

# JEEPEMA

Jornal eletrônico de Ensino e Pesquisa de matemática

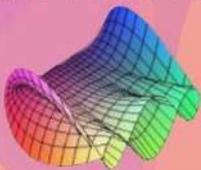
## Cálculo

Diferencial

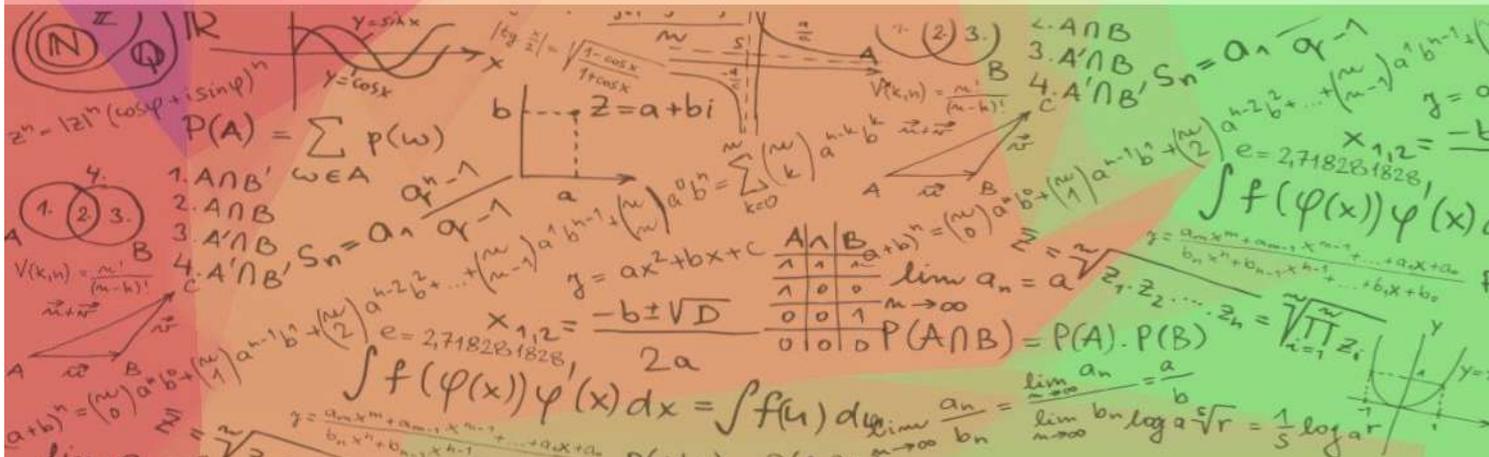
Integral

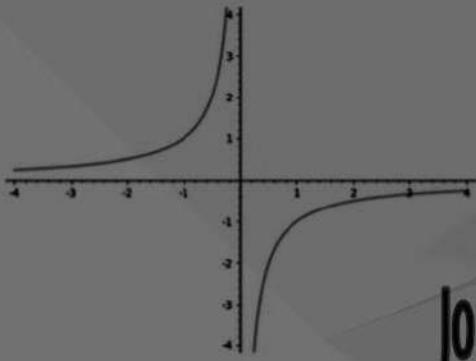


Exercícios • Apostilas • Resoluções • Vídeos Aulas •



um kit de sobrevivência!





# JEEPEMA

Jornal eletrônico de Ensino e Pesquisa de matemática

## Cálculo

Diferencial

Integral:



Exercícios • Apostilas • Resoluções • Vídeos Aulas •



um kit de sobrevivência!

Aline E. de Medeiros	- editora assistente
Laerte Bemm	- editor assistente (DMA - UEM)
Doherty Andrade	- editor assistente
Rodrigo Martins	- editor chefe (DMA - UEM)
Rafaela Mayumi da S. Fuzioka	- identidade visual
Isadora Honório Guimarães	- identidade visual

---

Jornal Eletrônico de Ensino de Matemática - JEEPEMA  
Universidade Estadual de Maringá, Maringá-PR - Brasil  
ISSN: 2594-6323  
DOI: 10.4025/jeepeema

Vol. 2 N° 1 / 125 páginas - Julho/2018

Palavras-chave: Métodos Numéricos, Cálculo Fracionário, Números Primos, Números de Mersenne, Drug-Delivery, Equação Diferencial Parcial e Dispersão de Poluentes .

---



# Índice

## Volume 2 - N°1

1

Aplicação de Métodos Numéricos no Estudo da Decomposição de Matéria Orgânica Antropogênica em um Rio: Gabrielle Maioli e Suzete Maria Silva Afonso (DMA - IGCE - UNESP).

2

Elementos do Cálculo Fracionário: Sandra Maria Tieppo e Sandro Marcos Guzzo (UNIOSTE).

3

Números Primos e Números de Mersenne: Doherty Andrade (FEITEP).

4

Modelagem Matemática de Dissolução Controlada de Compromidos: Ricardo V. P. Rezende (DEC - UEM) .

5

Simulação Numérica da Dispersão de  $\text{CO}_2$  na atmosfera de uma Chaminé Industrial: Regiani Ap. de Almeida (DEQ - UEM).



## Aplicação de métodos numéricos no estudo da decomposição de matéria orgânica antropogênica em um rio

Gabrielle Maioli e Suzete Maria Silva Afonso

**RESUMO:** Neste artigo exploraremos os métodos numéricos de passo único, denominados métodos de Euler e Runge - Kutta, e os métodos de passos múltiplos, denominados métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton, para encontrar soluções aproximadas de problemas de valor inicial para equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Aplicaremos os métodos numéricos abordados para estudar a decomposição de matéria orgânica antropogênica em um rio, cujo processo pode ser modelado por uma equação diferencial ordinária.

**Palavras-chave:** Métodos numéricos. Problema de valor inicial. EDO's.

### Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Métodos numéricos de um passo</b>	<b>3</b>
2.1	Polinômio de Taylor e a reta tangente . . . . .	4
2.2	Método de Euler . . . . .	6
2.3	Erros e arredondamento . . . . .	12
2.3.1	Erro de truncamento global - $E_n$ . . . . .	13
2.3.2	Erro de truncamento local - $e_n$ . . . . .	13
2.3.3	Erro de arredondamento - $A_n$ . . . . .	13
2.3.4	Valor absoluto do erro total . . . . .	13
2.4	Método de Euler melhorado . . . . .	16
2.5	Método de Runge-Kutta . . . . .	20
2.5.1	Runge-Kutta de primeiro grau . . . . .	20
2.5.2	Runge-Kutta de segundo grau . . . . .	21
2.5.3	Runge-Kutta de terceiro grau . . . . .	22
2.5.4	Runge-Kutta de quarto grau . . . . .	24
2.6	Analisando os métodos . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Métodos de passos múltiplos</b>	<b>28</b>
3.1	Métodos de Adams . . . . .	28
3.1.1	Método de Adams - Bashforth . . . . .	28
3.1.2	Método de Adams - Moulton . . . . .	31
3.2	Método de previsão e correção . . . . .	33
<b>4</b>	<b>Convergência</b>	<b>33</b>

<b>5</b>	<b>Estudo da decomposição de matéria orgânica antropogênica em um rio</b>	<b>36</b>
5.1	Utilizando os métodos numéricos . . . . .	38
5.2	Método de Euler . . . . .	38
5.3	Método de Euler melhorado . . . . .	38
5.4	Método de Runge-Kutta de quarto grau . . . . .	39
5.5	Método de previsão e correção . . . . .	39
5.6	Conclusões . . . . .	40
5.7	Considerações Finais . . . . .	43

### 1. Introdução

A teoria das Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) é objeto de intensa atividade de pesquisa, pois além da utilidade de tais equações na modelagem de diversos fenômenos que ocorrem nas mais diversas áreas do conhecimento como, por exemplo, dinâmica populacional, engenharia, física, química, economia e medicina, o estudo das Equações Diferenciais Ordinárias é motivado pelo interesse intrinsecamente matemático que essas equações possuem. As equações diferenciais ordinárias são poderosas representações teóricas de processos de evolução em que a taxa de variação do estado do processo em cada instante  $t$  depende do processo nesse instante.

Há métodos que resolvem analiticamente uma Equação Diferencial Ordinária, todavia nem sempre é possível obter uma solução analítica. Neste caso, os métodos numéricos são uma ferramenta eficaz para se encontrar uma solução aproximada.

Os métodos numéricos que solucionam equações diferenciais têm sido explorados por matemáticos desde o século XVII. Podemos citar alguns nomes famosos que tiveram suas participações na teoria dos métodos numéricos por conta de seus avanços no cálculo, como Isaac Newton (1643-1729) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1643-1716). Porém, foi Leonhard Euler (1707-1783) que conduziu os estudos dos métodos que utilizamos até os dias atuais.

Euler deduziu um método iterativo que aproximava a solução da equação diferencial desde que fosse dada uma condição inicial. A prova rigorosa para esse método iterativo só foi apresentada anos mais tarde por Augustin-Louis Cauchy (1789-1857) e reescrita de forma aprimorada por Rudolf Lipschitz (1832-1908).

Naquela época não existia uma real necessidade do uso dos métodos numéricos, e o método desenvolvido por Euler só foi se tornar usual quando da física, no final do século XIX - início do século XX, desenvolveram-se alguns estudos como, por exemplo, a teoria de calor por Fourier, a mecânica celeste por Adams, entre outros.

Em meados de 1900, vieram os sucessores Carl Runge (1856-1927) e Martin Wilhelm Kutta (1867-1944) que apresentaram generalizações eficientes do mé-

todo numérico de Euler. Assim, os métodos de Euler e Runge-Kutta fecham o bloco dos procedimentos de *passo único*, isto é, métodos em que apenas uma condição inicial é necessária para poder dar início às iterações e encontrar uma solução numérica aproximada de um problema de valor inicial para uma equação diferencial ordinária.

O bloco formado por aqueles processos numéricos conhecidos como *métodos de passos múltiplos* começou a ser formado com os estudos de John Couch Adams (1819-1892) que, utilizando a proposta de Euler e a equação de Bashforth, apresentou uma técnica nova, mais conhecida como Adams-Bashforth. A primeira contribuição para uma melhoria do método de Adams-Bashforth veio em 1925, pelo matemático Forest Ray Moulton (1872-1952), originando assim o conhecido método de Adams-Moulton.

Somente depois da Segunda Guerra Mundial, com o aparecimento do primeiro computador, que os métodos numéricos começaram a ter um uso constante de forma sistemática. E assim foi possível calcular precisão, erros e instabilidade numérica de cada procedimento.

Neste trabalho exploraremos os métodos numéricos de Euler e de Runge-Kutta, com suas respectivas variações, que se enquadram no grupo dos métodos de passo único para investigar soluções de problemas de valor inicial para equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Outros métodos numéricos, mais conhecidos como métodos de passos múltiplos de Adams, terão suas teorias contempladas também neste artigo. Os métodos numéricos serão abordados nas Seções 2 e 3. Na Seção 4, analisaremos, de forma sucinta, a convergência dos métodos numéricos estudados nas seções anteriores. Na Seção 5, aplicaremos as técnicas e os métodos numéricos em um modelo matemático criado por Harold Warner Streeter e Earle Bernard Phelps (1876-1953) em 1925 a partir da análise do processo de oxidação e aeração no Rio Ohio que fica nos Estados Unidos, com base em dados obtidos entre 1914 e 1915. Earle Bernard Phelps foi o precursor de estudos sobre qualidade da água.

Informamos que os cálculos e os gráficos foram feitos com o auxílio do software *MATLAB*<sup>®</sup>. A programação utilizada para cada gráfico encontra-se na nossa referência básica [4].

## 2. Métodos numéricos de um passo

Consideremos o problema de valor inicial de primeira ordem

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x(t)) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases} \quad (1)$$

em que  $f : \Omega \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  é uma função dada,  $\Omega$  é aberto e  $(t_0, x_0) \in \Omega$ .

É sabido que se  $f$  e  $D_2f$  forem contínuas então o problema de valor inicial (1) tem uma única solução  $x = \psi(t)$  em algum intervalo contendo o ponto

inicial  $t_0$  (veja [9], Corolário 3, página 15). Atentamos aqui para o fato de que não é possível, em geral, encontrar a solução  $\psi$  por meio analíticos. Uma maneira de superar essa dificuldade é calcular valores aproximados da solução  $x = \psi(t)$  do problema de valor inicial (1) para valores selecionados de  $t$ . Os valores aproximados da solução serão acompanhados de cotas para os erros que garantem um nível de precisão para as aproximações.

Existem vários métodos que fornecem aproximações numéricas de soluções de equações diferenciais. Esta seção será dedicada a uma discussão sobre alguns deles, que são de um passo só. O primeiro método a ser abordado será o mais velho e o mais simples de todos, o chamado método da reta tangente ou método de Euler, desenvolvido por Euler por volta de 1768. Depois, apresentaremos o método de Euler melhorado e, por fim, discutiremos o método desenvolvido, originalmente, por Runge e Kutta.

Iniciaremos a seção com uma subseção de caráter preliminar na qual dissertaremos sobre o Polinômio de Taylor, que está inteiramente relacionado aos métodos numéricos que aparecerão no trabalho.

2.1. POLINÔMIO DE TAYLOR E A RETA TANGENTE. Sejam  $I \subseteq \mathbb{R}$  um intervalo e  $t_0 \in I$ . A reta que melhor aproxima o gráfico de uma função  $x : I \rightarrow \mathbb{R}$  derivável em uma vizinhança de um ponto  $t_0$  é a *reta tangente* ao gráfico de  $x$  no ponto  $t_0$ :

$$l(t) = x(t_0) + x'(t_0)(t - t_0). \quad (2)$$

Esta é a única reta que satisfaz  $l(t_0) = x(t_0)$  e  $l'(t_0) = x'(t_0)$  ou, equivalentemente, é a única reta que satisfaz a condição:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \frac{R(t)}{t - t_0} = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{x(t) - l(t)}{t - t_0} = 0,$$

onde  $R(t)$  é o resto da aproximação de  $x$  por  $l$ . A equação da reta acima define o *Polinômio de Taylor de grau 1 no ponto  $t_0$* :

$$p_1(t) = x(t_0) + x'(t_0)(t - t_0). \quad (3)$$

Se  $x : I \rightarrow \mathbb{R}$  for  $n$ -vezes derivável no ponto  $t_0$ , o polinômio de grau menor do que ou igual a  $n$ ,

$$p_n(h) = x(t_0) + x'(t_0)h + \frac{h^2}{2!}x''(t_0) + \cdots + \frac{h^n}{n!}x^{(n)}(t_0),$$

será denominado o *Polinômio de Taylor de grau  $n$  no ponto  $t_0$* , onde  $x^{(n)}(t_0)$  é a derivada de ordem  $n$  de  $x$  no ponto  $t_0$ . Convencionamos que  $x^{(0)}$  é igual a  $x$ .

O Polinômio de Taylor de grau  $n$  de  $x$  no ponto  $t_0$  é o único polinômio  $p$  de grau menor do que ou igual a  $n$  cujas derivadas  $p(0), p'(0), \dots, p^{(n)}(0)$  no

ponto 0 coincidem com as derivadas correspondentes de  $x$  no ponto  $t_0$ , pois, nesse caso, o coeficiente de ordem  $j$  de  $p$  é  $\frac{p^j(0)}{j!} = \frac{x^j(t_0)}{j!}$ ,  $j = 0, 1, \dots, n$ .

O próximo resultado, cuja prova pode ser encontrada na referência [3], página 282, atesta que o Polinômio de Taylor de grau  $n$  para  $x$  no ponto  $t_0$  aproxima  $x$ , numa vizinhança do ponto  $t_0$ , a menos de um infinitésimo de ordem superior a  $n$ .

**Teorema 2.1** (Fórmula de Taylor Infinitesimal). *Se  $x : I \rightarrow \mathbb{R}$  é uma função  $n$ -vezes derivável no ponto  $t_0 \in I$ , então, para todo  $h$  tal que  $t_0 + h \in I$ , tem-se:*

$$x(t_0 + h) = x(t_0) + x'(t_0)h + \frac{h^2}{2!}x''(t_0) + \dots + \frac{h^n}{n!}x^{(n)}(t_0) + R_n(h),$$

com  $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{R_n(h)}{h^n} = 0$ .

Ademais,  $p(h) = \sum_{j=0}^n \frac{x^j(t_0)}{j!}h^j$  é o único polinômio de grau menor do que ou igual a  $n$  tal que

$$x(t_0 + h) = p(h) + R_n(h),$$

com  $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{R_n(h)}{h^n} = 0$ .

Vejamos agora outra fórmula de Taylor, que fornece uma estimativa da diferença  $x(t_0 + h) - x(t_0)$  para um valor fixo de  $h$ , isto é, sem supor  $h \rightarrow 0$ . Esta fórmula proporciona uma generalização do Teorema do Valor Médio para funções  $n$ -vezes derivável.

**Teorema 2.2** (Fórmula de Taylor com Resto de Lagrange). *Se  $x : [t_0, b] \rightarrow \mathbb{R}$  é uma função de classe  $C^{n-1}$ ,  $n$ -vezes derivável no aberto  $(t_0, b)$ , então existe  $\xi \in (t_0, b)$  tal que*

$$x(b) = x(t_0) + x'(t_0)(b - t_0) + \dots + \frac{(b - t_0)^{n-1}}{n - 1!}x^{(n-1)}(t_0) + \frac{(b - t_0)^n}{n!}x^{(n)}(\xi). \tag{4}$$

Pondo  $b = t_0 + h$ , isto equivale a dizer que existe  $\theta \in (0, 1)$  tal que

$$x(t_0 + h) = x(t_0) + x'(t_0)h + \dots + \frac{h^{n-1}}{n - 1!}x^{(n-1)}(t_0) + \frac{h^n}{n!}x^{(n)}(t_0 + \theta h).$$

A prova do resultado acima também pode ser encontrada em [3], página 283.

A parcela  $R_n(b) = \frac{x^{(n)}(\xi)}{n!}(b - t_0)^n$  em (4) é denominada *Resto de Lagrange*. Em (2) temos que  $R(t) = R_1(t)$ .

2.2. MÉTODO DE EULER. Consideremos o problema de valor inicial (1) e suponhamos que  $f$  seja de classe  $C^1$  (dessa forma  $f$  é contínua e  $D_2f$  é contínua). Seja  $x = \psi(t)$  a solução exata deste problema num intervalo  $[t_0, b]$ . Tal solução existe e é única, conforme fora supramencionado. Além disso, a solução  $x = \psi(t)$  é de classe  $C^2$ , já que  $f$  é de classe  $C^1$ . Queremos encontrar uma aproximação para a solução  $x = \psi(t)$  no intervalo  $[t_0, b]$ . Como  $x : [t_0, b] \rightarrow \mathbb{R}$  é uma função de classe  $C^2$ , consideremos a aproximação de  $x$  pelo polinômio de Taylor de grau 1:

$$x(t+h) = x(t) + hx'(t) + R_2(t), \quad (5)$$

para  $t \in [t_0, b)$ , onde  $h > 0$  é tal que  $t+h \leq b$  e é denominado *tamanho do passo*.

Como  $x'(t) = f(t, x(t))$ , a relação (5) é equivalente a:

$$x(t+h) = x(t) + hf(t, x(t)) + R_2(t). \quad (6)$$

Seja  $t = t_n$ , com  $t_n = t_0 + nh$  e  $n \in \mathbb{N}$  variando de 0 até  $N$ .  $N$  é o número de passos necessários para chegar até o fim do intervalo ao qual se quer aproximar a solução;  $N$  tem que ser um número natural. Como  $t_0 \leq t \leq b$ , tomemos  $N$  o maior natural menor do que  $D$ , onde  $D$  é dado por:

$$D = \frac{b - t_0}{h}.$$

Reescrevendo (6) com  $t = t_n$  e  $n \in \{0, \dots, N\} \subset \mathbb{N}$ , temos:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hf(t_n, x(t_n)) + R_2(t_n).$$

Temos, assim, um processo de iteração a partir do dado inicial do problema,  $x(t_0) = x_0$ . Para cada  $n \in \{0, \dots, N\}$ ,  $x(t_n)$  aproxima o valor da solução  $\psi(t)$  no ponto  $t_n$ . Esse processo é denominado *método de Euler* ou *método da reta tangente*, o segundo nome vem da interpretação geométrica do método. Observe a Figura 1.

