Métodos Matemáticos Aplicados à Engenharia Química I

Éliton Fontana

Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal do Paraná - UFPR

Organização da Disciplina

Parte I - Equações Diferenciais de 1^a ordem (4 aulas):
05/03 - 26/03
Parte II - Equações Diferenciais de 2^a ordem e Transformada de Laplace (4 aulas):
09/04 - 30/04
Parte III - Séries de Potência e Separação de Variáveis (4 aulas):
14/05 - 04/06

Introdução às Equações Diferenciais

Equação Algébrica: relação de igualdade entre duas funções. Exemplo:

$$x^2 + x + 1 = 0 \qquad\qquad x^2 + y^2 = 2$$

Solução: **valores** que satisfazem a igualdade.

Equação Diferencial: relação de igualdade contendo a derivade de uma ou mais funções. Exemplo:

$$\frac{dy}{dx} + 3y = x^2 \qquad\qquad \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

Solução: **funções** que satisfazem a igualdade.

Introdução às Equações Diferenciais

Equações diferenciais possuem pelo menos duas variáveis:
- **variável dependente:** aquilo que está se avaliando (desconhecida)
- **variável independente:** em relação ao quê se avalia (conhecido)

Exemplo:

$$\frac{dy}{dt} + y = 0$$

$y \rightarrow$ variável dependente
$t \rightarrow$ variável independente
Solução: $y(t)$

Introdução às Equações Diferenciais

Exemplo 2:

$$\frac{dy}{dt} + \frac{dx}{dt} = 0$$

$y, x \rightarrow$ variáveis dependentes
$t \rightarrow$ variável independente
Solução: $y(t)$, $x(t)$

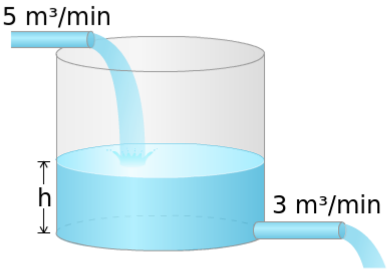
Exemplo 3:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

$T \rightarrow$ variável dependente
$x, y \rightarrow$ variáveis independentes
Solução: $T(x, y)$

Equações Diferenciais (ED)

ED's surgem naturalmente na **modelagem** de sistemas físicos.
Exemplo: Variação no volume de um tanque ao longo do tempo:



$$\text{Variação no volume} = \frac{dV}{dt}$$

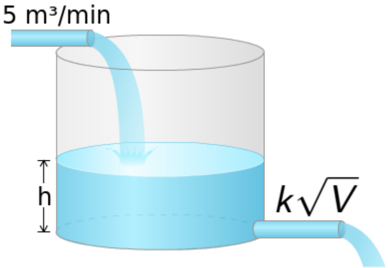
Balanço de massa:

$$\frac{dV}{dt} = 5\frac{m^3}{min} - 3\frac{m^3}{min}$$

$$\frac{dV}{dt} = 2\frac{m^3}{min}$$

$$V(t) = V_0 + 2t$$

Exemplo 2: Saída proporcional à raíz do volume:



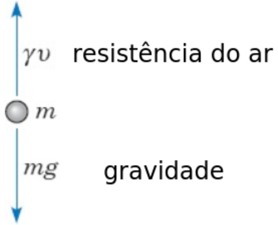
Variação no volume $= \dfrac{dV}{dt}$

Balanço de massa:

$$\frac{dV}{dt} = 5 - k\sqrt{V}$$

$$V(t) = ??$$

Exemplo 3: Objeto em queda.



Forças = gravidade - resistência do ar:

$$m\frac{dv}{dt} = mg - \gamma v$$

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{\gamma}{m}v$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2} = g - \frac{\gamma}{m}v$$

Balanço de forças:

$$\sum F = ma = m\frac{dv}{dt}$$

Exemplo 4: Modelo de Hodgkin-Huxley
Modelo de disparo neuronal, obtido tratando cada componente da célula como um elemento elétrico.

$$I = C_m \frac{\mathrm{d}V_m}{\mathrm{d}t} + \bar{g}_{\mathrm{K}} n^4 (V_m - V_K) + \bar{g}_{\mathrm{Na}} m^3 h (V_m - V_{Na}) + \bar{g}_l (V_m - V_l)$$

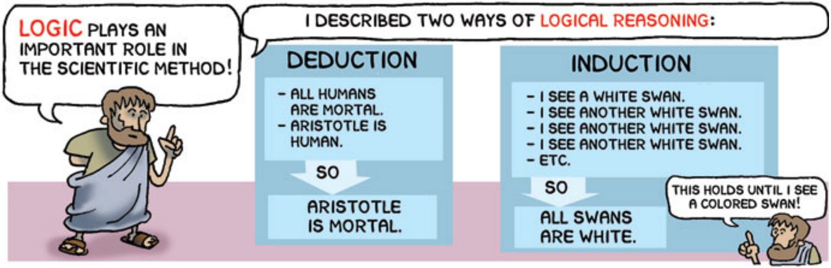
$$\frac{dn}{dt} = \alpha_n(V_m)(1-n) - \beta_n(V_m)n$$

$$\frac{dm}{dt} = \alpha_m(V_m)(1-m) - \beta_m(V_m)m$$

$$\frac{dh}{dt} = \alpha_h(V_m)(1-h) - \beta_h(V_m)h$$

Modelos Matemáticos

Definição: Descrição de um *sistema físico* utilizando *linguagem matemática*.
- Inicialmente baseados em lógica **dedutiva** (Descartes) ou **indutiva** (Bacon).



