos.

2. Avaliar o erro absoluto e relativo da aproximação de números irracionais por frações:

(a) $x = \pi$ e $y=22/7$

R. $e_{absoluto}=0,0012645$ $e_{relativo}=0,0004025$

(b) $x = \pi$ e $y=355/113$

R. $e_{absoluto}=0,0000003$ $e_{relativo} = 8,491 \cdot 10^{-8}$

(c) $\sqrt{2}$ e $y=99/70$

R. $e_{absoluto}=0,0000722$ $e_{relativo}=0,000051$

(d) $\sqrt{2}$ e $y=17/12$

R. $e_{absoluto}=0,0024531$ $e_{relativo}=0,0017346$

(e) $x=e^2$ e $y = (1 + 1/n)^n$, para $n=1,2,3\dots$

Tabela 2.2 Erros para a série do número de Euler = 2,718282

número de termos	valor de e	erro absoluto	erro relativo
1	2,000000	0,7182817	0,2642411
10	2,593743	0,1245387	4,5815215E-02
50	2,691586	2,6696205E-02	9,8209856E-03
100	2,704811	1,3470411E-02	4,9554873E-03
500	2,715534	2,7480125E-03	1,0109374E-03
1000	2,717051	1,2309551E-03	4,5284309E-04

²Número de Euler ou neperiano

3. Elabore um programa em linguagem de sua preferência para verificar o erro de arredondamento, fazendo a soma 10.000 vezes de 0,0001, por exemplo.

2.6 Referências

- [1] M. Schwaab; J. C. Pinto. *Análise de dados experimentais II. Planejamento de experimentos*. E-Papers, 2011.
- [2] R. Aris. *Mathematical modelling techniques*. Ed. revisada. Dover, 1994.
- [3] T.S. Kuhn. *A estrutura das revoluções científicas*. 5. ed. Perspectiva, 1970.
- [4] P. A. Stark. *Introdução dos métodos numéricos*. InterCiência, 1979.
- [5] N. J. Higham. *Accuracy and stability of numerical algorithms*. 2. ed. SIAM, 2002.

A ciência moderna procura representar fenômenos que ocorrem na natureza (como o crescimento populacional, cinética de reações e pêndulo simples) por equações matemáticas, especificamente por meio de equações diferenciais.

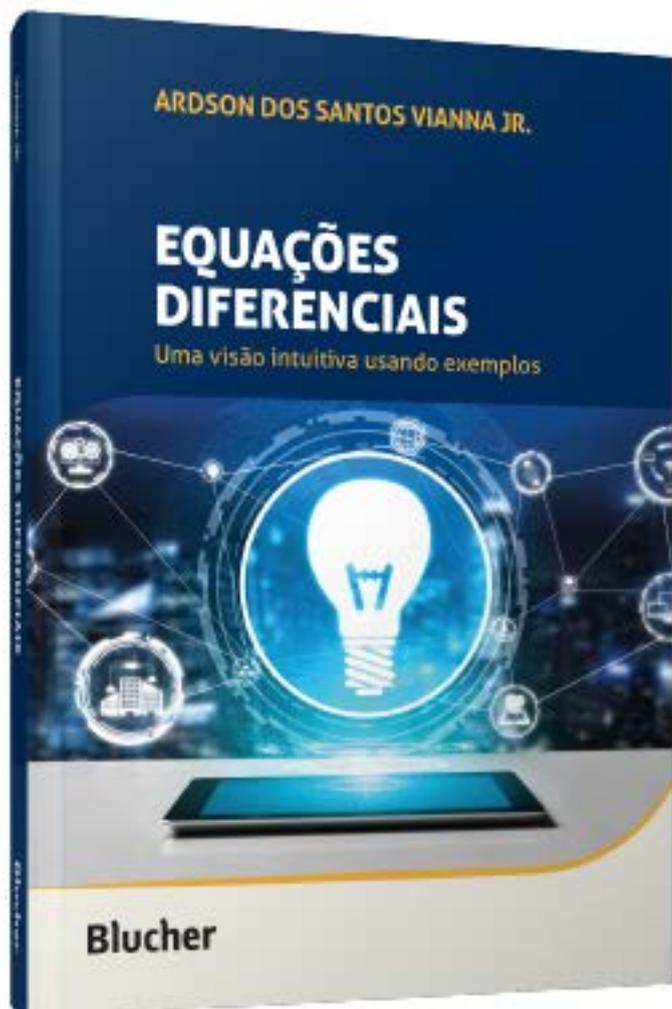
Este livro de matemática aplicada se propõe a solucionar equações diferenciais com exemplos práticos. Procura-se compreender diversas ferramentas matemáticas através da intuição, sem se ater demasiadamente a demonstrações formais de existência e unicidade.

Dividido em duas partes, a primeira apresentando soluções analíticas para equações diferenciais ordinárias e parciais, e a segunda, algumas técnicas numéricas para solução de equações diferenciais ordinárias e parciais, este livro é destinado a alunos e profissionais das áreas de ciências aplicadas, como engenharia, química tecnológica, física aplicada, ciências ambientais e biológicas.



www.blucher.com.br

Blucher



Clique aqui e:

VEJA NA LOJA

Equações Diferenciais

Uma visão intuitiva usando exemplos

Ardson dos Santos Vianna Jr.

ISBN: 9786555062816

Páginas: 562

Formato: 17 x 24 cm

Ano de Publicação: 2021

Peso: 0.839 kg