Em vermelho, ilustramos os pontos da solução exata  $\psi(t)$  de (1). Dando início ao método pela condição inicial  $(t_0, \psi(t_0)) = (t_0, x_0)$ , é traçada a reta tangente ao gráfico de  $\psi$  por este ponto com inclinação dada pela derivada informada no problema de valor inicial,  $x'(t_0) = f(t_0, x_0)$ . Na Figura 1, a reta tangente está em azul. Essa primeira reta tangente nos fornecerá o valor  $x(t_1)$ , onde  $t_1 = t_0 + h$ . Em seguida é traçada a reta tangente pelo ponto  $(t_1, x_1)$  com inclinação  $x'(t_1) = f(t_1, x_1)$ , que também está representada em azul, e essa nova reta nos fornecerá o valor de  $x(t_2)$ , onde  $t_2 = t_0 + 2h$ . E assim o método segue sucessivamente. Essa interpretação geométrica serve para enfatizar que o erro vai se acumulando durante o processo. Para o método de Euler ser

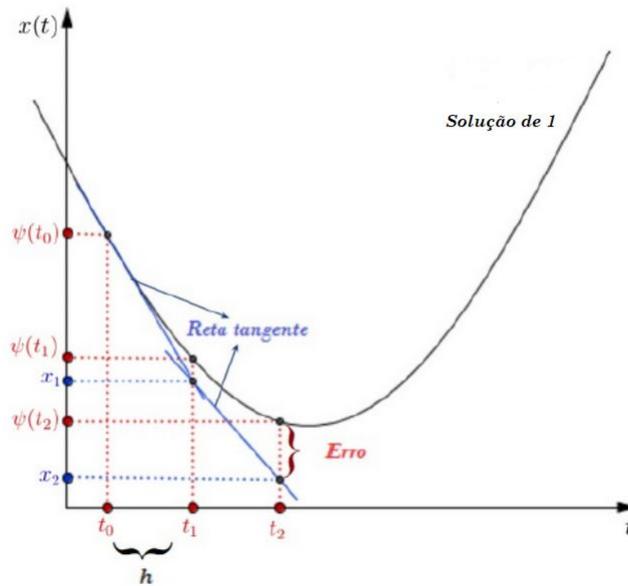


Figura 1: Interpretação geométrica do método de Euler.

aplicado é preciso tomar um passo  $h$  e saber o tempo final  $t$  para dar início às iterações utilizando a fórmula abaixo:

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n), \tag{7}$$

sendo  $x_n = x(t_n)$  e  $t_n = t_0 + nh$ .

Com uma pequena dose de programação, é possível desenvolver um algoritmo que nos auxilie a visualizar o processo feito nas iterações. Um exemplo de algoritmo segue abaixo:

1. Entre com a condição inicial  $x(t_0) = x_0$ ;
2. Coloque o número de iterações desejadas  $n$ ;
3. Entre com o tempo final  $t_f$ ;
4. Faça  $h = (t_f - t_0)/n$ ;
5. Para  $i = 1 : n$  faça:
  - $f(i) = x(i)$ ;
  - $t(i+1) = t(i) + h$ ;
  - $x(i+1) = x(i) + h * f(i)$ ;
 fim
6. Imprima os pontos  $(t(i), x(i))$ .

Vamos, agora, aplicar o método de Euler a problemas de valor inicial cujas soluções analíticas são conhecidas. Veremos como o tamanho do passo  $h$  interfere no erro de aproximação da solução exata pela numérica.

**Exemplo 2.3.** *O problema de valor inicial*

$$\begin{cases} x'(t) = kx(t) \\ x(0) = 2, \end{cases}$$

em que  $k$  é uma constante positiva, tem como solução exata a função  $\psi(t) = 2e^{kt}$ . Consideremos  $k = 1$  e calculemos os valores aproximados  $x(t)$  de  $\psi(t)$  para  $t \in [0, 0.9]$ , utilizando o método de Euler (fórmula (7)). Para aplicarmos o método, tomemos  $h = 0.3$ . Pelo que foi visto anteriormente, o número de passos necessários para chegar até  $t = 0.9$  é 3. Para  $n = 0$ , temos

$$\begin{aligned} t_0 &= 0 \\ x_0 &= 2. \end{aligned}$$

Para  $n = 1$ , temos

$$\begin{aligned} t_1 &= t_0 + h = 0.3 \\ x_1 &= x_0 + hf(t_0, x_0) = 2 + 0.3 * 2 = 2.6. \end{aligned}$$

Para  $n = 2$ , temos

$$\begin{aligned} t_2 &= t_0 + 2h = 0.6 \\ x_2 &= x_1 + hf(t_1, x_1) = 2.6 + 0.3 * 2.6 = 3.38. \end{aligned}$$

A tabela a seguir contém as iterações e o valor do erro de aproximação em cada iteração.

$n$	$t_n$	$x_n = x_{n-1} + hx'_{n-1}$	$\psi(t_n) = 2e^{t_n}$	Erro = $\psi_n - x_n$
0	0	2	2	0
1	0.3	2.6	2.6997	0.0997
2	0.6	3.38	3.6442	0.2642
3	0.9	4.394	4.9192	0.5252

Tabela 1: Método de Euler - Exemplo 2.3 com  $h = 0.3$ .

Observando o gráfico ilustrado na Figura 2 vemos que os pontos calculados no Exemplo 2.3 ficaram distantes da solução exata. Assim, o processo nos forneceu uma aproximação com um erro excessivo. Isso ocorreu por conta da escolha do passo  $h$ , que foi relativamente grande. Aplicando o método com  $h = 0.1$ , temos:

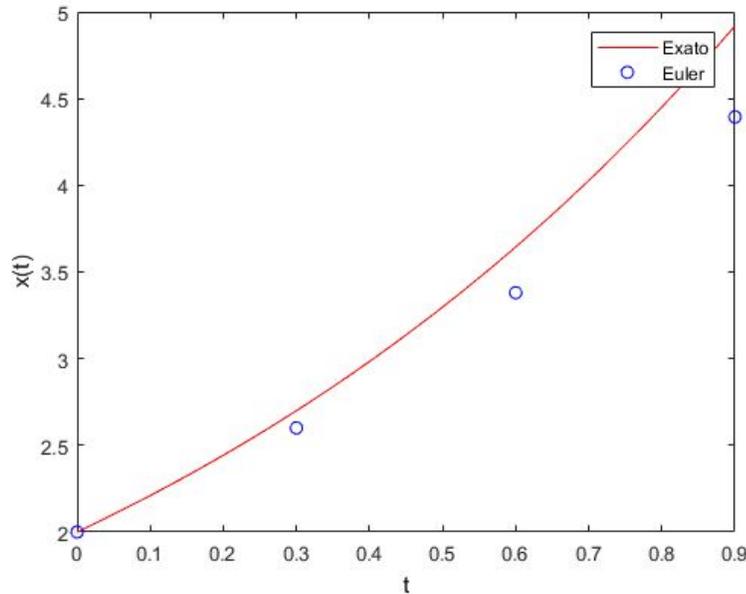


Figura 2: Gráfico dos pontos da Tabela 1 com  $h = 0.3$ .

$n$	$t_n$	$x_n = x_{n-1} + hx'_{n-1}$	$-(t_n) = 2e^{t_n}$	Erro = $x_n - x_n$
0	0	2	2	0
1	0.1	2.2	2.2103	0.0103
2	0.2	2.42	2.4428	0.0228
3	0.3	2.662	2.6997	0.0377
4	0.4	2.9282	2.9836	0.0554
5	0.5	3.2210	3.2974	0.0764
6	0.6	3.5431	3.6442	0.1011
7	0.7	3.8974	4.0275	0.1300
8	0.8	4.2871	4.4510	0.1639
9	0.9	4.7158	4.9192	0.2033

Tabela 2: Método de Euler com  $h = 0.1$ .

Observando essa nova tabela e a Figura 3, vemos que quanto menor  $h$ , mais a solução numérica se aproxima da solução exata, já que o erro diminui consideravelmente. O gráfico com este novo  $h$  ficou muito mais parecido com uma exponencial do que na Figura 2. Note que, tomando um  $h$  três vezes menor do que o anterior, o erro de uma tabela para outra no mesmo  $t$  diminuiu proporcionalmente a  $h$ . Porém, o esforço computacional aumentou, pois precisamos de mais passos para chegar a  $t = 0.9$ .

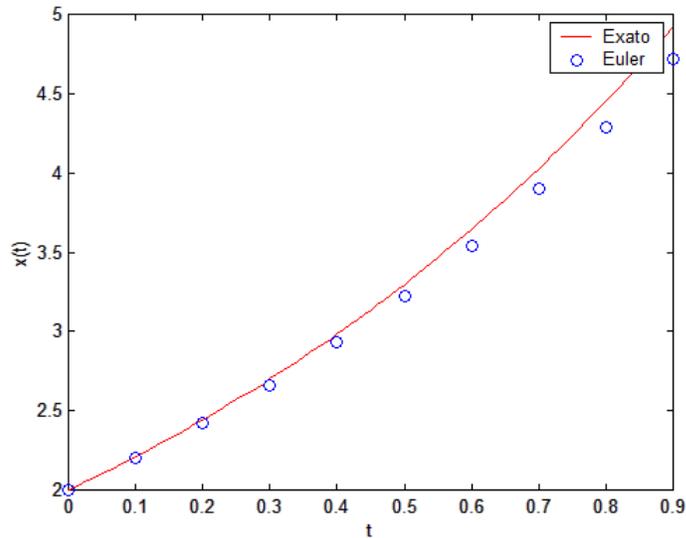


Figura 3: Gráfico dos pontos da Tabela 2 com  $h = 0.1$ .

**Exemplo 2.4.** Vamos resolver o problema de valor inicial

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3 \end{cases} \quad (8)$$

utilizando o Método de Euler com  $h = 0.1$  e, posteriormente, com  $h = 0.05$  para compararmos os resultados. Consideraremos o tempo final  $t = 1$ .

A solução exata do problema (8) é a função  $\psi(t) = e^{-t} + 2e^{-2t}$ . Para encontrarmos a solução numérica, começaremos as iterações utilizando a fórmula (7). Para  $n = 0$ , temos

$$\begin{aligned} t_0 &= 0 \\ x_0 &= 3. \end{aligned}$$

Para  $n = 1$ , temos

$$\begin{aligned} t_1 &= t_0 + h = 0.1 \\ x_1 &= x_0 + hf(t_0, x_0) = 3 + 0.1(e^{-0} - 2 * 3) = 2.5. \end{aligned}$$

Para  $n = 2$ , temos

$$\begin{aligned} t_2 &= t_0 + 2h = 0.2 \\ x_2 &= x_1 + hf(t_1, x_1) = 2.5 + 0,1(e^{-0.1} - 2 * 2.5) = 2.0904. \end{aligned}$$

Desse modo, continuamos o processo até  $t_{10} = 1$ . Veja a Tabela 3 com os valores resultantes das iterações do método de Euler utilizando  $h = 0.1$ . Na última coluna, temos o erro absoluto que é dado pelo módulo da diferença entre a solução exata  $\psi(t)$  e a aproximação  $x_n$ .

$n$	$t_n$	$x_n$	EXATA	Erro Absoluto
0	0	3	3	0
1	0.1	2.5	2.5422	0.0422
2	0.2	2.0904	2.1593	0.0688
3	0.3	1.7542	1.8384	0.0841
4	0.4	1.4774	1.5689	0.0914
5	0.5	1.2490	1.3422	0.0932
6	0.6	1.0598	1.1512	0.0913
7	0.7	0.9027	0.9897	0.087
8	0.8	0.7719	0.8531	0.0812
9	0.9	0.6624	0.7371	0.0747
10	1	0.5706	0.6385	0.0679

Tabela 3: Método de Euler com  $h = 0.1$ .

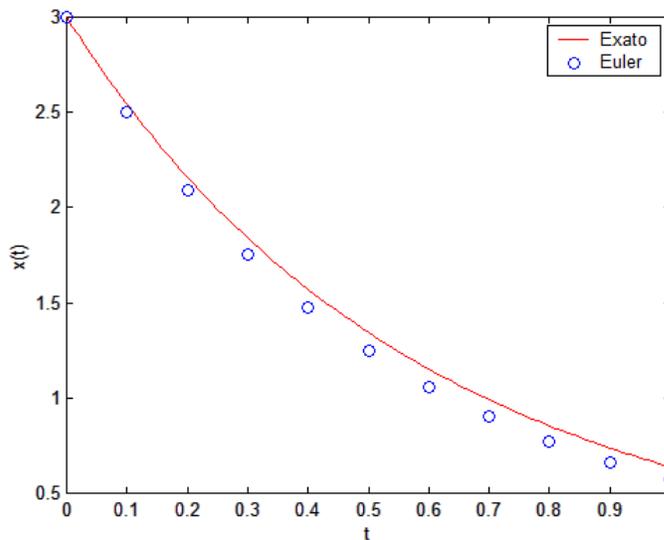


Figura 4: Gráfico dos pontos da Tabela 3 com  $h = 0.1$ .

Na Figura 4, podemos notar o quão próximo da solução exata estão os pontos da solução aproximada pelo método de Euler. Iterando agora com  $h = 0.05$ , pela forma que o método foi deduzido, o erro sofrerá uma redução. Neste caso teremos ao todo 20 iterações. Na Tabela 4 a seguir, pularemos as iterações ímpares para diminuir o tamanho da tabela e colocar em destaque os resultados que nos interessam para comparação.

Podemos, então, visualizar como o tamanho do passo  $h$  tem influência sobre o erro. Ao diminuirmos  $h$  vemos que o erro também diminui. Veja as últimas colunas das Tabelas 3 e 4. Entretanto, alertamos que ao diminuirmos o tamanho do passo  $h$ , o

$n$	$t_n$	$x_n$	EXATA	Erro Absoluto
0	0	3	3	0
2	0.1	2.5225	2.5423	0.0197
4	0.2	2.1270	2.1593	0.0323
6	0.3	1.7986	1.8384	0.0397
8	0.4	1.5255	1.5689	0.0435
10	0.5	1.2977	1.3423	0.0446
12	0.6	1.1072	1.1512	0.0439
14	0.7	0.9477	0.9898	0.0421
16	0.8	0.8136	0.8531	0.0395
18	0.9	0.7006	0.7371	0.0365
20	1	0.6051	0.6385	0.0334

Tabela 4: Método de Euler - Exemplo 2.4 com  $h = 0.05$ .

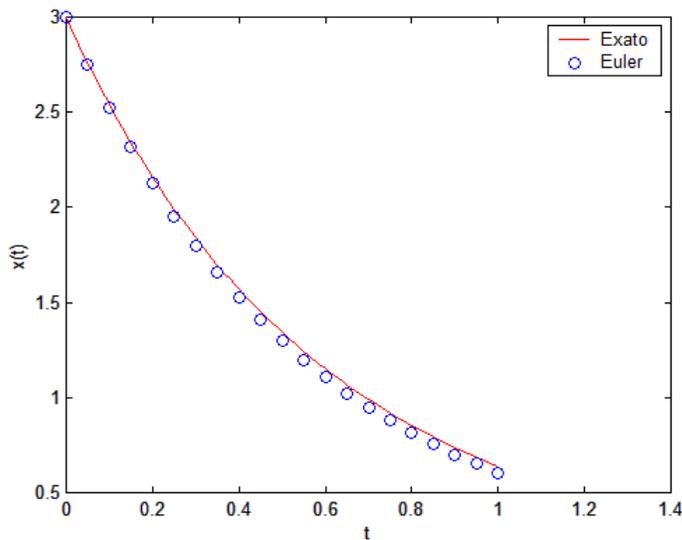


Figura 5: Gráfico dos pontos da Tabela 4 com  $h = 0.05$ .

*número de cálculos pode aumentar substancialmente. Para este exemplo específico a quantidade de passos foi dobrada.*

2.3. ERROS E ARREDONDAMENTO. Em uma situação real não teremos a solução exata para termos a noção de que a solução numérica estará próxima da solução do problema. Quão pequeno deve ser o tamanho do passo  $h$  para garantir uma precisão necessária e ao mesmo tempo não gerar uma quantidade excessiva de cálculos e deixar o método com um esforço computacional excedente? Exploraremos, nesta subseção, um pouco dos erros obtidos no método de Euler. Este estudo nos dará uma ideia geral sobre o melhor tamanho de  $h$  a se escolher para obter uma melhor precisão.

2.3.1. *Erro de truncamento global -  $E_n$ .* Suponhamos que nosso computador seja tal que possamos efetuar todos os cálculos com precisão absoluta, isto é, mantendo um número infinito de casas decimais. A diferença  $E_n$  entre a solução exata  $\psi(t_n)$  do problema de valor inicial (1) e seu valor numérico  $x_n$ , com todas as casas decimais, é chamada de *erro de truncamento global*. Temos, pois,

$$E_n = \psi(t_n) - x_n.$$

Para calcular este erro é necessário conhecer a solução exata e ainda não ter casas decimais arredondadas. Este erro tem duas causas: primeiro, em cada passo usamos uma fórmula aproximada para determinar  $x_{n+1}$ ; segundo, os dados de entrada em cada etapa estão aproximadamente corretos, já que, em geral,  $\psi(t_n)$  não é igual a  $x_n$ .

2.3.2. *Erro de truncamento local -  $e_n$ .* A única diferença do *erro de truncamento local* para o anterior é que tanto  $\psi(t_n)$  quanto  $x_n$  são usados com valores arredondados com um número finito de casas decimais, chamemos então de  $\tilde{\psi}(t_n)$  e  $\tilde{x}_n$  os valores com casas decimais arredondadas. Este erro é o mais viável e utilizado em nossas contas quando sabemos a solução exata, assim:

$$e_n = \tilde{\psi}(t_n) - \tilde{x}_n.$$

2.3.3. *Erro de arredondamento -  $A_n$ .* Como em todas as iterações temos um número finito de casas decimais, em certo momento começará a acontecer arredondamentos feitos pelos computadores. Então, se  $x_n$  for o valor numérico de fato, com todas as casas decimais, e  $X_n$  for o valor com arredondamento, o *erro de arredondamento*  $A_n$  será dado por:

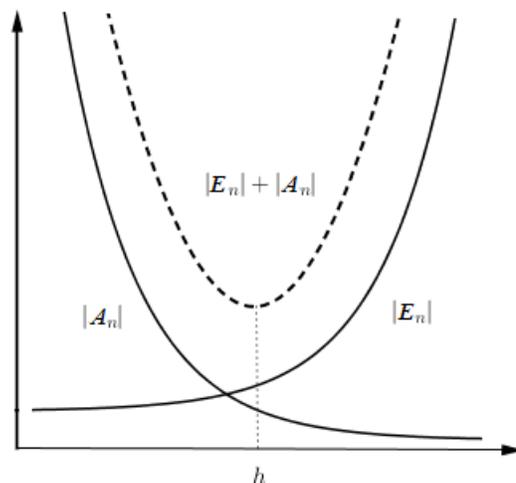
$$A_n = x_n - X_n,$$

o qual só será possível calcular possuindo um super computador sem limite de casas decimais.

2.3.4. *Valor absoluto do erro total.* Considerando os erros introduzidos anteriormente, o *valor absoluto do erro total* em um ponto  $t_n$  em questão será dado por:

$$|\psi(t_n) - x_n| = |\psi(t_n) - X_n + X_n - x_n| \leq |\psi(t_n) - X_n| + |X_n - x_n| = |E_n| + |A_n|.$$

Logo, o erro total é limitado pela soma dos valores absolutos dos erros de truncamento e de arredondamento. Pelo método de Euler já deu para perceber que quanto maior o tamanho do passo  $h$  maior será o erro de truncamento. Porém, se maior for o  $h$ , então teremos bem menos passos e, assim, menor será o erro de arredondamento. Com o mesmo raciocínio, quanto menor o  $h$ , menor será  $E_n$ , mas com um maior número de iterações, maior será  $A_n$ . O gráfico a seguir ilustra essa conclusão.



Como se pode observar, existirá um valor  $h$  ideal, que não poderá ser muito pequeno, nem muito grande por conta dos erros de truncamento e arredondamento que são limitados pelo erro absoluto total. O  $h$  ideal é a abscissa do vértice da parábola com concavidade para cima que representa o gráfico do erro absoluto.

Utilizando o problema de valor inicial do Exemplo 2.4 e variando o  $h$ , construímos a Tabela 5 a fim de encontrar o melhor  $h$  para este problema.

$h$	$n$	$x_{n/2}$	Erro $e_{n/2}$	$x_n$	Erro $e_n$
0.05	20	1.2976	0.0044	0.6051	0.0334
0.025	40	1.3204	0.0218	0.6219	0.0165
0.001	1000	1.3414	0.0008	0.6378	0.0006
0.0005	2000	1.3449	0.0004	0.6382	0.0003
0.00025	4000	1.342	0.0002	0.6383	0.0001
0.0001	10 000	1.3422	1.3422	0.6384	0.6382

Tabela 5: Investigando o melhor  $h$  para o Exemplo 2.4.

A coluna do  $n$  nos diz quantos passos serão necessários para chegar até  $t = 1$ . Na terceira coluna se encontra o valor de  $x_n$ , na ‘metade do caminho’, isto é, em  $t = 0.5$ . Como podemos perceber, o melhor  $h$  a ser tomado para este problema de valor inicial está entre 0.00025 e 0.0001. Note que, quando tomamos o passo  $h = 0.0001$ , o erro tornou a aumentar.

É claro que o intervalo onde se encontra o melhor  $h$  varia de problema para problema. E varia também dependendo do método a ser escolhido. Veremos outros métodos numéricos e em todos eles os erros estarão presentes.