Modelos Matemáticos

Método científico moderno: duas questões levantadas por Popper:
1) Problema da indução: É válido utilizar observações singulares para propor enunciados universais?
2) Problema da demarcação: "... estabelecer um critério que nos habilite a distinguir entre as ciências empíricas (ciências naturais e sociais), de uma parte, (...) dos sistemas metafísicos (conhecimentos lógicos e matemáticos), de outra".

Modelos Matemáticos

Método Hipotético-Dedutivo:

1. Observação do problema;
2. Formulação de hipóteses *falseáveis* para explicar as observações;
3. Construção de uma teoria com base nas hipóteses e observações;
4. Dedução de predições a partir das hipóteses postuladas;
5. Busca de evidências que mostrem que as predições estão erradas;
6. Se necessário, reformulação das hipóteses.

Modelos Matemáticos

Modelos Determinísticos e Estocásticos:
1) *Determinístico:* Resultado do modelo é completamente determinado pelos parâmetros e condições iniciais aplicados;

2) *Estocástico:* Algum nível de aleatoriedade está presente no modelo, de modo que condições idênticas podem levar a resultados diferentes.

Modelos Matemáticos

Determinístico

1. Descritos por equações diferenciais e algébricas;
2. Pressupõem relação causa/efeito conhecida;
3. Limitados pelo conhecimento destas relações;
4. Limitados pela *precisão* com que os parâmetros são conhecidos.

Estocástico

1. Assumem que algum parâmetro desconhecido foi gerado por mecanismos aleatórios;
2. O resultado é expresso em termos de *probabilidades*;
3. Distribuições obtidas a partir da análise de uma *população*.

Classificação das ED's

1) Tipo de Equação Diferencial

- Equação diferencial ordinária (EDO): somente uma variável independente. Exemplo:

$$\frac{dy}{dt} + y^2 = t \qquad \frac{d^2y}{dt^2} + \frac{dy}{dt} = 2$$

- Equação diferencial parcial (EDP): mais de uma variável independente. Exemplo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \qquad \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

Classificação das ED's

2) Ordem da Equação Diferencial

Equivale à ordem da derivada de maior ordem presente.

Exemplo:

$$\frac{d^2y}{dt^2} + 3y = t \qquad \rightarrow \qquad 2^a \text{ ordem}$$

$$\frac{dy}{dt} + 3y^2 = t \qquad \rightarrow \qquad 1^a \text{ ordem}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \qquad \rightarrow \qquad 2^a \text{ ordem}$$

Classificação das ED's

3) Linearidade

Quando a variável **dependente e suas derivadas** só aparecem em termos lineares, a ED é dita linear, caso contrário é não-linear.

Exemplos de termos não-lineares:

- Expoente diferente de 1. Ex: $\dfrac{dy}{dt} + y^2 = 1$
- Multiplicação de termos. Ex: $y\dfrac{dy}{dt} + y = 1$
- Operadores não-lineares: Ex: $\dfrac{dy}{dt} + y = \sin(y)$

Classificação das ED's

3) Linearidade
A linearidade da ED não está relacionada com a variável independente. Exemplos de equações lineares:

$$\frac{dy}{dt} + yt = 1 \qquad \frac{dy}{dt} + 3y = e^t \qquad t\frac{d^2y}{dt^2} + yt^2 = \sin(t)$$

De forma geral, uma EDO de ordem n linear pode ser escrita como:

$$a_n(t)\frac{d^ny}{dt^n} + a_{n-1}(t)\frac{d^{n-1}y}{dt^{n-1}} + \ldots + a_1(t)\frac{dy}{dt} + a_0(t)y = f(t)$$

Classificação das ED's (Lineares)

Para as EDO's lineares, outras duas classificações são úteis:
3.1) Homogeneidade: Uma EDO linear é dita **homogênea** se o termo que não multiplica a variável dependente ou suas derivades é nulo ($f(t) = 0$ na forma geral). Caso não for, a EDO é dita **não-homogênea**
3.2) Coeficientes constantes: Uma EDO linear possui **coeficientes constantes** se todos os termos $a_n(t), a_{n-1}(t), \ldots$ forem constantes. Caso contrário, a EDO possuo **coeficientes variáveis**.

Classificação das ED's

Ex) Classifique as seguintes ED's de acordo com os critérios vistos anteriormente (tipo, ordem e linearidade):

1) $\dfrac{dy}{dt} + \sin(t)y = \sqrt{y}$

2) $\dfrac{d^2y}{dt^2} + 3y = 0$

3) $\dfrac{dx}{dy} + y^2x = 4$

4) $\sin(2\pi t)\dfrac{dy}{dt} + e^t(y + 3t) = 0$