Como já dissemos, em uma situação problemática real, não teremos a solução exata nem para calcularmos o erro de truncamento local. Por isso, faz-se

necessário estimar o erro em cada método numérico utilizado. Para o método de Euler, tomemos a aproximação pelo polinômio de Taylor com resto de Lagrange (Teorema 2.2) da solução exata do problema de valor inicial (1), que é dada por  $\psi(t)$ , ou seja:

$$\psi(t_{n+1}) = \psi(t_n) + h\psi'(t_n) + h^2 \frac{1}{2!} \psi''(t'_n), \quad (9)$$

com  $t_n < t'_n < t_{n+1}$ . Subtraindo dessa equação acima  $x_{n+1} = x_n + hx'_n$ , temos:

$$\psi(t_{n+1}) - x_{n+1} = [\psi(t_n) - x_n] + h[\psi'(t_n) - x'_n] + h^2 \frac{1}{2!} \psi''(t'_n).$$

Se fizermos  $\psi(t_n) = x_n$ , encontraremos o erro de truncamento local

$$e_{n+1} = \psi(t_{n+1}) - x_{n+1} = h^2 \frac{1}{2!} \psi''(t'_n), \quad (10)$$

que é proporcional ao quadrado do passo  $h$  e depende da segunda derivada da solução exata. Se estivermos calculando o valor da solução em um intervalo limitado, ou seja, para  $t \in [t_0, b]$ , então teremos  $|\psi''(t)| \leq C$ , já que  $\psi$  é de classe  $C^2$ , e assim:

$$e_{n+1} \leq C \frac{h^2}{2}. \quad (11)$$

Então, conseguimos estimar um intervalo de tolerância para o  $h$ , quando se é dado um valor máximo para o erro  $e_{n+1}$ . Como a estimativa (11) é baseada no maior valor possível de  $|\psi''(t)|$ , esta nos auxiliará na escolha do tamanho  $h$  para que o erro de truncamento local não ultrapasse um valor de tolerância dado. Por exemplo, supondo que este valor de tolerância seja  $\varepsilon$ , teremos:

$$e_{n+1} \leq C \frac{h^2}{2} \leq \varepsilon \Rightarrow h \leq \sqrt{\frac{2\varepsilon}{C}}. \quad (12)$$

A maior dificuldade reside no fato de que, na maioria dos casos, não conhecemos a solução exata, pois o valor  $C$  provém da estimativa de  $\psi''(t)$ .

**Exemplo 2.5.** Consideremos o problema de valor inicial abaixo que tem como solução exata a função  $\psi(t) = 2e^t$ :

$$\begin{cases} x'(t) = x \\ x(0) = 2. \end{cases} \quad (13)$$

Pela igualdade (10), temos

$$e_{n+1} = \frac{2e^{t_n^*} h^2}{2}, \text{ com } t_n < t_n^* < t_n + h.$$

Assim, para o passo  $h = 0.1$ , o primeiro erro é:

$$e_1 = \frac{2e^{t_0^*} 0.1^2}{2} = 0.01e^{t_0^*}, \quad 0 < t_0^* < 0.1.$$

Como  $e_1$  é positivo e  $e^{t_0^*} < e^{0.1}$ , segue que

$$e_1 \leq 0.01e^{t_0^*} \leq 0.01e^{0.1} = 0.011051709.$$

Como  $t_0^* > 0$ , é claro que  $e^{t_0^*} > e^0 = 1$ , de onde segue que  $e_1 > 0.01$ . Assim, o erro neste primeiro passo está estimado em  $0.01 < e_1 < 0.011051709$ .

Se quiséssemos ter um erro local em  $0 < t < 0.1$  menor que  $\varepsilon = 0.001$  utilizando (12), deveríamos ter:

$$e_1 \leq \frac{2e^t h^2}{2} \leq 0.001,$$

ou seja,

$$h \leq \sqrt{\frac{0.001}{e^{t_0^*}}} \leq 0.000904837.$$

Portanto, se desejamos ter um erro de truncamento local menor que 0.001, precisamos considerar  $h < 0.0009$ .

**2.4. MÉTODO DE EULER MELHORADO.** É possível notar que o erro no método de Euler é grande. Com o objetivo de diminuir este erro de aproximação, podemos utilizar o *método de Euler melhorado* ou *método do Trapézio*.

Em vez de avançarmos ao longo da reta tangente no ponto  $(t_0, x_0)$  com inclinação dada por  $f(t_0, x_0)$  até o ponto  $(t_1, x_1)$  e assim por diante, o método de Euler melhorado consiste em avançarmos ao longo da reta que passa por  $(t_0, x_0)$  com inclinação dada pela média entre  $f(t_0, x_0)$  e  $f(t_1, x_1)$ , para calcularmos  $x_1$ . Teremos assim:

$$x_1 = x_0 + h \frac{f(t_0, x_0) + f(t_1, x_1)}{2}.$$

O valor de  $f(t_1, x_1)$  é calculado pelo método de Euler. Observando a Figura 6 vemos a interpretação geométrica do que acabamos de explicar. Mantemos em azul os passos do método de Euler e, em preto, ilustramos os passos do método de Euler melhorado. As inclinações das *retas medianas* são dadas por:

$$\frac{f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x'_{n+1})}{2},$$

onde o ponto  $x'_n$  é calculado usando o método de Euler.

De uma forma mais concisa, o método de Euler melhorado consiste nas fórmulas:

$$x'_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n), \tag{14}$$

$$x_{n+1} = x_n + h \left[ \frac{f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x'_{n+1})}{2} \right]. \tag{15}$$

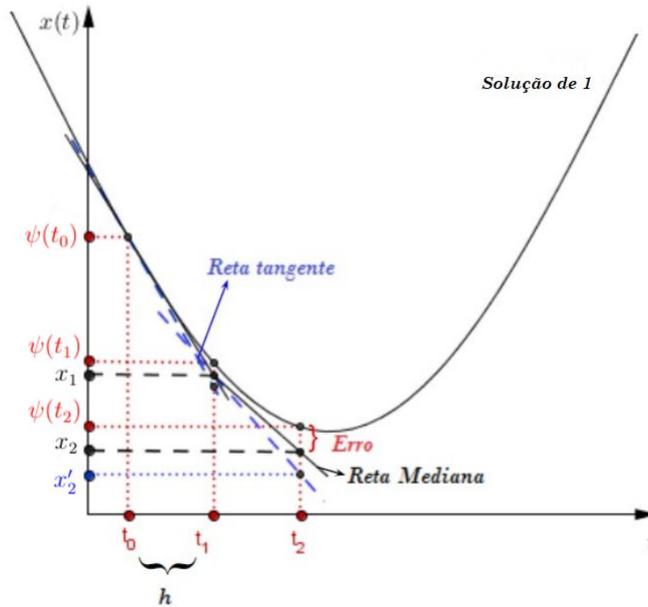


Figura 6: Interpretação geométrica do método de Euler melhorado.

Na Subseção 2.2, no Exemplo 2.4, encontramos a solução aproximada do problema de valor inicial

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3 \end{cases}$$

aplicando o método de Euler. Agora, resolveremos o mesmo problema utilizando o método de Euler melhorado, para compararmos os métodos. Tomaremos  $h = 0.1$ . Sabemos que  $x_0 = 3$ . Utilizaremos (14) para as primeiras iterações. Para  $n = 0$ , temos:

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_0 + h \cdot f(t_0, x_0) \\ x'_1 &= 3 + 0.1 \cdot (e^{-0} - 2 \cdot 3) \\ x'_1 &= 2.5. \end{aligned}$$

Colocando este valor encontrado de  $x'_1$  na fórmula (15), temos:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + h \frac{f(t_0, x_0) + f(t_1, x'_1)}{2} \\ x_1 &= 3 + 0.1 \cdot \frac{(e^{-0} - 2 \cdot 3) + (e^{-0.1} - 2 \cdot 2.5)}{2} \\ x_1 &= 2.5452. \end{aligned}$$

Para  $n = 1$ , utilizando (14), calculamos  $x'_2 = 2.5814$ . Agora, colocando este valor em (15), obtemos  $x_2 = 2.1678$ . Prosseguindo desta forma, construímos a Tabela 6:

$n$	$t_n$	$x_n$	EXATA	Erro Euler Melhorado	Erro Euler
0	0	3	3	0	0
1	0.1	2.5	2.5423	0.0029	0.0423
2	0.2	2.0905	2.1594	0.0085	0.0689
3	0.3	1.7543	1.8384	0.0152	0.0842
4	0.4	1.4775	1.5690	0.0221	0.0915
5	0.5	1.2490	1.3423	0.0286	0.0933
6	0.6	1.0599	1.1512	0.0344	0.0913
7	0.7	0.9028	0.9898	0.0392	0.0870
8	0.8	0.7719	0.8531	0.0431	0.0812
9	0.9	0.6624	0.7372	0.0460	0.0747
10	1	0.5706	0.6386	0.0479	0.0679

Tabela 6: Método de Euler melhorado - Exemplo 2.4, com  $h = 0.1$ .

A última coluna da Tabela 3 foi colocada na última coluna da Tabela 6 para podermos comparar os erros em cada um dos métodos. É notável como o erro nos primeiros passos diminui de um método para o outro. Porém, na décima iteração, já temos um acúmulo de erros até no Euler melhorado. Na Figura 7, fica visível o quão mais próxima da solução exata a solução aproximada por este método fica.

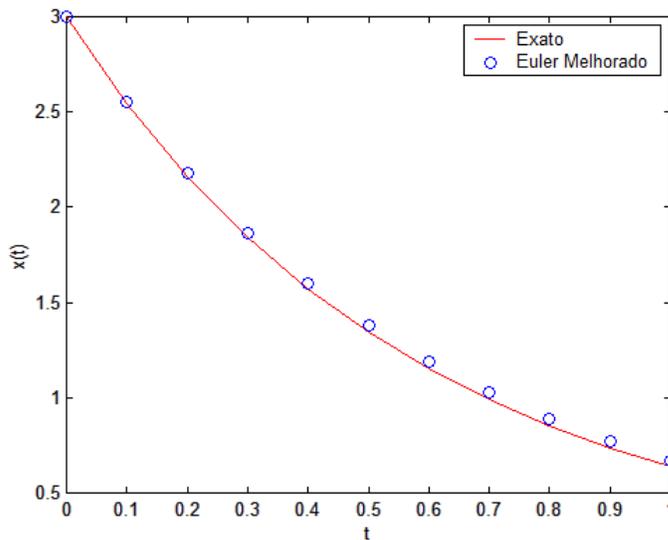


Figura 7: Gráfico dos pontos da Tabela 6 com  $h = 0.1$ .

Reduzindo o passo  $h$  à metade, isto é, considerando  $h = 0.05$ , dobramos as iterações, porém adquirimos um resultado com um erro menor. Observe a Tabela 7, com os valores das iterações, com a última coluna extraída da Tabela

4 para facilitar a comparação entre os métodos.

<b>n</b>	<b>t<sub>n</sub></b>	<b>x<sub>n</sub></b>	<b>EXATA</b>	<b>Erro Euler Melhorado</b>	<b>Erro Euler</b>
0	0	3	3	0	0
2	0.1	2.5226	2.5423	0.0012	0.0197
4	0.2	2.1270	2.1594	0.0037	0.0323
6	0.3	1.7987	1.8384	0.0069	0.0398
8	0.4	1.5255	1.5690	0.0102	0.0435
10	0.5	1.2977	1.3423	0.0134	0.0446
12	0.6	1.1073	1.1512	0.0163	0.0439
14	0.7	0.9477	0.9898	0.0187	0.0421
16	0.8	0.8136	0.8531	0.0207	0.0395
18	0.9	0.7006	0.7372	0.0223	0.0366
20	1	0.6051	0.6386	0.0234	0.0334

Tabela 7: Método de Euler melhorado - Exemplo 2.4, com  $h = 0.05$ .

Toda vez que diminuirmos o tamanho do passo  $h$ , estaremos mais próximos da solução exata? Na prática é o que gostaríamos de ter, porém nem sempre será verdade, já que temos também o erro de arredondamento a considerar toda vez que diminuimos o passo  $h$ .

**2.5. MÉTODO DE RUNGE-KUTTA.** Nesta subseção trataremos do método mais famoso: o *método de Runge-Kutta*. Ele nasce do método de Euler, sendo o Runge-Kutta de primeiro grau o próprio método de Euler. O Runge-Kutta de segundo grau é o método de Euler melhorado, como veremos a seguir. Concluiremos a subseção com o Runge-Kutta de quarto grau, que é o método mais preciso para a obtenção de soluções aproximadas para um problema de valor inicial.

Cada método de Runge-Kutta é uma comparação com um polinômio de Taylor conveniente, daí que surgem os graus em seus nomes. Quando comparado a um polinômio de grau 1, teremos o Runge-Kutta de primeiro grau. Ao fazermos essa comparação, o cálculo da derivada é eliminado, fazendo-se assim avaliações da função  $f$  em cada iteração.

Pelo Teorema 2.2, se  $x$  for uma função de classe  $C^k$ ,  $(k + 1)$ -vezes derivável em um intervalo contendo  $t_0$  e  $t$ , então existirá  $\xi \in (t_0, t)$  tal que

$$x(t) = x(t_0) + x'(t_0)(t - t_0) + \cdots + \frac{(t - t_0)^k}{k!} x^{(k)}(t_0) + \frac{(t - t_0)^{k+1}}{(k + 1)!} x^{(k+1)}(\xi). \quad (16)$$

A fórmula (16) será utilizada para descrever os métodos a seguir.

**2.5.1. Runge-Kutta de primeiro grau.** Se substituirmos  $t_0$  por  $t_n$  e  $t$  por  $t_{n+1} = t_n + h$ , a fórmula (16) equivale a:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + x'(t_n)h + \cdots + \frac{h^k}{k!} x^{(k)}(t_n) + \frac{h^{k+1}}{(k + 1)!} x^{(k+1)}(\xi), \quad (17)$$

onde  $\xi$  é algum número entre  $t_n$  e  $t_{n+1}$ .

Se  $k = 1$  na equação (17) e se o resto  $\frac{x''(\xi)}{2}h^2$  for pequeno, obteremos a fórmula de Euler:

$$x_{n+1} = x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) = x_n + hf(t_n, x_n).$$

Portanto, podemos concluir que o procedimento de Runge-Kutta de primeiro grau é o método de Euler básico, sendo o erro de truncamento local igual a  $e_{n+1} = \frac{h^2}{2!} x''(\xi)$ .

2.5.2. *Runge-Kutta de segundo grau.* Fazendo  $k = 2$  na equação (17), temos:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2!}x''(t_n) + \frac{h^3}{3!}x^{(3)}(\xi), \quad (18)$$

com  $\xi \in (t_n, t_{n+1})$ .

Vamos buscar uma função  $\varphi$  de forma que a equação (18) seja escrita da seguinte forma:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n) \quad (19)$$

com  $\varphi = ak_1 + bk_2$ . Devemos encontrar  $a, b, k_1$  e  $k_2$  de modo que  $x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n)$  seja igual ao polinômio de Taylor de  $x$  de grau 2, ou seja,

$$\begin{aligned} x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2!}x''(t_n) &= x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n) \\ h[x'(t_n) + \frac{h}{2!}x''(t_n)] &= h(ak_1 + bk_2) \\ [x'(t_n) + \frac{h}{2!}x''(t_n)] &= ak_1 + bk_2. \end{aligned} \quad (20)$$

Consideremos  $k_1 = x'(t_n) = f(t_n, x_n)$  e  $k_2 = f(t_n + \alpha h, x_n + \beta hk_1)$ . Vamos expandir  $k_2$  com o seu polinômio de Taylor de grau 1, centrado em  $(t_n, x_n)$  (ou seja, com  $h = 0$ ):

$$k_2 = f(t_n, x_n) + \alpha h \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t} + \beta h f(t_n, x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x} + R_2(t_n).$$

Lembrando que  $R_2(t_n)$  é o resto de Lagrange para um polinômio de grau 1. Vamos calcular  $ak_1 + bk_2$  e simplificar as contas, desprezando o resto  $R_2(t_n)$ , pois desejamos que ele seja suficientemente pequeno para ser desconsiderado.

$$\begin{aligned} ak_1 + bk_2 &= a(f(t_n, x_n)) + b \left[ f(t_n, x_n) + \alpha h \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t} + \beta h f(t_n, x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x} \right] \\ &= (a + b)f(t_n, x_n) + b\alpha h \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t} + b\beta h f(t_n, x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x}. \end{aligned}$$

Por (20) e pelas contas até aqui feitas, a igualdade

$$x'(t_n) + \frac{h}{2}x''(t_n) = f(t_n, x_n) + \frac{h}{2} \left[ \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t} + f(t_n, x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x} \right]$$

só acontece se

$$\begin{cases} a + b &= 1 \\ b\alpha &= \frac{1}{2} \\ b\beta &= \frac{1}{2} \end{cases}$$

Este sistema tem infinitas soluções; vamos considerar a solução em que  $a = b = \frac{1}{2}$  e  $\alpha = \beta = 1$ . Assim, por (19), temos

$$\begin{aligned} x(t_{n+1}) &= x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n) \\ x_{n+1} &= x_n + h \left[ \frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2 \right]. \end{aligned}$$

Com  $k_1 = f(t_n, x_n)$ ,  $k_2 = f(t_n + \alpha h, x_n + \beta k_1)$ ,  $\alpha = \beta = 1$ , obtemos:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{2}h[f(t_n, x_n)] + \frac{1}{2}h[f(t_n + h, x_n + f(t_n, x_n))].$$

Como  $t_n + h = t_{n+1}$ , obtemos

$$x_{n+1} = x_n + h \left[ \frac{f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x_n + f(t_n, x_n))}{2} \right],$$

que é a fórmula de Euler melhorada.

2.5.3. *Runge-Kutta de terceiro grau.* Os métodos de Runge-Kutta de graus mais elevados são obtidos de modo semelhante aos de segundo grau.

Fazendo  $k = 3$  na equação (17), temos:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2!}x''(t_n) + \frac{h^3}{3!}x'''(t_n) + \frac{h^4}{4!}x^{(4)}(\xi), \quad (21)$$

com  $\xi \in (t_n, t_{n+1})$ . Novamente, buscaremos uma função  $\varphi$  tal que  $x(t_{n+1}) = x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n)$ , porém, neste caso, devemos ter

$$\varphi = ak_1 + bk_2 + ck_3,$$

onde  $k_1, k_2$  e  $k_3$  aproximam derivadas em vários pontos do intervalo  $[t_n, t_{n+1}]$ . Aqui faz-se

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, x_n), \\ k_2 = f(t_n + \alpha_1 h, x_n + \beta_1 h k_1), \\ k_3 = f(t_n + \alpha_2 h, x_n + \beta_2 h k_2 + (\alpha_2 - \beta_2) h k_1). \end{cases}$$

Teremos um sistema com mais incógnitas do que equações, que também terá infinitas soluções. Como o Runge-Kutta de terceiro grau não nos fornece uma boa precisão, não nos atentaremos a resolução de tal sistema de equações. Porém, informamos ao leitor interessado que os cálculos dessa resolução podem ser encontrados em [2], páginas 125-131. A solução mais conhecida do Runge-Kutta de terceira ordem é:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6} [k_1 + 4k_2 + k_3],$$

onde

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, x_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + h, x_n + 2hk_2 - hk_1). \end{cases}$$

**Exemplo 2.6.** Calculemos a solução numérica do Exemplo 8, utilizando Runge-Kutta de terceira ordem. O resultado está na Tabela 8 a seguir:

<b>n</b>	<b>t<sub>n</sub></b>	<b>EXATA</b>	<b>Erro R-K 3° grau</b>	<b>Erro Euler Melhorado</b>
0	0	3.0000	0.0000	0.0000
1	0.1	2.5423	0.0421	0.0029
2	0.2	2.1594	0.0690	0.0085
3	0.3	1.8384	0.0849	0.0152
4	0.4	1.5690	0.0929	0.0221
5	0.5	1.3423	0.0953	0.0286
6	0.6	1.1512	0.0940	0.0344
7	0.7	0.9898	0.0902	0.0392
8	0.8	0.8531	0.0849	0.0431
9	0.9	0.7372	0.0788	0.0460
10	1	0.6386	0.0722	0.0479

Tabela 8: Método de Runge-Kutta de terceiro grau - Exemplo 2.4, com  $h = 0.1$ .

Observemos que apesar de ser um método diferenciado e com erro de truncamento de ordem 4, ainda não superamos o método de Euler melhorado neste exemplo. É claro que considerando longas distâncias, o Runge-Kutta de terceiro grau será a melhor escolha pelo simples fato de que os erros não se acumulam nas iterações, diferentemente do que ocorre em Euler.

n	t <sub>n</sub>	EXATA	ERRO R-K 3º grau	ERRO Euler Melhorado
0	0	3.00000	0.00000	0.00000
2	0.1	2.52142	0.02088	0.00119
4	0.2	2.12498	0.03439	0.00371
6	0.3	1.79593	0.04251	0.00686
8	0.4	1.52224	0.04674	0.01018
10	0.5	1.29407	0.04822	0.01338
12	0.6	1.10341	0.04779	0.01626
14	0.7	0.94369	0.04609	0.01873
16	0.8	0.80954	0.04358	0.02074
18	0.9	0.69656	0.04060	0.02229
20	1	0.60115	0.03740	0.02339

Tabela 9: Método de Runge-Kutta de terceiro grau - Exemplo 2.4, com  $h = 0.05$ .

A seguir veremos que o método de Runge Kutta de quarto grau, apesar de exigir um esforço computacional maior, ganha em eficácia, diminui os erros, e tem erro de truncamento de quinta ordem.

2.5.4. *Runge-Kutta de quarto grau.* O método mais preciso e mais utilizado é o método de Runge-Kutta de quarto grau.

Como nos casos anteriores, fazemos  $k = 4$  na equação (17):

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2!}x''(t_n) + \frac{h^3}{3!}x^{(3)}(t_n) + \frac{h^4}{4!}x^{(4)}(t_n) + \frac{h^5}{5!}x^{(5)}(\xi) \tag{22}$$

com  $\xi \in (t_n, t_{n+1})$ , e precisamos encontrar as constantes apropriadas para que

$$x_{n+1} = x_n + h \underbrace{(ak_1 + bk_2 + ck_3 + dk_4)}_{\varphi(t_n, x_n)},$$

sendo as constantes  $k_1, k_2, k_3$  e  $k_4$  dadas por:

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, x_n) \\ k_2 = f(t_n + \alpha_1 h, x_n + \beta_1 h k_1) \\ k_3 = f(t_n + \alpha_2 h, x_n + \beta_2 k_1 + \beta_3 h k_2) \\ k_4 = f(t_n + \alpha_3 h, x_n + \beta_4 k_1 + \beta_4 k_2 + \beta_5 h k_3). \end{cases}$$

Novamente, teremos um sistema com mais incógnitas do que equações e, consequentemente, infinitas soluções. A solução mais conhecida deste método, de acordo com Boyce & DiPrima [1], é dada por:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4],$$

com

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, x_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_2) \\ k_4 = f(t_n + h, x_n + hk_3). \end{cases}$$

Neste caso, o erro de truncamento global será de ordem 5, e dado por:

$$\frac{h^5}{5!} x^{(5)}(\xi).$$

**Exemplo 2.7.** Vamos encontrar uma solução numérica para o problema de valor inicial do Exemplo 2.4:

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3, \end{cases}$$

para o passo  $h = 0.1$ , utilizando o método de Runge-Kutta de quarto grau.

Conhecendo a condição inicial, encontraremos as constantes para  $n = 0$ . Com efeito,

$$k_1 = f(t_0, x_0) = e^{-t_0} - 2x_0 = -5,$$

$$k_2 = f(t_0 + \frac{h}{2}, x_0 + \frac{h}{2}k_1) = e^{-(t_0 + \frac{h}{2})} - 2(x_0 + \frac{h}{2}k_1) = -4.5488,$$

$$k_3 = f(t_0 + \frac{h}{2}, x_0 + \frac{h}{2}k_2) = e^{-(t_0 + \frac{h}{2})} - 2(x_0 + \frac{h}{2}k_2) = -4.5939,$$

$$k_4 = f(t_0 + h, x_0 + k_3h) = e^{-(t_0 + h)} - 2(x_0 + hk_3) = -4.1764.$$

Assim,

$$x_1 = x_0 + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] = 2.5423.$$

A solução exata é dada pela função  $\psi(t) = e^{-t} + 2e^{-2t}$  e, neste caso,  $\psi(0.1) = 2.5423$ , ou seja, nas quatro casas decimais em que fixamos, este método tem uma ótima precisão. Observe a Tabela 10 para  $h = 0.1$ :

<b>n</b>	<b>t<sub>n</sub></b>	<b>x<sub>n</sub></b>	<b>EXATA</b>	<b>ERRO R-K 4° grau</b>	<b>ERRO E-M</b>
0	0	3	3	0.000000	0
1	0.1	2.500000	2.542299	0.000006	0.002943
2	0.2	2.090484	2.159371	0.000010	0.008477
3	0.3	1.754260	1.838441	0.000012	0.015173
4	0.4	1.477490	1.568978	0.000013	0.022083
5	0.5	1.249024	1.342290	0.000014	0.028605
6	0.6	1.059872	1.151200	0.000013	0.034385
7	0.7	0.902779	0.989779	0.000013	0.039240
8	0.8	0.771882	0.853122	0.000012	0.043102
9	0.9	0.662438	0.737167	0.000011	0.045986
10	1	0.570608	0.638550	0.000010	0.047949

Tabela 10: Método de Runge-Kutta de quarto grau - Exemplo 2.4, com  $h = 0.1$ .

Na última coluna, colocamos o erro do método de Euler Melhorado e fica nítido o quanto o Runge - Kutta de quarto grau é mais eficiente.

Observemos, abaixo, como o método age quando o passo  $h$  vai para  $h = 0.05$ . Na próxima tabela (Tabela 11) , colocamos seis casas decimais de aproximação, para observamos o erro.

<b>n</b>	<b>t<sub>n</sub></b>	<b>x<sub>n</sub></b>	<b>EXATA</b>	<b>ERRO R-K 4° grau</b>	<b>ERRO E-M</b>
0	0	3.0000000	3.0000000	0.00000000	0
2	0.1	2.5422993	2.5422989	0.00000034	0.00119137
4	0.2	2.1593714	2.1593708	0.00000056	0.00370693
6	0.3	1.8384422	1.8384415	0.00000069	0.00685934
8	0.4	1.5689787	1.5689780	0.00000076	0.01018427
10	0.5	1.3422903	1.3422895	0.00000078	0.01338008
12	0.6	1.1512008	1.1512001	0.00000077	0.01626241
14	0.7	0.9897800	0.9897792	0.00000075	0.01873003
16	0.8	0.8531227	0.8531220	0.00000071	0.02073946
18	0.9	0.7371681	0.7371674	0.00000066	0.02228619
20	1	0.6385506	0.6385500	0.00000060	0.02339102

Tabela 11: Método de Runge-Kutta de quarto grau - Exemplo 2.4 com  $h = 0.05$ .

É claro que aqui temos uma precisão muito boa. Com um passo  $h$  menor, teríamos um erro menor ainda. Observe a Figura 8 com os pontos da Tabela 10 plotados, e compare com os gráficos anteriores. O método de Runge-Kutta de 4° grau tem uma eficácia maior.

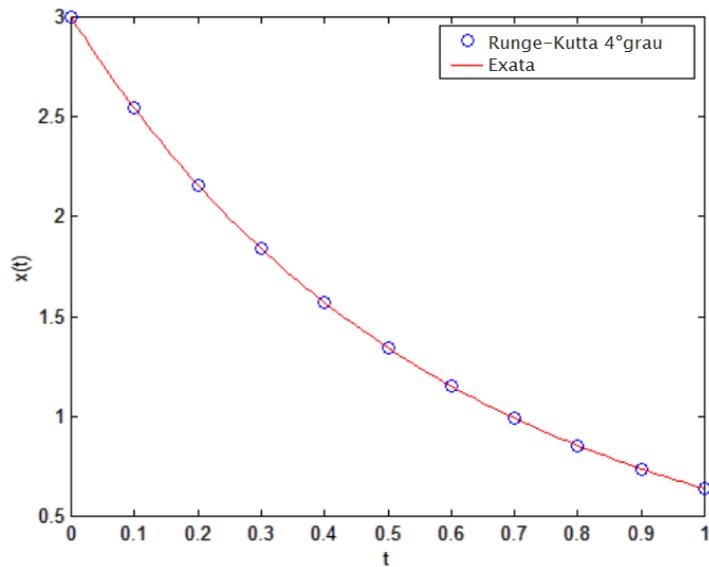


Figura 8: Gráfico dos pontos da Tabela 10 com  $h = 0.1$ .

2.6. ANALISANDO OS MÉTODOS. Até o momento estudamos os métodos numéricos conhecidos como *métodos de um passo só*. Todos eles derivam do método de Euler. Para ilustrar, na tabela abaixo, descrevemos os erros obtidos pelos métodos de: Euler, Euler Melhorado e Runge-Kutta de quarto grau para aproximar a solução do problema de valor inicial do Exemplo 2.4 com  $h = 0.05$ .

n	Euler	Euler Melhorado	R-K 4º grau
0	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2	0.0197375	0.0011914	0.0000003
4	0.0323430	0.0037069	0.0000005
6	0.0397660	0.0068593	0.0000006
8	0.0434796	0.0101843	0.0000007
10	0.0445900	0.0133801	0.0000007
12	0.0439221	0.0162624	0.0000007
14	0.0420853	0.0187300	0.0000007
16	0.0395252	0.0207395	0.0000007
18	0.0365635	0.0222862	0.0000006
20	0.0334281	0.0233910	0.0000006

Tabela 12: Comparação entre os erros dos métodos, com  $h = 0.05$ , utilizando o problema de valor inicial do Exemplo (2.4).

Observando a Tabela 12 vemos que, quanto maior o grau de um método, melhor será a precisão obtida comparando com a solução exata. Euler é um método de rápidas iterações, sem grande esforço computacional. Runge-Kutta de quarto grau é um método que agrega uma quantia maior de cálculos, mas que conta com uma precisão maior do que a do método de Euler. Na Seção 4 discutiremos sobre convergência dos métodos numéricos e estas afirmações feitas acima farão mais sentido do ponto de vista matemático.

### 3. Métodos de passos múltiplos

Na seção anterior, vimos somente métodos de passos únicos. Os métodos que veremos aqui, chamados de passos múltiplos, são bem precisos, porém eles necessitam de conhecimento prévio de alguns pontos da solução. Assim, os métodos de passos múltiplos são apropriados para os casos em que já se conhece alguns pontos do problema, digamos  $(t_1, x_1), (t_2, x_2), \dots, (t_n, x_n)$ , e se deseja estimar o valor de  $(t_{n+1}, x_{n+1})$ . Todos aqueles que precisam de mais de uma informação, ou seja, mais um ponto além da condição inicial, são chamados *métodos de passos múltiplos*.

3.1. MÉTODOS DE ADAMS. Nesta subseção, veremos os dois métodos de Adams: a fórmula de *Adams-Bashforth* e a fórmula de *Adams-Moulton*. Ambas são de passos múltiplos, mas a diferença é que a primeira é uma fórmula explícita e a segunda implícita. O *método de previsão e correção* é a combinação desses dois métodos.

3.1.1. *Método de Adams - Bashforth.* Relembremos que

$$\psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s, \psi(s)) ds, \quad (23)$$

com  $\psi(t)$  sendo a solução do problema de valor inicial

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x(t)) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases}$$

quando  $f$  é uma função contínua.

A ideia é aproximar a derivada  $\psi'$  por um polinômio  $P_k$  de grau  $k$  e usar esse polinômio para calcular a integral em (23). Vejamos um exemplo simples em que gostaríamos de aproximar  $\psi'$  por um polinômio  $P_1$  de grau 1. Para isso será necessário conhecer a priori dois pontos, além da condição inicial, digamos:  $(t_{n-1}, x_{n-1})$  e  $(t_n, x_n)$ . Como  $P_1$  deve ser uma aproximação de  $\psi'$ , precisamos ter:

$$\begin{cases} P_1(t_{n-1}) = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \\ P_1(t_n) = f(t_n, x_n). \end{cases}$$

Para simplificar, trocaremos a notação  $f(t_i, x_i)$  por  $f_i$ . Seja  $P_1(t) = \alpha t + \beta$ . É preciso resolver o sistema abaixo encontrando os valores  $\alpha$  e  $\beta$  que satisfaçam:

$$\begin{cases} \alpha t_{n-1} + \beta = f_{n-1} \text{ (I),} \\ \alpha t_n + \beta = f_n \text{ (II).} \end{cases} \quad (24)$$

De (I) segue que

$$\beta = f_{n-1} - \alpha t_{n-1} \text{ (III).}$$

Substituindo (III) em (II), temos:

$$\begin{aligned} \alpha t_n + (f_{n-1} - \alpha t_{n-1}) &= f_n \\ \alpha(t_n - t_{n-1}) &= f_n - f_{n-1}. \end{aligned}$$

Como  $t_n - t_{n-1} = h$ , segue que:

$$\alpha = \frac{f_n - f_{n-1}}{h}.$$

Agora, substituindo esse  $\alpha$  na equação (III), obtemos

$$\begin{aligned} \beta &= f_{n-1} - \left( \frac{f_n - f_{n-1}}{h} \right) t_{n-1} \\ \beta &= \frac{f_{n-1}(t_n - t_{n-1}) - f_n t_{n-1} + f_{n-1} t_{n-1}}{h} \\ \beta &= \frac{f_{n-1} t_n - f_n t_{n-1}}{h}. \end{aligned}$$

Trocando  $\psi'(t)$  por  $P_1(t)$  em (23), temos:

$$\psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\alpha s + \beta) ds = \frac{\alpha}{2} (t_{n+1}^2 - t_n^2) + \beta(t_{n+1} - t_n).$$

Como este é um método para estimar a solução que ainda não conhecemos, então substituímos  $\psi(t_i)$  por  $x_i$  e assim:

$$\begin{aligned} x_{n+1} - x_n &= \frac{\alpha(t_{n+1}^2 - t_n^2)}{2} + \beta(t_{n+1} - t_n) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{(f_n - f_{n-1})(t_{n+1}^2 - t_n^2)}{2h} + \frac{(f_{n-1} t_n - f_n t_{n-1})(t_{n+1} - t_n)}{h} \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{(f_n - f_{n-1})(t_{n+1} + t_n)}{2} + (f_{n-1} t_n - f_n t_{n-1}) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{(f_n - f_{n-1})(2t_n + h) + 2f_{n-1} t_n - 2f_n t_{n-1}}{2} \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{2f_n t_n + f_n h - 2f_{n-1} t_n - f_{n-1} h + 2f_{n-1} t_n - 2f_n t_{n-1}}{2} \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{3f_n t_n - 3f_n t_{n-1} - f_{n-1} h}{2} \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{3f_n(t_n - t_{n-1}) - f_{n-1} h}{2}, \end{aligned}$$

de onde segue que

$$x_{n+1} = x_n + \frac{3f_n h - f_{n-1} h}{2}. \quad (25)$$

A equação (25) é a fórmula de *Adams-Bashforth* de segundo grau. Ela tem erro de truncamento de ordem  $O(h^3)$  e é explícita; para deduzí-la tomamos um polinômio de segundo grau. Para deduzir *Adams-Bashforth* de graus maiores basta seguir o esquema acima, porém será necessário conhecer mais pontos. Para obter a fórmula de *Adams-Bashforth* de quarto grau, que é a mais precisa e conhecida, é necessário conhecer quatro pontos. Aproximando  $\psi'$  por um polinômio de grau 3,  $P_3(t)$ , e fazendo as devidas simplificações algébricas, obtemos:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 32f_{n-2} - 9f_{n-3}). \quad (26)$$

Para resolvê-la, portanto, é necessário conhecer  $(t_{n-3}, x_{n-3}), (t_{n-2}, x_{n-2}), (t_{n-1}, x_{n-1})$  e  $(t_n, x_n)$ . Para conseguir esses pontos, basta utilizar qualquer método de passo único, visto na seção anterior. Como o *Runge-Kutta* de quarto grau é o mais preciso entre eles, utilizaremos ele no exemplo a seguir.

**Exemplo 3.1.** Resolveremos o problema de valor inicial (8) (Exemplo 2.4), utilizando o método de *Adams-Bashforth* para ver como ele se comporta comparado aos métodos de passo único. O problema de valor inicial

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3 \end{cases}$$

tem como solução exata  $\psi(t) = e^{-t} + 2e^{-2t}$ . Este exemplo foi utilizado no estudo dos métodos vistos até agora. Em todos eles, estamos iterando até  $t = 1$ , fixando  $h = 0.1$ . Por conta disso, iremos estimar o valor de  $x(t)$  para  $t = 1$ , utilizando *Adams-Bashforth*. Para o *Runge-Kutta*, foi necessário 10 iterações até chegar neste ponto. Consideremos então as quatro últimas iterações, ou seja,  $n = 6, 7, 8$  e  $9$ , pois precisamos calcular:

$$x_{10} = x_9 + \frac{h}{24}(55f_9 - 59f_8 + 32f_7 - 9f_6).$$

Da Tabela 10, temos:

Colocando os valores na fórmula, concluímos que  $x_{10} = 0.63860$ . Note que o erro absoluto neste método é 0.00005, já que o valor exato é  $\psi(1) = 0.63855$ . No *Runge-Kutta*, para o mesmo  $h = 0.1$ , o erro absoluto é 0.00001. Portanto, ainda não vale a pena utilizar o método de *Adams-Bashforth*, já que ele não é tão eficaz quanto o *Runge-Kutta*. E por conta dessa eficácia não tão boa, que o *Adams-Moulton* surge para corrigir, *Adams-Bashforth* prevê e *Adams-Moulton* corrige, juntos eles formam o método de previsão e correção.

$n$	$t_n$	$x_n$	$f(t_n, x_n) = f_n$
6	0.6	1.1512	-1.7536
7	0.7	0.9898	-1.4830
8	0.8	0.8531	-1.2569
9	0.9	0.7372	-1.0678

Tabela 13: Valores retirados do método de Runge-Kutta, para  $h = 0.1$ .

3.1.2. *Método de Adams - Moulton.* A fórmula de *Adams-Moulton* é uma variação da fórmula de *Adams-Bashforth*, com a diferença de que essa é do tipo implícita. Para a dedução, utilizamos um método bem parecido. Faremos para o polinômio de grau 1 e, para polinômios de maiores graus, as contas serão análogas. Consideremos

$$P_1(t) = \alpha t + \beta, \quad (27)$$

mas agora, para acharmos  $\alpha$  e  $\beta$  tomemos os pontos  $(t_n, x_n)$  e  $(t_{n+1}, x_{n+1})$ . Assim,

$$\begin{cases} \alpha t_n + \beta = f_n & \text{(I)} \\ \alpha t_{n+1} + \beta = f_{n+1} & \text{(II)}. \end{cases}$$

De (I) segue que

$$\beta = f_n - \alpha t_n \quad \text{(III)}.$$

Substituindo este valor em (II), concluímos que

$$\begin{aligned} \alpha t_{n+1} + \beta &= f_{n+1} \\ \alpha t_{n+1} + f_n - \alpha t_n &= f_{n+1} \\ \alpha(t_{n+1} - t_n) &= f_{n+1} - f_n \\ \alpha &= \frac{f_{n+1} - f_n}{h}. \quad \text{(IV)} \end{aligned}$$

Substituindo (IV) em (III), obtemos:

$$\begin{aligned} \beta &= f_n - \alpha t_n \\ \beta &= f_n - \left( \frac{f_{n+1} - f_n}{h} \right) t_n \\ \beta &= \frac{f_n(t_{n+1} - t_n) - f_{n+1}t_n + f_n t_n}{h} \\ \beta &= \frac{f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n}{h}. \end{aligned}$$

Agora, trocando  $\psi'(t)$  da equação (23) pelo polinômio (27) e calculando a integral, temos:

$$\begin{aligned} \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{\alpha(t_{n+1}^2 - t_n^2)}{2} + \beta(t_{n+1} - t_n) \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{(f_{n+1} - f_n)(t_{n+1} - t_n)(t_{n+1} + t_n)}{2h} + \frac{(f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n)(t_{n+1} - t_n)}{h} \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{(f_{n+1} - f_n)(t_{n+1} + t_n)}{2} + f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{1}{2}(f_{n+1} t_{n+1} + f_{n+1} t_n - f_n t_{n+1} - f_n t_n) + f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{1}{2}(f_{n+1} t_{n+1} - f_{n+1} t_n + f_n t_{n+1} - f_n t_n) \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{1}{2} f_{n+1} (t_{n+1} - t_n) + \frac{1}{2} f_n (t_{n+1} - t_n) \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{1}{2} f_{n+1} h + \frac{1}{2} f_n h. \end{aligned}$$

Ao substituírmos  $\psi(t_i)$  por  $x_i$ , obtemos a fórmula de Adams-Moulton de segundo grau:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n). \quad (28)$$

Como se pode observar, essa fórmula é implícita tendo em ambos os lados da igualdade uma incógnita  $x_{n+1}$ . De forma análoga se obtém o método de quinto grau, que é o mais conhecido e preciso por ter um erro de truncamento de quinta ordem, proporcional a  $h^5$ . Sua fórmula é dada por:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}). \quad (29)$$

**Exemplo 3.2.** Utilizaremos a fórmula (29) para resolver o mesmo problema de valor inicial tratado no Exemplo (3.1), utilizando um passo  $h = 0.1$  e calculando o valor de  $x_n$  até  $t = 1$ .

Para aplicarmos a fórmula, é necessário conhecermos a priori três valores. Sejam eles:  $f_7, f_8$  e  $f_9$ . Para conhecê-los, usaremos o método de Runge-Kutta de quarto grau. Consultando a Tabela 13, temos os valores procurados. Então, colocando-os na fórmula, obtemos:

$$\begin{aligned} x_{10} &= 0.737179 + \frac{0,1}{24}(9f_{10} + 19(-1.067788) - 5(-1.256940) + \\ &\quad + (-1.482999)) \\ x_{10} &= 0.672652 + 0.0375f_{10} \\ x_{10} &= 0.672652 + 0.0375(e^{-1} - 2x_{10}) \\ x_{10} &= 0.686448 - 0.075x_{10} \\ 1.075 \cdot x_{10} &= 0.686448 \\ x_{10} &= 0.638556 \end{aligned}$$

Este método é mais preciso que o Adams-Bashforth. Levando em consideração que a solução exata  $\psi(1) = 0.638550$ , temos que o erro absoluto para Adams-Moulton nesse passo é 0.000006, enquanto o erro obtido pelo método de Adams-Bashforth é 0.000056 e o obtido pelo método de Runge-Kutta é 0.000010. Tanta precisão vem acompanhada de um esforço, já que temos a inconveniência de resolver uma equação a cada passo. É preciso decidir se vale a pena o esforço perante a precisão que se obterá. Diante disso, foi implementado o método de *previsão e correção* que basicamente tentou combinar precisão e menos esforço computacional. As generalizações dos métodos de Adams-Moulton e Adams-Bashforth podem ser consultadas em [6].

**3.2. MÉTODO DE PREVISÃO E CORREÇÃO.** Este método é uma combinação da fórmula de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de quarto grau. Portanto, é necessário conhecer a priori quatro pontos:

$$(t_{n-3}, x_{n-3}), (t_{n-2}, x_{n-2}), (t_{n-1}, x_{n-1}) \text{ e } (t_n, x_n).$$

Com estes pontos conhecidos é possível calcular  $f_{n-3}, f_{n-2}, f_{n-1}$  e  $f_n$ . Utilizando a fórmula de Adams-Bashforth (26), conseguimos estimar o valor de  $x_{n+1}$ . Usando este valor encontrado, calculamos  $f_{n+1}$  e colocamos no método de Adams-Moulton (29), corrigindo o valor de  $x_{n+1}$ . Dessa forma não teremos mais um método implícito. Vejamos tal método sendo utilizado em um exemplo prático, o Exemplo 3.1.

**Exemplo 3.3.** No Exemplo 3.1 calculamos  $x_{10} = 0.6386$  para  $h = 0.1$ , utilizando Adams-Bashforth 26. Assim,  $f_{10} = e^{-1} - 2 * 0.6386 = -0.9093$ . Tomando os valores da Tabela 13 e o valor de  $f_{10}$ , colocamos na fórmula de Adams-Moulton (29) para a correção e obtemos:

$$\begin{aligned} x_{10} &= x_{10} + \frac{0.1}{24}(9f_{10} + 19f_9 - 5f_8 + f_7) \\ x_{10} &= 0.6386 + \frac{0.1}{24}(9(-0.9093) + 19(-1.0678) - 5(-1.2569) - 1.4830) \\ x_{10} &= 0.63855 \end{aligned}$$

Com relação a equação exata, este método tem um erro absoluto de 0.000002, isto é, para este passo  $h = 0.1$ , o método de previsão e correção fica em torno de 20 vezes mais preciso que o método do Adams-Moulton, e ainda com a vantagem de não ser um método implícito. Outra vantagem deste método é a possibilidade de iterar o mesmo  $x_n$  diversas vezes para conseguir uma melhor precisão no ponto  $t$  desejado.

#### 4. Convergência

Uma das propriedades mais básicas de um método numérico para encontrar soluções aproximadas de equações diferenciais ordinárias é a precisão. Toda vez que calculamos soluções aproximadas, precisamos saber se o

método usado é capaz de nos fornecer uma solução mais próxima da exata, caso desejarmos. Vejamos, pois, a definição de convergência.

**Definição 4.1.** (Convergência) Um método numérico de passo único é dito convergente se, para qualquer  $t \in [a, b]$ ,

$$\lim_{h \rightarrow 0} |x_n - \psi(t)| = 0,$$

com  $nh = t - a$ , onde  $x_n$  é a solução obtida pelo método e  $\psi(t)$  é a solução da equação diferencial ordinária.

Intuitivamente podemos dizer que um método numérico de passo único é convergente quando a solução  $x_n$  obtida pelo método se aproxima ponto a ponto da solução exata da equação diferencial ordinária  $\psi(t)$ , quando o tamanho do passo  $h$  tende a zero.

**Exemplo 4.2.** Variando o tamanho do passo  $h$ , vamos estimar a solução  $\psi(t)$  para o problema de valor inicial:

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3, \end{cases}$$

utilizando os métodos de Euler e Euler melhorado.

Construímos, então, a Tabela 14 para podermos visualizar o erro em cada método para o mesmo ponto. Tomaremos sempre  $t = 1$ .

h	n	Euler	Euler Melhorado	Erro E	Erro E-M
0,5	2	0.303265	0.917786	0.335285	0.279236
0,25	4	0.461333	0.767561	0.177217	0.129010
0.2	5	0.498555	0.739293	0.139995	0.100743
0.1	10	0.570608	0.686499	0.067942	0.047949
0.05	20	0.605122	0.661941	0.033428	0.023391

Tabela 14: Ordem de convergência.

Note que, à medida que o passo  $h$  diminui, cada método obtém uma melhor aproximação. Além disso, a cada valor menor de  $h$ , o método de Euler melhorado nos fornece uma melhor aproximação. Isto está relacionado com a ordem de convergência de cada método.

**Definição 4.3.** (Ordem de Convergência) Considere a solução de uma equação diferencial no ponto  $t = t_n$  e a solução aproximada  $x_n$  pelo método neste ponto. Dizemos que a ordem de convergência é  $p$  se existir uma constante  $C$  tal que:

$$|x_n - \psi(t_n)| < Ch^p.$$

A ordem de convergência é uma maneira de quantificar a rapidez com a qual a solução numérica obtida por um método se aproxima da solução exata. Conforme  $h$  tende a zero, o termo  $O(h^p)$ , que na verdade é o erro de truncamento local, tende a zero com a mesma rapidez que  $h^p$ . Por exemplo, o método de Euler tem ordem 2 (veja (10)), o método de Euler melhorado tem ordem 3 (veja (18)), o método de Runge-Kutta de 3º grau tem ordem 4 (veja (21)) e o método de Runge-Kutta de 4º grau tem ordem 5 (veja (22)). Assim, o método de Runge-Kutta de 4º grau aproxima mais rápido a solução numérica da solução exata do que os outros métodos citados. Para mais detalhes, sugerimos ao leitor que consulte a referência [7].

**Exemplo 4.4.** *Considere o seguinte problema de valor inicial:*

$$\begin{cases} x'(t) = 0.3x \\ x(0) = 3 \end{cases} \quad (30)$$

que tem como solução exata  $\psi(t) = 3e^{0.3t}$ , para  $t \geq 0$ . Mostraremos que o método de Euler é convergente utilizando a definição de convergência.

Primeiramente, precisamos deduzir a equação de diferença. Do método de Euler, temos:

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n).$$

Assim, para  $n = 1$ :

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + h(0.3x_0) \\ x_1 &= x_0(1 + 0.3h). \end{aligned}$$

Para  $n = 2$ :

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 + h(0.3x_1) \\ x_2 &= x_1(1 + 0.3h) \\ x_2 &= x_0(1 + 0.3h)^2. \end{aligned}$$

Dessa forma deduzimos a equação de diferença para o problema de valor inicial (30):  $x_n = 3(1 + 0,3h)^n$ . Podemos, então, provar a convergência do método para este problema de valor inicial utilizando a definição de convergência (Definição 4.1), com  $a = 0$  e  $nh = t$  (ou seja,  $n = t/h$ ). Calculemos o limite de  $|x_n|$  quando  $h$  tende a 0:

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} |x_n| &= \lim_{h \rightarrow 0} |3(1 + 0,3h)^n| \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} |3(1 + 0,3h)^{\frac{t}{h}}| \\ &= 3 \left| \lim_{h \rightarrow 0} (1 + 0,3h)^{\frac{t}{h}} \right| \\ &= 3e^{0.3t}. \end{aligned}$$

Como a solução do problema (30) é dada também por  $\psi(t) = 3e^{0.3t}$ , obtemos a convergência.

**Observação 4.5.** *A definição de convergência para métodos de passos múltiplos é similar a utilizada para métodos de passo único (Definição 4.1).*

Observe que, no Exemplo (30), para usar a definição de convergência foi preciso conhecer a solução exata do problema de valor inicial e também calcular sua equação de diferença. Isso não é sempre possível. Entretanto, estudando a estabilidade e a consistência de métodos numéricos, conceitos estes não explorados neste artigo, também é possível investigar a convergência dos mesmos. Indicamos as referências [11] e [5] para este estudo.

## 5. Estudo da decomposição de matéria orgânica antropogênica em um rio

Os corpos hídricos são o destino final dos esgotos sanitários e industriais em quase todo o mundo. Além de ser um canal que leva os resíduos para longe, os rios, riachos ou mares contemplam de uma característica natural: capacidade de autodepuração. Isto é, quando se é jogado lixo orgânico em um riacho, uma demanda bioquímica de oxigênio é exercida, isto quer dizer que a decomposição bacteriana do lixo utiliza oxigênio. Esse oxigênio que está dissolvido na água é reabastecido por difusão através da interface ar-água, processo denominado re-aeração. Se existe um ponto de esgoto in natura jogado em um rio com fluxo uniforme estacionário sendo considerado, um padrão de oxigênio dissolvido é observado. Logo abaixo do canal do emissário de resíduos a quantidade de oxigênio dissolvido cai por conta da demanda de bioquímica. Como a decomposição do lixo prossegue, a bioquímica é diminuída pela falta de oxigênio e a re-aeração atmosférica reabastece a quantidade de oxigênio dissolvido. Assim, com esse processo acontecendo, o oxigênio dissolvido tende a ir diminuindo rio abaixo, até chegar em um valor crítico, mínimo e, em seguida, volta gradualmente às condições ambientais ou não. O processo pode ser modelado e sua forma é de uma equação ordinária.

Basicamente, esta ferramenta fornece a visualização do comportamento do corpo d'água em relação à quantidade de oxigênio dissolvido ao longo de seu curso ou do tempo após a recepção do esgoto. Para essa visualização utiliza-se como referência um limite mínimo de oxigênio dissolvido, para ser feita a análise e poder determinar qual o nível de tratamento é necessário ao esgoto antes deste ser lançado. Caso nenhum atenda as condições legais locais, precisa-se encontrar outro corpo receptor.

A forma inicial deste modelo, conhecido por Streeter-Phelps, foi proposta em 1925 por Harold Warner Streeter e Earle Bernard Phelps a partir de um estudo do processo de oxidação e aeração no Rio Ohio nos Estados Unidos com base em dados obtidos de maio de 1914 a abril de 1915. Outras versões

mais complexas já foram desenvolvidas por conta do avanço tecnológico e da possibilidade de realizar contas em computadores, envolvendo variáveis como fotossíntese, respiração e demanda bentônica de oxigênio.

Este é um problema complexo, repleto de variáveis e compostos químicos. Para um maior entendimento, sugerimos a leitura do trabalho de Streeter-Phelps [10].

De acordo com o estudo apresentado em [10], a taxa de mudança no deficit de oxigênio é regida por duas reações independentes. Em primeiro lugar, o deficit aumenta a uma velocidade que pode ser considerada proporcional à exigência de oxigênio da matéria orgânica. Em segundo lugar, diminui o re-arejamento a uma velocidade diretamente proporcional. As duas doses podem ser expressas por:

$$\frac{dD_1}{dt} = K_1L \quad (31)$$

$$\frac{dD_2}{dt} = -K_2D \quad (32)$$

com

$$\frac{-dL}{dt} = K_1L,$$

onde

$$L = L_0e^{-K_1t},$$

sendo (31) a taxa de desoxigenação em termos do deficit de saturação de oxigênio e (32) a taxa de re-aeração, também em termos da diminuição da saturação de oxigênio, representado pela letra  $D$  em partes por milhões. Já  $L$  é a variável da demanda de oxigênio que a matéria orgânica necessita. O tempo  $t$  nessa fórmula é considerado em dias.  $K_1$  e  $K_2$  são constantes que definem a taxa de desoxigenação e re-aeração, respectivamente.

Agora, a equação que modela a concentração  $D$  de oxigênio dissolvido é:

$$\frac{dD}{dt} = \left( \frac{dD_1}{dt} \right) + \left( \frac{dD_2}{dt} \right), \quad (33)$$

portanto,

$$\frac{dD}{dt} = K_1L - K_2D. \quad (34)$$

A equação (34) é linear e tem solução exata, a saber:

$$D(t) = \frac{K_1}{K_2}(L_0e^{-K_1t}) + Ce^{-K_2t},$$

sendo  $D_0$  a taxa inicial de saturação de oxigênio presente na água, em partes por milhões e  $L_0$  a demanda inicial de oxigênio requisitado pela matéria orgânica, levando em consideração  $t = 0$ .  $C$  é a constante de integração, que dependerá da condição inicial dada. Para podermos conhecer  $C$ , vamos considerar os seguintes valores, retirados de Silva, 2004 [8] :

- $K_1 = 0.4$  por dia;
- $K_2 = 0.2$  por dia;
- $D_0 = 7.6$  mg/L;
- $L_0 = 300$  mg/L.

De (34), obtemos o problema de valor inicial:

$$\begin{cases} \frac{dD}{dt} = 120e^{-0.4t} - 0,2D \\ D(0) = 7.6. \end{cases}$$

Como este é um problema com condição inicial, então  $C = 607.6$  e a solução exata sob essas condições é:

$$D(t) = -600e^{-0.4t} + 607.6e^{-0.2t}.$$

5.1. UTILIZANDO OS MÉTODOS NUMÉRICOS. Utilizando os métodos estudados nas seções anteriores, vamos resolver o problema proposto.

Utilizaremos para cada método  $h = 0.1$  e calcularemos a quantidade de oxigênio dissolvido na água para o 5<sup>o</sup> dia.

5.2. MÉTODO DE EULER. Para aplicarmos o método de Euler, utilizamos a fórmula:

$$D_{n+1} = D_n + hf(t_n, D_n).$$

Obtemos, então, os valores obtidos na Tabela 15:

n	t <sub>n</sub>	D <sub>n</sub>	f(t <sub>n</sub> , D <sub>n</sub> )	EXATA	Erro Absoluto
0	0	7.600000	118.480000	7.600000	0.000000
10	1	97.879806	60.862444	95.268778	2.611028
20	2	141.423202	25.634835	137.689082	3.734121
30	3	156.743063	4.794693	152.741423	4.001640
40	4	155.680984	-6.908615	151.874368	3.806616
50	5	145.710563	-12.901879	142.322379	3.388184

Tabela 15: Método de Euler.

5.3. MÉTODO DE EULER MELHORADO. Para aplicarmos o método de Euler melhorado, utilizamos as fórmulas:

$$D'_{n+1} = D_n + hf(t_n, D_n), \tag{35}$$

$$D_{n+1} = D_n + h \left[ \frac{f(t_n, D_n) + f(t_{n+1}, D'_{n+1})}{2} \right]. \tag{36}$$

Utilizando (35) e (36), construímos a Tabela 16:

<b>n</b>	<b>t<sub>n</sub></b>	<b>D<sub>n</sub></b>	<b>f(t<sub>n</sub>, D<sub>n</sub>)</b>	<b>EXATA</b>	<b>Erro Absoluto</b>
0	0	7.600000	118.480000	7.600000	0.000000
10	1	95.136080	61.411190	95.268778	0.132698
20	2	137.264670	26.466542	137.689082	0.424411
30	3	151.990313	5.745243	152.741423	0.751109
40	4	150.825993	-5.937616	151.874368	1.048375
50	5	141.035016	-11.966769	142.322379	1.287363

Tabela 16: Método de Euler melhorado.

5.4. MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE QUARTO GRAU. Para aplicarmos o método de Runge-Kutta de quarto grau, utilizamos a fórmula:

$$D_{n+1} = D_n + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4], \tag{37}$$

com

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, D_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, D_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, D_n + \frac{h}{2}k_2) \\ k_4 = f(t_n + h, D_n + hk_3) \end{cases}$$

Utilizando (37), construímos a Tabela 17:

<b>n</b>	<b>t<sub>n</sub></b>	<b>D<sub>n</sub></b>	<b>f(t<sub>n</sub>, D<sub>n</sub>)</b>	<b>EXATA</b>	<b>Erro Absoluto</b>
0	0	7.600000	118.480000	7.600000	0.0000000000
10	1	95.268778	61.384650	95.268778	0.0000003104
20	2	137.689081	26.381659	137.689082	0.0000004422
30	3	152.741422	5.595021	152.741423	0.0000004717
40	4	151.874367	-6.147291	151.874368	0.0000004463
50	5	142.322378	-12.224242	142.322379	0.0000003947

Tabela 17: Método de Runge-Kutta de quarto grau.

Informamos que a coluna referente ao erro absoluto para a Tabela 17 está com uma aproximação de dez casas decimais, para podermos visualizar os pequenos erros deste método.

5.5. MÉTODO DE PREVISÃO E CORREÇÃO. Vimos que o método da previsão e correção é um método de passos múltiplos explícito, isto é, precisamos conhecer alguns pontos iniciais para darmos início às iterações. Ele é composto por duas fórmulas famosas: Adams-Bashforth e Adams-Moulton, ambas de

quarto grau, sendo a primeira explícita e a segunda implícita.

$$\text{Adams-Bashforth} - D_{n+1} = D_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 32f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

$$\text{Adams-Moulton} - D_{n+1} = D_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}).$$

Para começarmos as iterações, consideremos quatro pontos conhecidos por já terem sido estimados com o método de Runge-Kutta de quarto grau:

n	t <sub>n</sub>	D <sub>n</sub>	f(t <sub>n</sub> , D <sub>n</sub> )
0	0	7.6	118.48
1	0.1	19.09505037	111.4757226
2	0.2	29.90585532	104.7927905
3	0.3	40.06386846	98.41767871

Tabela 18: Quatro primeiras iterações utilizando o método de Runge-Kutta de quarto grau.

Vamos usar a fórmula de Adams-Bashforth para calcular o valor de  $D$  até o passo 50, que é quando o tempo atinge 5 dias, lembrando que  $h = 0.1$ . Depois corrigiremos os valores encontrados, usando a fórmula de Adams-Moulton. Assim, temos a seguinte tabela:

n	t <sub>n</sub>	D <sub>n</sub>	f(t <sub>n</sub> , D <sub>n</sub> )	EXATA	Erro Absoluto
0	0	7.600000	118.480000	7.600000	0.000000
10	1	95.669573	61.304491	95.268778	4.007951
20	2	139.307328	26.058010	137.689082	1.618246
30	3	155.689708	5.005364	152.741423	2.948285
40	4	155.900374	-6.952493	151.874368	4.026006
50	5	147.037320	-13.167230	142.322379	4.714941

Tabela 19: Método de previsão e correção de quarto grau.

5.6. CONCLUSÕES. Para o método de Euler, com  $h = 0.1$ , tivemos um grau de precisão bom, pelo menos até o tempo de 5 dias. A título de exemplificação, colocaremos apenas este gráfico, já que, nos outros, quase não se nota diferença entre a solução real e a aproximada.

Vale a pena tentar interpretar os resultados obtidos com a solução desse problema. A demanda bioquímica de oxigênio para um rio é de essencial importância para a vida dele. Existe um limite permitido, mínimo e máximo,

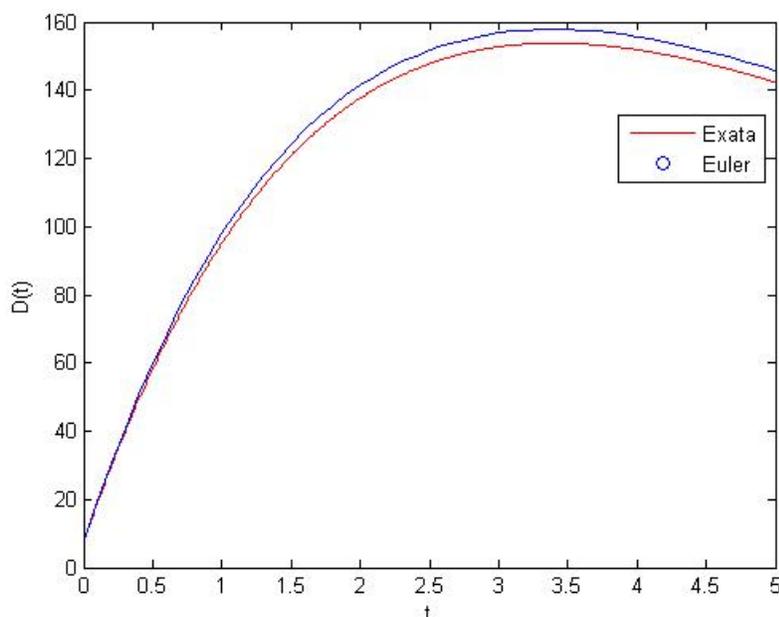


Figura 9: Gráfico do problema de demanda bioquímica de oxigênio, usando Euler com  $h = 0.1$ .

dessa demanda. Antes de colocar uma saída de resíduos em um rio, este estudo é vital. Enfatizando que, para o nosso caso, o problema foi simplificado o suficiente para ser possível encontrar a solução exata. Utilizando o método de Euler e um passo  $h = 1$  fizemos os cálculos para  $t$  igual a 50 dias. Vale ressaltar que uma fonte de resíduos fica em um rio durante anos, justificando a importância do estudo da demanda bioquímica para que o rio consiga se recuperar e continue com vida.

Note que a demanda bioquímica de oxigênio começa a aumentar muito haja vista que existe matéria orgânica sendo acrescentada na água necessitando de decomposição. Porém, essa demanda atinge um limite máximo, pois cada corpo d'água reage de uma forma diferente que depende de temperatura, tipo e quantidade de resíduos, fator re-aeração, entre outros. Depois de atingido esse limite, a demanda bioquímica começa a diminuir e é com essa diminuição que se deve tomar cuidado. Quando a demanda ficar igual zero, significa que o corpo d'água não tem mais microrganismos vivos capazes de praticar decomposição, isto é, o rio está morto. É claro que neste caso estamos levando em conta apenas os fatores de desoxigenação, causado pelo maior uso de oxigênio para decompor os resíduos e a re-aeração, processo de difusão que ocorre entre o ar e a água. É preciso buscar um equilíbrio para que o rio não chegue a níveis críticos.

Exemplificando o parágrafo a cima, consideremos que a constante  $K_1$  referente a desoxigenação diminua em quatro vezes, ou seja,  $K_1 = 0.1$  e a cons-

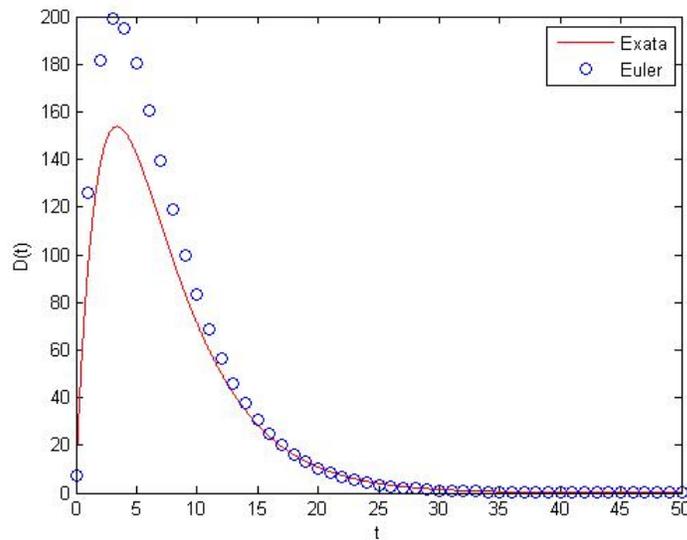


Figura 10: Gráfico do problema de demanda bioquímica de oxigênio, usando Euler com  $h = 1$ .

tante responsável pelo fator re-aeração quadruplicado,  $K_2 = 0.8$ . Vejamos o que acontece com o modelo em 50 dias, no Gráfico 11.

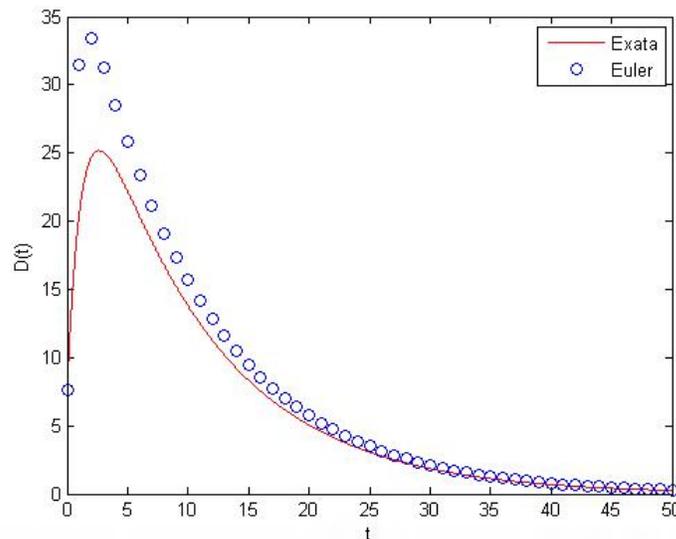


Figura 11: Gráfico depois de alteradas as constantes  $K_1$  e  $K_2$  do problema de demanda bioquímica de oxigênio, usando Euler com  $h = 1$ .

Veja que, no Gráfico 11, a demanda bioquímica de oxigênio teve sua queda mais suave, comparada ao Gráfico 10. Neste caso, a vida do riacho foi prolongada em alguns dias.

5.7. CONSIDERAÇÕES FINAIS. A grande quantidade de cálculos e a complexidade de problemas de modelagem matemática não podem ser facilmente resolvidos sem a ajuda de processos numéricos para a solução de equações diferenciais ordinárias, já que na maioria das vezes a solução exata não é simples de ser encontrada. Depois do aparecimento do primeiro computador, é que estes métodos começaram a ser usados de maneira sistemática.

A escolha do método numérico para resolver um problema matemático depende de vários fatores, entre eles:

- qual precisão se espera;
- quão longe se deseja conhecer a solução;
- esforço computacional necessário.

A obtenção de uma solução numérica para um problema real por meio da aplicação de métodos numéricos nem sempre fornece valores que se encaixam dentro de limites razoáveis. Os erros irão acontecer, independente do método usado ser adequado e dos cálculos estarem corretos. Temos aqueles erros chamados inerentes porque, em geral, um modelo matemático é uma adaptação da realidade, em que é necessário impor algumas restrições. Temos os erros de truncamento provenientes do método numérico, e ainda, o erro computacional, já que os computadores atuais utilizam apenas um número finito de dígitos para representar os números reais.

O tamanho do passo  $h$  deve ser cuidadosamente escolhido. Se  $t$  for um número grande, o esforço computacional para chegar até ele será grande e os erros acumulados nesse processo, também. O exemplo que estudamos nesta seção foi forçadamente simplificado para que conseguíssemos analiticamente uma solução exata e pudéssemos calcular os erros em cada método. Observe a Tabela 20 com a coluna dos erros cometidos em cada método. Vale recordar que o erro absoluto é o módulo da diferença entre a solução exata e a solução encontrada pelo método numérico.

<b>n</b>	<b>t<sub>n</sub></b>	<b>Euler</b>	<b>Euler melhorado</b>	<b>Runge-Kutta</b>	<b>Previsão e Correção</b>
0	0	0	0	0	0
10	1	2.611028	0.132698	0.0000003104	0.400795
20	2	3.734121	0.424411	0.0000004422	1.618246
30	3	4.001640	0.751109	0.0000004717	2.948285
40	4	3.806616	1.048375	0.0000004463	4.026006
50	5	3.388184	1.287363	0.0000003947	4.714941

Tabela 20: Erros obtidos em cada método.

É visível o quanto o método de quarto grau de Runge-Kutta é eficaz. Seu erro não se acumula conforme aumenta as iterações, diferente dos outros métodos explorados. Para um problema com poucas iterações talvez não valha a pena perder tanto tempo com o Runge-Kutta, que precisa de cinco cálculos de valores em cada iteração. O método de previsão e correção precisa de apenas dois, sendo um cálculo referente ao método de Adams-Bashforth e o outro de Adams-Moulton. Os métodos de passos múltiplos acabam ganhando força pelo simples fato de que neles é mais fácil estimar o erro em cada passo e assim ajustar facilmente a ordem da fórmula usada e o tamanho do passo  $h$ .

A escolha do método para resolver um problema de modelagem envolve um equilíbrio nas questões de precisão e o esforço computacional, isto é, o tempo gasto para executar cada iteração. Um método implícito, como o Adams-Moulton, exige um grande esforço em cada passo, em contrapartida é um método estável e preciso, que permite o uso de um tamanho  $h$  maior e, conseqüentemente, um número menor de iterações.

### Referências

1. W. E. Boyce; R. C. DiPrima, *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, 8ª edição, LTC Editora, 2002. 25
2. D. F. Griffiths; D. J. Higham, *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations: Initial Value Problems*, Springer, 2010. 22
3. E. L. Lima, *Curso de Análise - Volume 1*, Projeto Euclides, IMPA, 7ª edição, 1976. 5
4. G. Maioli, *Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Ordinárias*, Dissertação (Mestrado Profissional), Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, PGMAT, 2015. 3
5. R. D. Richtmyer; K. W. Morton, *Difference Methods for Initial Value Problems*, Second Edition, John Wiley & Sons, Abingdon, England, 1967. 36
6. B. Seidu, *A Matrix System for Computing the Coefficients of the Adams Bashforth-Moulton Predictor-Corrector formulae*, International Journal of Computational and Applied Mathematics, Volume 6, Number 3, p. 215-220, 2011. 33
7. D. Seperandio; J. T. Mendes; L. H. M. Silva, *Cálculo Numérico - Características matemáticas e computacionais dos métodos numéricos*, Prentice Hall, São Paulo, 2003. 35
8. R. C. Silva, *Avaliação das constantes cinéticas envolvidas na modelagem das concentrações de oxigênio dissolvido em rios com aplicação da Programação Não-Linear*, Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Tecnologia em Saneamento Ambiental), Instituto Federal do Espírito Santo, 2004. 37
9. J. Sotomayor, *Lições de equações diferenciais Ordinárias*, Projeto Euclides, Volume 11, IMPA, 1979. 4
10. H. W. Streeter; E. B. Phelps, *A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River*, U.S. Department of Health, Education & Welfare, Washington, D.C., 1925. 37
11. J. C. Strikwerda, *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equation*, Second Edition, Siam, 1989. 36



## Elementos do Cálculo Fracionário

Sandra Maria Tieppo –UFPR e Sandro Marcos Guzzo–UNIOESTE

**RESUMO:** O cálculo fracionário é o ramo da matemática que estuda os conceitos de derivada e integral de ordem arbitrária. Estes conceitos são úteis para a modelagem matemática de fenômenos que envolvem equações diferenciais de ordem arbitrária. Neste trabalho daremos uma definição de derivada e de integral de ordem arbitrária e suas principais propriedades. Aplicaremos também a teoria do cálculo fracionário em equações diferenciais ordinárias (EDOs) de ordem arbitrária.

**Palavras-chave:** Cálculo fracionário. Derivada fracionária. EDOs de ordem fracionária.

### Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>46</b>
<b>2</b>	<b>Função Gama</b>	<b>48</b>
<b>3</b>	<b>Função Beta</b>	<b>49</b>
<b>4</b>	<b>Funções de Mittag-Leffler</b>	<b>52</b>
<b>5</b>	<b>Transformada de Laplace</b>	<b>54</b>
<b>6</b>	<b>Integral fracionária (de Riemann-Liouville)</b>	<b>63</b>

<b>7</b>	<b>Derivada fracionária (de Caputo)</b>	<b>68</b>
<b>8</b>	<b>EDOs de ordem fracionária</b>	<b>74</b>
<b>9</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>78</b>

## 1. Introdução

Uma das ferramentas mais importantes na compreensão de fenômenos naturais é a Modelagem Matemática. A ideia é identificar características fundamentais do sistema a ser estudado, de maneira a se obter um conjunto de regras matemáticas simples o suficiente para que se possa extrair informações úteis delas, mas que ainda descrevam os fenômenos mais importantes associados ao sistema em questão.

Estas regras assumem as mais diferentes formas, dependendo da natureza do problema e da conveniência na obtenção de soluções. Em diversas situações este conjunto de regras conduz a uma equação diferencial ordinária (EDO). Em alguns casos entretanto, a equação diferencial obtida não possui ordem inteira, conduzindo ao caso de uma equação diferencial de ordem fracionária. Mesmo quando a equação diferencial possui ordem inteira a modelagem por equações de ordem fracionária pode descrever uma modelagem mais precisa do fenômeno de interesse.

O cálculo fracionário é o ramo da matemática que estuda a extensão dos conceitos de derivada e de integral para uma ordem arbitrária (não necessariamente fracionária). Esta definição foge do conceito tradicional de derivada e integral de um curso de cálculo diferencial e integral.

O conceito de cálculo fracionário (derivadas e integrais de ordem arbitrária) não é novo. Em 1695 L'Hospital escreveu uma carta para Leibniz,

perguntando: “Qual o significado de  $\frac{d^n y}{dx^n}$  se  $n = \frac{1}{2}$ ?”. Leibniz respondeu: “Um aparente paradoxo, do qual algum dia, consequências úteis poderão ser feitas”. L’Hospital é conhecido como o pai do cálculo fracionário.

Nas últimas décadas vários autores deram seus significados particulares para a expressão  $\frac{d^n y}{dx^n}$  com  $n$  não necessariamente inteiro positivo. Por este motivo existem várias noções de derivada de ordem não inteira, também chamada derivada de ordem fracionária, mesmo que a ordem não seja necessariamente um número racional. Naturalmente algumas definições se mostraram mais úteis do que outras em virtude de suas melhores propriedades.

Embora existam muitas aplicações para o cálculo fracionário, neste texto estamos interessados apenas em um estudo teórico preliminar. Também nos restringiremos às definições de integral de ordem fracionária de Riemann-Liouville e de derivada de ordem fracionária de Caputo. Para o desenvolvimento da teoria do cálculo fracionário será importante o conhecimento de alguns outros conceitos como a função gama, a função beta e as funções de Mittag-Leffler.

O objetivo deste texto é introduzir ao leitor aspectos do cálculo fracionário, e para isto, está organizado da seguinte maneira. Primeiro estudaremos conceitos importantes para um melhor entendimento das derivadas e integrais de ordem arbitrária. Na sequência apresentamos as noções de integral de ordem fracionária de Riemann-Liouville e derivada fracionária de Caputo. Apresentaremos também algumas propriedades das integrais e derivadas de ordem fracionária. Por fim apresentamos duas equações diferenciais de ordem arbitrária e suas soluções por meio da teoria apresentada.

## 2. Função Gama

**Definição 2.1.** A função gama é a função que a cada real positivo  $x > 0$  associa o número real representado por  $\Gamma(x)$  determinado pela integral

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{(x-1)} e^{-t} dt.$$

Notemos que a função gama é uma integral imprópria. É preciso portanto garantir a convergência desta integral. Pode ser provado que a integral converge qualquer que seja  $x \in (0, \infty)$ . Mais ainda, a integral converge se  $x \in \mathbb{C}$  com  $Re(x) > 0$ . Neste texto entretanto não temos o interesse na definição desta função a valores complexos.

Dentre as importantes propriedades da função gama podemos citar que para qualquer  $x > 0$ ,

$$\Gamma(x + 1) = x\Gamma(x), \quad (1)$$

e que  $\Gamma(1) = 1 = 0!$ . Estas duas propriedades fazem a função gama ser chamada de fatorial generalizado. De outra forma, a função gama é definida para todo  $x \in (0, \infty)$ , mas quando restrita ao conjunto dos naturais, se resume ao fatorial.

De fato, para qualquer  $n \in \mathbb{N}$ ,

$$\begin{aligned} \Gamma(n + 1) &= n\Gamma(n) \\ &= n(n - 1)\Gamma(n - 2) \\ &= n(n - 1)(n - 2)\Gamma(n - 3) \\ &\quad \vdots \\ &= n(n - 1)(n - 2) \cdots \Gamma(1) \\ &= n(n - 1)(n - 2) \cdots 1 = n!. \end{aligned}$$

Para as demonstrações das afirmações dadas acima, outras informa-

ções e propriedades sobre a função gama ou a sua definição a valores complexos, sugerimos Oliveira (2012).

### 3. Função Beta

A função Beta é definida em geral a dois parâmetros complexos  $z$  e  $w$ , com  $Re(z) > 0$  e  $Re(w) > 0$ . Entretanto, neste texto não estamos interessados no trato com números complexos e portanto faremos a definição da função beta a dois parâmetros reais.

**Definição 3.1.** A função beta é a função que a cada par de números reais  $u$  e  $v$  positivos faz corresponder o número  $B(u, v)$  dado por

$$B(u, v) = \int_0^{\infty} t^{u-1} (1+t)^{-u-v} dt.$$

Pode-se provar que a integral imprópria da definição anterior converge para quaisquer que sejam  $u, v \in (0, \infty) \subset \mathbb{R}$ . A seguir veremos alguns resultados importantes sobre esta função. Em particular estamos interessados em uma propriedade que relaciona a função Beta com a função Gama.

**Proposição 3.2.** *Se  $u$  e  $v$  são dois números reais positivos, então*

$$\int_0^{\infty} t^{u-1} (1+t)^{-u-v} dt = \int_0^1 s^{u-1} (1-s)^{v-1} ds.$$

*Demonstração.* Fazendo a mudança de variáveis  $s = \frac{t}{t+1}$ , temos que  $\frac{ds}{dt} = \frac{1}{(t+1)^2}$ . Também quando  $t \rightarrow \infty$  temos  $s \rightarrow 1$  e quando  $t = 0$  temos  $s = 0$ . Segue que

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} t^{u-1} (1+t)^{-u-v} dt &= \int_0^{\infty} \left( \frac{t}{1+t} \right)^{u-1} (1+t)^{-u-v} (1+t)^{u-1} dt \\ &= \int_0^{\infty} \left( \frac{t}{1+t} \right)^{u-1} (1+t)^{-v-1} dt \\ &= \int_0^{\infty} \left( \frac{t}{1+t} \right)^{u-1} (1+t)^{-v+1} \frac{1}{(t+1)^2} dt \end{aligned}$$

$$= \int_0^{\infty} s^{u-1} \left( \frac{1}{1-s} \right)^{-v+1} \frac{ds}{dt} dt = \int_0^1 s^{u-1} (1-s)^{v-1} ds.$$

□

A última proposição nos dá uma forma alternativa para a função beta. Deste ponto em diante, para quaisquer  $u$  e  $v$  positivos,

$$B(u, v) = \int_0^1 t^{u-1} (1-t)^{v-1} dt = \int_0^{\infty} t^{u-1} (1+t)^{-u-v} dt, \quad (2)$$

sendo que escolheremos a integral a ser utilizada, dependendo do interesse. Como por exemplo fica evidente que a integral em  $[0, 1]$ , com a mudança de variável  $t = (1-s)$ , nos conduz à igualdade  $B(u, v) = B(v, u)$  para quaisquer reais positivos  $u$  e  $v$ . Esta propriedade não ficaria tão evidente se utilizada a integral em  $[0, \infty)$ . Também para provarmos a relação entre a função Beta e a função Gama usaremos a integral em  $[0, 1]$ . A próxima proposição trata desta relação, e para ela precisamos de um lema auxiliar.

**Lema 3.3.** *Se  $u$  e  $v$  são números reais positivos, então*

$$B(u, v) = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^{2u-1} \theta \operatorname{sen}^{2v-1} \theta d\theta.$$

*Demonstração.* De fato, da definição

$$B(u, v) = \int_0^1 t^{u-1} (1-t)^{v-1} dt,$$

fazendo a mudança de variáveis  $t = \cos^2 \theta$ , temos  $\frac{dt}{d\theta} = -2 \cos \theta \operatorname{sen} \theta$ , e então

$$\begin{aligned} B(u, v) &= \int_0^1 t^{u-1} (1-t)^{v-1} dt \\ &= - \int_{\frac{\pi}{2}}^0 (\cos \theta)^{2u-2} (1 - \cos^2 \theta)^{v-1} 2 \cos \theta \operatorname{sen} \theta d\theta \\ &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2u-2} (\operatorname{sen} \theta)^{2v-2} 2 \cos \theta \operatorname{sen} \theta d\theta \\ &= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2u-1} (\operatorname{sen} \theta)^{2v-1} d\theta. \end{aligned}$$

□

**Proposição 3.4.** *Se  $u$  e  $v$  são dois números reais positivos, então*

$$B(u, v) = \frac{\Gamma(u)\Gamma(v)}{\Gamma(u+v)}.$$

*Demonstração.* Da definição da função gama, temos que

$$\begin{aligned}\Gamma(u)\Gamma(v) &= \int_0^\infty t^{(u-1)}e^{-t}dt \int_0^\infty s^{(v-1)}e^{-s}ds \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-t-s}t^{(u-1)}s^{(v-1)}dtds.\end{aligned}$$

Fazemos a mudança das variáveis  $t$  e  $s$  para as variáveis  $\rho$  e  $\theta$  pelas expressões

$$t = \rho \cos^2 \theta \quad \text{e} \quad s = \rho \sin^2 \theta,$$

e temos que quando  $t \in (0, \infty)$  e  $s \in (0, \infty)$  então  $\rho \in (0, \infty)$  e  $\theta \in (0, \frac{\pi}{2})$  e além disso,

$$\left| \frac{\partial(t, s)}{\partial(\rho, \theta)} \right| = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial t}{\partial \rho} & \frac{\partial t}{\partial \theta} \\ \frac{\partial s}{\partial \rho} & \frac{\partial s}{\partial \theta} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} \cos^2 \theta & -2\rho \cos \theta \sin \theta \\ \sin^2 \theta & 2\rho \sin \theta \cos \theta \end{array} \right| = 2\rho \sin \theta \cos \theta,$$

donde

$$\left| \frac{\partial(\rho, \theta)}{\partial(t, s)} \right| = \frac{1}{2\rho \sin \theta \cos \theta}.$$

Desta forma,

$$\begin{aligned}\Gamma(u)\Gamma(v) &= \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-t-s}t^{(u-1)}s^{(v-1)}dtds \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\rho \cos^2 \theta - \rho \sin^2 \theta} \rho^{u-1} (\cos \theta)^{2u-2} \rho^{v-1} (\sin \theta)^{2v-2} dtds \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty 2e^{-\rho} \rho^{u+v-1} (\cos \theta)^{2u-1} (\sin \theta)^{2v-1} \frac{1}{2\rho \sin \theta \cos \theta} dtds \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty 2e^{-\rho} \rho^{u+v-1} (\cos \theta)^{2u-1} (\sin \theta)^{2v-1} \left| \frac{\partial(\rho, \theta)}{\partial(t, s)} \right| dtds \\ &= \int_0^\infty \int_0^{\frac{\pi}{2}} 2e^{-\rho} \rho^{u+v-1} (\cos \theta)^{2u-1} (\sin \theta)^{2v-1} d\theta d\rho \\ &= \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{u+v-1} 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2u-1} (\sin \theta)^{2v-1} d\theta d\rho \\ &= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2u-1} (\sin \theta)^{2v-1} d\theta \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{u+v-1} d\rho.\end{aligned}$$

Para a primeira integral do último membro levamos em conta o lema anterior. Já a segunda integral é exatamente  $\Gamma(u + v)$ . Segue que

$$\Gamma(u)\Gamma(v) = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2u-1} (\sin \theta)^{2v-1} d\theta \int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{u+v-1} d\rho = B(u, v)\Gamma(u + v),$$

e disto temos a igualdade desejada.  $\square$

O leitor interessado na definição da função beta a parâmetros complexos ou outras propriedades sobre a função Beta, pode consultar Oliveira (2012) ou Kilbas et al. (2006).

#### 4. Funções de Mittag-Leffler

As funções de Mittag-Leffler foram propostas inicialmente pelo próprio Magnus Gösta Mittag-Leffler (1903) tendo introduzido a sua função  $E_\alpha(x)$  a um parâmetro  $\alpha > 0$ . Humbert e Agarwal (1953) consideraram uma generalização da função de Mittag-Leffler propondo a função  $E_{\alpha,\beta}(x)$  com um segundo parâmetro  $\beta > 0$  que coincide com a função  $E_\alpha(x)$  quando  $\beta = 1$ . Atualmente são conhecidas muitas generalizações da original função de Mittag-Leffler todas ainda conhecidas como funções de Mittag-Leffler.

Vamos agora apresentar as funções de Mittag-Leffler a um e a dois parâmetros e algumas de suas propriedades. Neste texto, estamos interessados somente nestas definições envolvendo a variável  $x$  e os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  reais.

**Definição 4.1.** A função de Mittag-Leffler a um parâmetro real  $\alpha > 0$  é a função que a cada  $x \in \mathbb{R}$ , associa o número real  $E_\alpha(x)$  dado por

$$E_\alpha(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\alpha k + 1)}.$$

É importante observamos que a série que define esta função é (absolutamente) convergente qualquer que seja  $x \in \mathbb{R}$ . Além disso, note que se  $\alpha = 1$  temos que

$$E_1(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = e^x,$$

e por este motivo a função de Mittag-Leffler a um parâmetro é conhecida como função exponencial generalizada. Também podemos ver que,

$$E_2(-ax^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-ax^2)^k}{\Gamma(2k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(\sqrt{ax})^{2k}}{(2k)!} = \cos(\sqrt{ax}), \quad (3)$$

e que

$$E_2(ax^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(ax^2)^k}{\Gamma(2k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{ax})^{2k}}{(2k)!} = \cosh(\sqrt{ax}), \quad (4)$$

para qualquer que seja  $a \in \mathbb{R}$  com  $a \geq 0$ .

**Definição 4.2.** A função de Mittag-Leffler a dois parâmetros reais,  $\alpha > 0$  e  $\beta > 0$ , é a função que a cada  $x \in \mathbb{R}$ , associa o número real  $E_{\alpha,\beta}(x)$  dado por

$$E_{\alpha,\beta}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}.$$

Claramente

$$E_{\alpha,1}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} = E_{\alpha}(x),$$

e desta forma a função de Mittag-Leffler a dois parâmetros é uma generalização da função de Mittag-Leffler a um parâmetro. Também

$$xE_{2,2}(-ax^2) = x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-ax^2)^k}{\Gamma(2k+2)} = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(\sqrt{ax})^{2k+1}}{(2k+1)!} = \frac{1}{\sqrt{a}} \operatorname{sen}(\sqrt{ax}), \quad (5)$$

e

$$xE_{2,2}(ax^2) = x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(ax^2)^k}{\Gamma(2k+2)} = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{ax})^{2k+1}}{(2k+1)!} = \frac{1}{\sqrt{a}} \operatorname{senh}(\sqrt{ax}), \quad (6)$$

qualquer que seja  $a \in \mathbb{R}$  com  $a > 0$ . Também, fica claro das Definições 4.1 e 4.2 que

$$E_\alpha(0) = 1 \quad \text{e} \quad E_{\alpha,\beta}(0) = \frac{1}{\Gamma(\beta)}, \quad (7)$$

quaisquer que sejam  $\alpha, \beta \in (0, \infty)$ .

Dentre as muitas propriedades destas funções, para nosso estudo temos particular interesse na Transformada de Laplace das funções de Mittag-Leffler. Faremos isto na próxima seção.

O leitor interessado em um estudo mais aprofundado sobre as funções de Mittag-Leffler, suas propriedades ou ainda suas definições a valores e parâmetros complexos pode consultar Kilbas et al. (2006) ou Oliveira (2012).

## 5. Transformada de Laplace

Nesta seção apresentaremos a definição de Transformada de Laplace e algumas propriedades importantes desta Transformada. A Transformada de Laplace, conforme apresentada em Raimbault (2008), pertence a uma família muito vasta de transformadas integrais, que estabelecem uma relação entre uma função  $f$  e a sua transformada  $F$ , da forma

$$F(s) = \int_I K(s,t)f(t)dt. \quad (8)$$

Uma transformada particular necessita então da definição do núcleo  $K(s,t)$  e do intervalo de integração  $I$ , sendo estes escolhidos dependendo do interesse ou da aplicação. As transformadas mais utilizadas são a de Fourier, que requer

$$I = \mathbb{R} = (-\infty, \infty) \quad \text{e} \quad K(s,t) = e^{-ist}, \quad s \in \mathbb{R}$$

e a de Laplace, que requer

$$I = [0, \infty) \quad \text{e} \quad K(s,t) = e^{-st}, \quad s = a + ib \in \mathbb{C}.$$

Já que  $s$  é complexo nesta última expressão, a Transformada de Laplace é uma generalização da Transformada de Fourier. Neste texto entretanto, não estamos interessados no trato com os números complexos, e portanto consideraremos a Transformada de Laplace quando  $s \in \mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ . Nestes termos, segue a definição de Transformada de Laplace que utilizaremos.

**Definição 5.1.** Seja  $f$  uma função definida para  $t \geq 0$ . A integral imprópria

$$F(s) = \mathcal{L}(f)(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad (9)$$

quando existir, será chamada de Transformada de Laplace de  $f$ .

Quando a integral imprópria acima existir, a integral dependerá de  $s$ , e portanto será uma função da variável independente  $s$ . É natural pensarmos que a convergência da integral depende também de  $s$ . Os valores de  $s$  para os quais a integral existe constituem o domínio de definição da função  $F(s)$ , a Transformada de Laplace de  $f(t)$ . Iremos omitir todas as restrições sobre  $s$  e entendemos que  $s$  seja considerado no conjunto em que a integral em (9) converge.

Usaremos a expressão “ $f$  admite Transformada de Laplace” ou “a Transformada de Laplace de  $f$  existe” para dizer que a integral da definição converge. Usaremos geralmente letras minúsculas para denotar uma função e a letra maiúscula correspondente para denotar a sua transformada de Laplace. Isto significa que  $F(s) = \mathcal{L}(f)(s)$ . É comum também escrever  $\mathcal{L}(f(t))(s)$  ou  $(\mathcal{L}f)(s)$  para denotar a Transformada de Laplace de  $f$ . Por padronização, usaremos sempre, salvo menção em contrário,  $t$  a variável da função e  $s$  a variável da Transformada de Laplace desta função.

Notemos ainda que ao afirmar que a Transformada de uma função  $f(t)$  existe, então a integral da definição converge, e sendo uma integral imprópria, é obrigatório que  $e^{-st} f(t) \rightarrow 0$  quando  $t \rightarrow \infty$ .

A seguir veremos algumas propriedades envolvendo a Transformada de Laplace. Estas propriedades são de interesse imediato para aplicarmos esta transformada na obtenção de soluções de EDOs lineares de ordem  $n$  a coeficientes constantes.

**Proposição 5.2.** *A Transformada de Laplace é um operador linear. De outra forma, se  $f$  e  $g$  são funções que admitem Transformadas de Laplace e  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ , então  $(\alpha f + \beta g)$  admite Transformada de Laplace e, além disso,*

$$\mathcal{L}(\alpha f + \beta g) = \alpha(\mathcal{L}f) + \beta(\mathcal{L}g).$$

**Proposição 5.3** (Transformada de uma derivada). *Se  $f$  e  $f'$  forem contínuas em  $[0, \infty)$  e tais que as transformadas de Laplace existem, então*

$$(\mathcal{L}f')(s) = s(\mathcal{L}f)(s) - f(0).$$

As demonstrações destas duas últimas proposições podem ser encontradas em Zill (2016).

Podemos usar esta última proposição repetidamente para obter expressões que envolvem a Transformada de Laplace das derivadas de ordem superior de uma função  $f$ . Admitindo que  $f$ ,  $f'$  e  $f''$  são funções cuja Transformada de Laplace existem, então

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}f'')(s) &= s(\mathcal{L}f')(s) - f'(0) \\ &= s(s(\mathcal{L}f)(s) - f(0)) - f'(0) = s^2(\mathcal{L}f)(s) - sf(0) - f'(0), \end{aligned}$$

e assim sucessivamente. O próximo corolário resume a expressão para o caso de uma derivada de ordem  $n \in \mathbb{N}^*$  arbitrária. Não apresentaremos sua demonstração que segue da proposição anterior e do princípio de indução finita.

**Corolário 5.4.** *Seja  $n \in \mathbb{N}^*$ . Se  $f, f', f'', \dots, f^{(n)}$  forem contínuas em  $[0, \infty)$  e tais que as Transformadas de Laplace existem, então*

$$(\mathcal{L}f^{(n)})(s) = s^n(\mathcal{L}f)(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-1-k} f^{(k)}(0),$$

sendo que  $f^{(0)}$  é entendida como sendo  $f$ .

**Definição 5.5.** Se  $F(s) = (\mathcal{L}f)(s)$  representa a Transformada de Laplace de uma função  $f(t)$ , dizemos então que  $f(t)$  é a Transformada inversa de Laplace de  $F(s)$  e escrevemos  $f(t) = \mathcal{L}^{-1}(F(s))(t) = (\mathcal{L}^{-1}F)(t)$ .

A transformada inversa de Laplace é também um operador linear, isto é,  $\mathcal{L}^{-1}(\alpha F(s) + \beta G(s))(t) = \alpha \mathcal{L}^{-1}(F(s))(t) + \beta \mathcal{L}^{-1}(G(s))(t)$ . Os próximos exemplos ilustram com mais detalhes a ideia da definição anterior.

**Exemplo 1.** Se  $a \in \mathbb{R}$ , então para a função  $f(t) = e^{at}$  temos

$$(\mathcal{L}f)(s) = \mathcal{L}(e^{at})(s) = \frac{1}{s-a},$$

para todo  $s > a$ . De fato,

$$\mathcal{L}(e^{at})(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} e^{at} dt = \int_0^{\infty} e^{-(s-a)t} dt = -\frac{e^{-(s-a)t}}{(s-a)} \Big|_{t=0}^{\infty} = \frac{1}{s-a},$$

desde que  $s > a$ . Fica claro que, quando  $s = a$  então  $e^{-(s-a)t} = 1$  e a integral diverge e também, quando  $s < a$ , então  $e^{-(s-a)t} \rightarrow \infty$  quanto  $t \rightarrow \infty$ . Então a integral diverge se  $s \leq a$ .

Nestes termos se  $F(s) = \frac{1}{s-a}$  então

$$(\mathcal{L}^{-1}F)(t) = \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{s-a}\right) = e^{at}.$$

**Exemplo 2.** Se  $a \in \mathbb{R}$ , então para  $f(t) = \cos(at)$ , temos

$$(\mathcal{L}f)(s) = \mathcal{L}(\cos(at))(s) = \frac{s}{s^2 + a^2},$$

desde que  $s > 0$ . Para provar isto, seja então  $a \in \mathbb{R}$ . Temos que

$$\mathcal{L}(\cos(at))(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} \cos(at) dt.$$

Vamos determinar a integral do segundo membro usando integração por partes. Escolhendo  $u = e^{-st}$  e  $\frac{dv}{dt} = \cos(at)$ , temos que  $\frac{du}{dt} = (-s)e^{-st}$  e  $v = \frac{1}{a} \sin(at)$ . Assim,

$$\int_0^{\infty} e^{-st} \cos(at) dt = \frac{1}{a} e^{-st} \sin(at) \Big|_{t=0}^{\infty} - \int_0^{\infty} (-s) e^{-st} \left(\frac{1}{a}\right) \sin(at) dt.$$

Analisando  $e^{-st} \sin(at)$  quando  $t \rightarrow \infty$ , verificamos que  $e^{-st} \rightarrow 0$  pois  $s > 0$ , e sendo a função seno limitada temos que  $e^{-st} \sin(at) \rightarrow 0$  quando  $t \rightarrow \infty$ . Logo

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-st} \cos(at) dt &= \frac{1}{a} e^{-st} \sin(at) \Big|_{t=0}^{\infty} - \int_0^{\infty} (-s) e^{-st} \left(\frac{1}{a}\right) \sin(at) dt \\ &= \frac{s}{a} \int_0^{\infty} e^{-st} \sin(at) dt. \end{aligned}$$

Novamente integrando por partes, colocamos  $u = e^{-st}$  e  $\frac{dv}{dt} = \sin(at)$  e com isto,  $\frac{du}{dt} = (-s)e^{-st}$  e  $v = -\frac{1}{a} \cos(at)$ . Assim,

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-st} \cos(at) dt &= \frac{s}{a} \int_0^{\infty} e^{-st} \sin(at) dt \\ &= -\frac{s}{a^2} e^{-st} \cos(at) \Big|_{t=0}^{\infty} - \frac{s}{a} \int_0^{\infty} (-s) e^{-st} \left(-\frac{1}{a}\right) \cos(at) dt. \end{aligned}$$

Novamente  $e^{-st} \cos(at) \rightarrow 0$  quando  $t \rightarrow \infty$  pois  $s > 0$  e cosseno é uma função limitada. Então segue que

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-st} \cos(at) dt &= -\frac{s}{a^2} e^{-st} \cos(at) \Big|_{t=0}^{\infty} + \frac{s}{a} \int_0^{\infty} (-s) e^{-st} \frac{1}{a} \cos(at) dt \\ &= \frac{s}{a^2} - \frac{s^2}{a^2} \int_0^{\infty} e^{-st} \cos(at) dt. \end{aligned}$$

Multiplicando ambos os membros por  $a^2$ , e reorganizando vem

$$(s^2 + a^2) \int_0^{\infty} e^{-st} \cos(at) dt = s,$$

donde temos que

$$\mathcal{L}(\cos(at))(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} \cos(at) dt = \frac{s}{s^2 + a^2},$$

desde que  $s > 0$ .

Sendo assim, se  $F(s) = \frac{1}{s^2+a^2}$  então

$$(\mathcal{L}^{-1}F)(t) = \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{s^2+a^2}\right) = \cos(at).$$

O próximo exemplo ilustra o uso dos dois exemplos anteriores na solução de um problema de valor inicial.

**Exemplo 3.** Consideremos o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y''' - y'' + y' - y = 4e^{-t} \\ y(0) = -1, \quad y'(0) = 3, \quad y''(0) = 3. \end{cases}$$

e vamos usar a Transformada de Laplace para determinar a solução  $y(t)$  deste sistema. Aplicando a Transformada de Laplace em ambos os membros da equação diferencial temos que

$$\mathcal{L}(y''' - y'' + y' - y)(s) = \mathcal{L}(4e^{-t})(s),$$

e usando as proposições 5.2 e 5.3 e os resultados dos dois exemplos anteriores, temos que

$$(s^3 Y(s) + s^2 - 3s - 3) - (s^2 Y(s) + s - 3) + (s Y(s) + 1) - Y(s) = 4 \frac{1}{s+1},$$

sendo que  $Y(s) = (\mathcal{L}y)(s)$ . Podemos reorganizar os termos e reescrevemos,

$$(s^3 - s^2 + s - 1)Y(s) + (s^2 - 4s + 1) = \frac{4}{s+1},$$

e portanto

$$(s^3 - s^2 + s - 1)Y(s) = \frac{4}{s+1} - (s^2 - 4s + 1) = \frac{3 + 3s + 3s^2 - s^3}{s+1},$$

donde obtemos

$$Y(s) = \frac{3 + 3s + 3s^2 - s^3}{(s+1)(s^3 - s^2 + s - 1)} = \frac{3 + 3s + 3s^2 - s^3}{(s+1)(s-1)(s^2+1)}.$$

O que temos que fazer agora, antes de aplicar a Transformada de Laplace Inversa, é organizar o segundo membro para podermos aplicar os resultados dos exemplos anteriores. Então usando a técnica de separação de frações parciais obtemos que

$$Y(s) = \frac{3 + 3s + 3s^2 - s^3}{(s+1)(s-1)(s^2+1)} = \frac{-1}{s+1} + \frac{2}{s-1} + \frac{-2s}{s^2+1},$$

e aplicando em ambos os membros a transformada inversa, temos que

$$\begin{aligned} y(t) &= (\mathcal{L}^{-1}Y)(t) \\ &= \mathcal{L}^{-1} \left( \frac{-1}{s+1} + \frac{2}{s-1} + \frac{-2s}{s^2+1} \right) (t) \\ &= -\mathcal{L}^{-1} \left( \frac{1}{s+1} \right) (t) + 2\mathcal{L}^{-1} \left( \frac{1}{s-1} \right) (t) - 2\mathcal{L}^{-1} \left( \frac{s}{s^2+1} \right) (t) \\ &= -e^{-t} + 2e^t - 2\cos(t). \end{aligned}$$

Agora estamos interessados em determinar as Transformadas de Laplace das funções de Mittag-Leffler. Queremos então obter  $\mathcal{L}(E_\alpha(t))$  e  $\mathcal{L}(E_{\alpha,\beta}(t))$ , ou alguma outra expressão que nos permita estabelecer uma relação entre as funções de Mittag-Leffler e suas Transformadas de Laplace. Em verdade, vamos determinar as Transformadas de Laplace das funções  $f(t) = E_\alpha(t^\alpha)$  e  $f(t) = t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(t^\alpha)$ . As próximas proposições tratam isto.

**Proposição 5.6.** *Para quaisquer  $a, \alpha \in \mathbb{R}$  com  $\alpha > 0$ , tem-se*

$$\mathcal{L}(E_\alpha(at^\alpha))(s) = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha - a},$$

para  $s > a^{\frac{1}{\alpha}}$ .

*Demonstração.* Da definição de Transformada de Laplace, temos que

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(E_\alpha(at^\alpha))(s) &= \int_0^\infty e^{-st} E_\alpha(at^\alpha) dt \\ &= \int_0^\infty e^{-st} \sum_{k=0}^\infty \frac{(at^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} dt = \int_0^\infty \sum_{k=0}^\infty e^{-st} \frac{a^k t^{\alpha k}}{\Gamma(\alpha k + 1)} dt.\end{aligned}$$

Como a série é convergente e a integral imprópria também converge, podemos comutar o sinal de integral com o sinal do somatório, e então

$$\mathcal{L}(E_\alpha(at^\alpha))(s) = \sum_{k=0}^\infty \int_0^\infty e^{-st} \frac{a^k t^{\alpha k}}{\Gamma(\alpha k + 1)} dt = \sum_{k=0}^\infty \frac{a^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k} dt.$$

Vamos agora olhar para a integral do último membro. Fazendo nela a mudança de variável  $u = st$  temos que  $\frac{du}{dt} = s$ , e assim

$$\int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k} dt = \int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k} \frac{1}{s} s dt = \int_0^\infty e^{-u} \left(\frac{u}{s}\right)^{\alpha k} \frac{1}{s} du = \frac{1}{s^{\alpha k + 1}} \int_0^\infty e^{-u} u^{\alpha k} du.$$

Da definição da função gama, temos que a última integral é precisamente  $\Gamma(\alpha k + 1)$ . Segue que

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(E_\alpha(at^\alpha))(s) &= \sum_{k=0}^\infty \frac{a^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k} dt \\ &= \sum_{k=0}^\infty \frac{a^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \frac{1}{s^{\alpha k + 1}} \int_0^\infty e^{-u} u^{\alpha k} du \\ &= \sum_{k=0}^\infty \frac{a^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \frac{1}{s^{\alpha k + 1}} \Gamma(\alpha k + 1) \\ &= \sum_{k=0}^\infty \frac{a^k}{s^{\alpha k + 1}} = \frac{1}{s} \sum_{k=0}^\infty \left(\frac{a}{s^\alpha}\right)^k.\end{aligned}$$

Levando em conta que  $s > a^{\frac{1}{\alpha}}$  então  $\frac{a}{s^\alpha} < 1$ . Desta forma, a série do último membro é uma série geométrica convergente para o número

$$\frac{1}{1 - \frac{a}{s^\alpha}} = \frac{s^\alpha}{s^\alpha - a},$$

e portanto

$$\mathcal{L}(E_\alpha(at^\alpha))(s) = \frac{1}{s} \frac{s^\alpha}{s^\alpha - a} = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha - a}.$$

□

**Proposição 5.7.** Para quaisquer  $a, \alpha, \beta \in \mathbb{R}$  com  $\alpha, \beta > 0$ , tem-se

$$\mathcal{L}(t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(at^\alpha))(s) = \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha - a},$$

para  $s > a^{\frac{1}{\alpha}}$ .

*Demonstração.* Começando com a definição de Transformada de Laplace, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(at^\alpha))(s) &= \int_0^\infty e^{-st} t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(at^\alpha) dt \\ &= \int_0^\infty e^{-st} t^{\beta-1} \sum_{k=0}^\infty \frac{(at^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} dt = \int_0^\infty \sum_{k=0}^\infty e^{-st} \frac{a^k t^{\alpha k + \beta - 1}}{\Gamma(\alpha k + \beta)} dt. \end{aligned}$$

Novamente, como a série e a integral imprópria do último membro são convergentes, podemos comutar o sinal de integral com o sinal do somatório, e então

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(at^\alpha))(s) &= \sum_{k=0}^\infty \int_0^\infty e^{-st} \frac{a^k t^{\alpha k + \beta - 1}}{\Gamma(\alpha k + \beta)} dt \\ &= \sum_{k=0}^\infty \frac{a^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k + \beta - 1} dt. \end{aligned}$$

Tomando a integral do último membro, fazemos a mudança de variável  $u = st$ . Temos que  $\frac{du}{dt} = s$  e quando  $t = 0$  então  $u = 0$  e quando  $t \rightarrow \infty$  também  $u \rightarrow \infty$  já que  $s > 0$ . Assim

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k + \beta - 1} dt &= \int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k + \beta - 1} \frac{1}{s} s dt \\ &= \int_0^\infty e^{-u} \left(\frac{u}{s}\right)^{\alpha k + \beta - 1} \frac{1}{s} du = \frac{1}{s^{\alpha k + \beta}} \int_0^\infty e^{-u} u^{\alpha k + \beta - 1} du. \end{aligned}$$

A última integral agora é igual a  $\Gamma(\alpha k + \beta)$ , donde segue que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(at^\alpha))(s) &= \sum_{k=0}^\infty \frac{a^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k + \beta - 1} dt \\ &= \sum_{k=0}^\infty \frac{a^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \frac{1}{s^{\alpha k + \beta}} \int_0^\infty e^{-u} u^{\alpha k + \beta - 1} du \end{aligned}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \frac{1}{s^{\alpha k + \beta}} \Gamma(\alpha k + \beta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k}{s^{\alpha k + \beta}} = \frac{1}{s^\beta} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{a}{s^\alpha}\right)^k.$$

Como  $s > a^{\frac{1}{\alpha}}$  então  $\frac{a}{s^\alpha} < 1$  e então a última série é uma série geométrica convergente e a sua soma é  $\frac{s^\alpha}{s^\alpha - a}$ . Portanto

$$\mathcal{L}(t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(at^\alpha))(s) = \frac{1}{s^\beta} \frac{s^\alpha}{s^\alpha - a} = \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha - a},$$

como desejado. □

Segue portanto que

$$\mathcal{L}(E_\alpha(at^\alpha))(s) = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha - a} \quad \text{e} \quad \mathcal{L}(t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(at^\alpha))(s) = \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha - a},$$

e nestes termos

$$\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha - a}\right)(t) = E_\alpha(at^\alpha) \quad \text{e} \quad \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha - a}\right)(t) = t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(at^\alpha),$$

para quaisquer  $a \in \mathbb{R}$  e  $\alpha, \beta \in (0, \infty) \subset \mathbb{R}$ .

## 6. Integral fracionária (de Riemann-Liouville)

Nesta seção discutiremos a definição de integral fracionária dada por Riemann-Liouville. Discutiremos ainda algumas propriedades desta definição.

Durante toda esta seção, usaremos o símbolo  $\frac{d}{dt}$  para designar o operador derivada de uma função (derivável) e o operador  $J$  para designar o operador integral de uma função (integrável) em um certo intervalo  $[a, b]$ . Desta forma, para todo  $t \in [a, b]$ , temos

$$\frac{d}{dt} f(t) = \frac{df}{dt}(t) = f'(t),$$

e

$$(Jf)(t) = J(f)(t) = \int_a^t f(s) ds.$$

Derivações e integrações sucessivas são portanto definidas recursivamente por

$$f^{(n)}(t) = \frac{d^n f}{dt^n}(t) = \frac{d}{dt} \left( \frac{d^{n-1} f}{dt^{n-1}} \right) (t) \quad \text{e} \quad (J^n f)(t) = (J(J^{n-1} f))(t),$$

para todo  $n \in \mathbb{N}$  com  $n > 1$ . Consideramos ainda que  $f^{(0)}(t) = (J^0 f)(t) = f(t)$ .

O estudante do curso de cálculo diferencial e integral está familiarizado com a ideia de derivada de ordem superior mas não com a ideia de integral de ordem superior. A próxima proposição expressa um resultado do cálculo diferencial e integral, conhecido como identidade de Cauchy para integrais repetidas ou integrais de ordem superior. Este resultado motivará a definição de integral fracionária de Riemann-Liouville.

**Proposição 6.1** (Identidade de Cauchy). *Se  $f$  é uma função integrável em um intervalo  $[a, b] \subset \mathbb{R}$ , e  $n \in \mathbb{N}$  com  $n \geq 1$ , então*

$$(J^n f)(t) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t (t-s)^{n-1} f(s) ds.$$

*Demonstração.* Usaremos indução finita sobre  $n \in \mathbb{N}$ . Para  $n = 1$  temos imediatamente de acordo com a nossa notação que

$$(J^1 f)(t) = (Jf)(t) = \int_a^t f(s) ds = \frac{1}{0!} \int_a^t (t-s)^{1-1} f(s) ds.$$

Supomos então o resultado válido para  $n$ , isto é,

$$(J^n f)(t) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t (t-s)^{n-1} f(s) ds.$$

Assim, para  $n + 1$  temos que

$$\begin{aligned} (J^{n+1} f)(t) &= J(J^n f)(t) = \int_a^t (J^n f)(s) ds \\ &= \int_a^t \frac{1}{(n-1)!} \int_a^s (s-\tau)^{n-1} f(\tau) d\tau ds \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t \int_a^s (s-\tau)^{n-1} f(\tau) d\tau ds.$$

Vamos agora mudar a ordem de integração. Notemos que enquanto  $a \leq s \leq t$  temos  $a \leq \tau \leq s$ . Para mudarmos a ordem de integração sem mudar a região de integração, faremos  $a \leq \tau \leq t$  e  $\tau \leq s \leq t$ . Temos então

$$\begin{aligned} (J^{n+1}f)(t) &= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t \int_a^s (s-\tau)^{n-1} f(\tau) d\tau ds \\ &= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t \int_\tau^t (s-\tau)^{n-1} f(\tau) ds d\tau \\ &= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t \left[ \frac{1}{n} (s-\tau)^n f(\tau) \right]_{s=\tau}^t d\tau \\ &= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t \frac{1}{n} (t-\tau)^n f(\tau) d\tau = \frac{1}{n!} \int_a^t (t-\tau)^n f(\tau) d\tau, \end{aligned}$$

como queríamos. □

A identidade de Cauchy que acabamos de apresentar é válida para todo  $n \in \mathbb{N}$ . Entretanto, olhando para o termo à direita da igualdade vemos que não há nenhum impedimento em considerar que  $n \in \mathbb{R}$ , exceto pela presença do fatorial. Substituímos então  $(n-1)!$  pela sua generalização  $\Gamma(n)$  e não há mais problemas em considerar  $n \in (0, \infty) \subset \mathbb{R}$ . Esta ideia é a base da definição da integral de Riemann-Liouville.

**Definição 6.2.** Suponha que  $f(t)$  seja contínua em  $[a, b] \subset \mathbb{R}$ . A integral de Riemann-Liouville de ordem  $\alpha > 0$  da função  $f$  é a função denotada por  ${}_{RL}J_{a+}^\alpha(f)(t)$  ou por  $({}_{RL}J_{a+}^\alpha f)(t)$  e definida por

$${}_{RL}J_{a+}^\alpha(f)(t) = ({}_{RL}J_{a+}^\alpha f)(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-s)^{\alpha-1} f(s) ds.$$

A notação  ${}_{RL}J_{a+}^\alpha$  será utilizada apenas quando houver possibilidade de confusão com alguma outra noção de integral de ordem fracionária. Em toda esta seção, como não estamos interessados em outra definição de integral de ordem fracionária, omitiremos a expressão  $RL$  e usaremos somente a

notação simplificada  $J_{a+}^{\alpha}$  para representar a integral fracionária de Riemann-Liouville.

Notemos que a integral da definição anterior está bem definida pois  $f(s)$  e  $(t-s)^{\alpha-1}$  são integráveis em  $[a, t]$  qualquer que seja  $\alpha > 0$ . A hipótese de continuidade de  $f$  parece ser mais forte do que o necessário. Bastaria que  $f$  fosse integrável no intervalo  $[a, b]$ . Entretanto a hipótese de continuidade nos permite outros resultados importantes. Se  $f$  é contínua pode-se provar que quando  $\alpha \rightarrow 0^+$  então  $J_{a+}^{\alpha}(f) \rightarrow f$  uniformemente. Fato este que permite definir  $J_{a+}^0$  como limite de  $J_{a+}^{\alpha}$  quando  $\alpha \rightarrow 0^+$ . Para mais detalhes ou a demonstração desta propriedade indicamos Podlubny (1999). Note também que se  $\alpha = 1$  então o operador  $J_{a+}^{\alpha}$  se reduz ao caso clássico.

O leitor pode achar que a definição deveria admitir  $\alpha < 0$  também. O caso  $\alpha < 0$  nos remete ao inverso da integral (em um certo sentido), ou seja, à derivada de ordem fracionária que será apresentada mais adiante. No que se segue apresentamos duas propriedades básicas do operador  $J^{\alpha}$  para  $\alpha > 0$ . A primeira propriedade, a linearidade, não será demonstrada pois é uma consequência imediata da linearidade do operador integral clássico.

**Proposição 6.3.** *Se  $f$  e  $g$  são duas funções integráveis em  $[a, b]$  e  $\alpha \in (0, \infty)$ , então*

$$J_{a+}^{\alpha}(c_1f + c_2g) = c_1(J_{a+}^{\alpha}f) + c_2(J_{a+}^{\alpha}g),$$

para quaisquer que sejam  $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$  constantes.

**Teorema 6.4** (Lei dos expoentes). *Se  $f$  é uma função contínua em  $[a, b] \subset \mathbb{R}$  e  $\alpha, \beta \in (0, \infty)$ , então*

$$J_{a+}^{\alpha}(J_{a+}^{\beta}f) = J_{a+}^{\alpha+\beta}f = J_{a+}^{\beta}(J_{a+}^{\alpha}f).$$

*Demonstração.* Da definição de integral de ordem fracionária, temos para qualquer  $t \in [a, b]$ ,

$$J_{a+}^{\alpha}(J_{a+}^{\beta}f)(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-s)^{\alpha-1} \left[ (J_{a+}^{\beta}f)(s) \right] ds$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-s)^{\alpha-1} \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^s (s-u)^{\beta-1} f(u) du ds \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t \int_a^s (t-s)^{\alpha-1} (s-u)^{\beta-1} f(u) du ds.
\end{aligned}$$

Invertendo a ordem de integração no último membro temos que a região de integração  $s \in [a, t]$  e  $u \in [a, s]$  fica reescrita colocando  $u \in [a, t]$  e  $s \in [u, t]$  e portanto temos

$$\begin{aligned}
J_{a+}^{\alpha}(J_{a+}^{\beta}f)(t) &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t \int_u^t (t-s)^{\alpha-1} (s-u)^{\beta-1} f(u) ds du \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t f(u) \int_u^t ((t-u) - (s-u))^{\alpha-1} (s-u)^{\beta-1} ds du \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t f(u) \int_u^t (t-u)^{\alpha-1} \left(1 - \frac{(s-u)}{(t-u)}\right)^{\alpha-1} (s-u)^{\beta-1} ds du.
\end{aligned}$$

Fazendo agora a mudança de variáveis  $w = \frac{1}{(t-u)}(s-u)$  temos que  $\frac{dw}{ds} = \frac{1}{(t-u)}$  e portanto

$$\begin{aligned}
J_{a+}^{\alpha}(J_{a+}^{\beta}f)(t) &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t f(u) \int_0^1 (t-u)^{\alpha-1} (1-w)^{\alpha-1} ((t-u)w)^{\beta-1} (t-u) dw du \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t f(u) \int_0^1 (t-u)^{\alpha-1+\beta-1+1} (1-w)^{\alpha-1} w^{\beta-1} dw du \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t (t-u)^{\alpha+\beta-1} f(u) \int_0^1 (1-w)^{\alpha-1} w^{\beta-1} dw du \\
&= \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t (t-u)^{\alpha+\beta-1} f(u) B(\alpha, \beta) du \\
&= \frac{B(\alpha, \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^t (t-u)^{\alpha+\beta-1} f(u) du.
\end{aligned}$$

Usando agora a relação  $B(\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}$ , obtemos finalmente que

$$J_{a+}^{\alpha}(J_{a+}^{\beta}f)(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha+\beta)} \int_a^t (t-u)^{\alpha+\beta-1} f(u) du = (J_{a+}^{\alpha+\beta}f)(t).$$

Segue que  $J_{a+}^{\alpha}(J_{a+}^{\beta}f) = J_{a+}^{\alpha+\beta}f$  e a segunda igualdade é consequência da comutatividade da adição de números reais.  $\square$

## 7. Derivada fracionária (de Caputo)

A noção de derivada de ordem fracionária segundo Caputo, leva em conta a definição de integral fracionária de Riemann-Liouville. O leitor deve portanto estar familiarizado pela seção anterior com a noção de integral fracionária de Riemann-Liouville e suas propriedades.

**Definição 7.1.** Seja  $\alpha > 0$  um número real e  $n \in \mathbb{N}$  de forma que  $n - 1 \leq \alpha < n$ . Se  $f$  é uma função contínua em  $[a, b] \subset \mathbb{R}$  com  $n$  derivadas contínuas em  $(a, b)$ , então a derivada fracionária de Caputo de ordem  $\alpha$  de  $f$ , definida em  $[a, b]$  é a função dada por

$${}_C D_{a+}^{\alpha}(f)(t) = ({}_C D_{a+}^{\alpha} f)(t) = (J_{a+}^{n-\alpha} f^{(n)})(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t (t-s)^{n-\alpha-1} \frac{d^n f}{ds^n}(s) ds,$$

sendo que  $J_{a+}$  se refere à integral fracionária de Riemann-Liouville e  $f^{(n)}$  se refere à clássica derivada de ordem  $n$  de  $f$ .

Note então que derivar na ordem  $\alpha > 0$  uma função  $f$ , segundo Caputo, significa derivar no sentido clássico a função  $f$   $n$  vezes com  $n - 1 \leq \alpha < n$  e depois integrar na ordem  $(n - \alpha)$  segundo Riemann-Liouville.

A notação  ${}_C D_{a+}^{\alpha}$  somente será usada quando houver possibilidade de confusão com alguma outra noção de derivada de ordem fracionária. Em toda esta seção, estamos exclusivamente nos referindo à noção de derivada de Caputo e portanto omitiremos a expressão  $C$  e usaremos apenas  $D_{a+}^{\alpha}$ .

A definição de derivada de ordem fracionária de Caputo, em geral, **não** coincide com a definição usual quando  $\alpha$  é um inteiro positivo. Se  $\alpha = n - 1 \in \mathbb{N}^*$ , então  $n - \alpha = 1$  e então,

$$\begin{aligned} (D_{a+}^{n-1} f)(t) &= (J_{a+} f^{(n)})(t) = \int_a^t f^{(n)}(s) ds \\ &= \int_a^t \frac{d}{ds} \left( f^{(n-1)}(s) \right) ds = f^{(n-1)}(t) - f^{(n-1)}(a). \end{aligned}$$

Se a escolha de  $a$  for feita de forma que  $f^{(n-1)}(a) = 0$ , então recupera-se o resultado clássico.

Uma das principais propriedades da derivada fracionária de Caputo é a linearidade. Vamos enunciar isto na próxima proposição, mas não provaremos pois é uma consequência imediata da linearidade da integral de Riemann-Liouville e da derivada de ordem inteira (positiva).

**Proposição 7.2.** *Seja  $\alpha > 0$ . Se  $f$  e  $g$  são duas funções  $\alpha$  deriváveis no sentido de Caputo, então  $(c_1f + c_2g)$  é  $\alpha$  derivável no sentido de Caputo e além disso*

$$(D_{a+}^{\alpha}(c_1f + c_2g))(t) = c_1(D_{a+}^{\alpha}f)(t) + c_2(D_{a+}^{\alpha}g)(t),$$

quaisquer que sejam  $c_1$  e  $c_2$  constantes reais.

É conhecido que em geral não vale a lei dos expoentes para a derivada de Caputo, isto é, não é válido que  $D_{a+}^{\alpha}(D_{a+}^{\beta}f) \neq D_{a+}^{\alpha+\beta}f$  para quaisquer  $\alpha > 0$  e  $\beta > 0$ , mesmo que a função  $f$  seja  $\beta$  derivável e  $(D_{a+}^{\beta}f)$  seja  $\alpha$  derivável. Ou seja não é válida a lei dos expoentes para a derivada fracionária de Caputo. O próximo contra-exemplo ilustra isto.

**Exemplo 4.** Vamos considerar a função  $f(t) = t$  contínua em  $[0, \infty)$  e com derivadas de ordem  $n \in \mathbb{N}$  contínuas em  $(0, \infty)$ . Queremos determinar  $(D_{0+}^{\frac{1}{2}}(D_{0+}^{\frac{1}{2}}f))(t)$ , e para isto começemos com  $(D_{0+}^{\frac{1}{2}}f)(t)$ . Temos então

$$\begin{aligned} (D_{0+}^{\frac{1}{2}}f)(t) &= \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^t (t-s)^{-\frac{1}{2}} f'(s) ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^t (t-s)^{-\frac{1}{2}} ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \left[ -2(t-s)^{\frac{1}{2}} \right]_{s=0}^t = \frac{2}{\Gamma(\frac{1}{2})} t^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Para prosseguir, como a derivada de Caputo é linear, basta agora determinar  $(D_{0+}^{\frac{1}{2}}t^{\frac{1}{2}})(t)$ . Então

$$(D_{0+}^{\frac{1}{2}}t^{\frac{1}{2}})(t) = \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^t (t-s)^{-\frac{1}{2}} \left( \frac{d}{ds}(s^{\frac{1}{2}}) \right) ds$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^t (t-s)^{-\frac{1}{2}} s^{-\frac{1}{2}} ds \\
&= \frac{1}{2\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^t \left(1 - \frac{s}{t}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{s}{t}\right)^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{t} ds.
\end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variáveis  $u = \frac{s}{t}$  temos que  $\frac{du}{ds} = \frac{1}{t}$  e então

$$(D_{0+}^{\frac{1}{2}} t^{\frac{1}{2}})(t) = \frac{1}{2\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^1 (1-u)^{-\frac{1}{2}} u^{-\frac{1}{2}} du$$

e usando a igualdade (2) e a Proposição 3.4 obtemos

$$(D_{0+}^{\frac{1}{2}} t^{\frac{1}{2}})(t) = \frac{1}{2\Gamma(\frac{1}{2})} B(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = \frac{1}{2\Gamma(\frac{1}{2})} \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(1)} = \frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{2}.$$

Segue que

$$(D_{0+}^{\frac{1}{2}} (D_{0+}^{\frac{1}{2}} t))(t) = \frac{2}{\Gamma(\frac{1}{2})} \left( D_{0+}^{\frac{1}{2}} t^{\frac{1}{2}} \right) (t) = 1.$$

No entanto temos da definição de derivada de Caputo que

$$(D_{0+}^1 t)(t) = \left( J^1 \frac{d^2}{dt^2} t \right) (t) = (J^1 0)(t) = 0,$$

e com isto temos claramente que

$$(D_{0+}^{\frac{1}{2}} (D_{0+}^{\frac{1}{2}} t))(t) = 1 \neq 0 = (D_{0+}^1 t)(t),$$

mostrando que em geral não é válida a lei dos expoentes para a derivada de ordem fracionária.

Embora não seja válida a lei dos expoentes se  $k$  for um inteiro positivo então é verdade que  $D_{a+}^{\alpha} \left( \frac{d^k}{dt^k} f \right) = D_{a+}^{\alpha} (f^{(k)}) = D_{a+}^{\alpha+k} f$  para qualquer  $\alpha > 0$ , desde que  $f$  tenha derivadas de ordem  $k$  e que  $f^{(k)}$  seja  $\alpha$  derivável no sentido de Caputo. Este resultado será útil para nós e portanto é o alvo da próxima Proposição.

**Proposição 7.3.** *Seja  $\alpha \in (0, \infty) \subset \mathbb{R}$  e  $n \in \mathbb{N}$  o natural que satisfaz  $\alpha \in [n - 1, n)$ .*

*Se  $k \in \mathbb{N}$  e  $f$  é uma função derivável até a ordem  $n + k$ , então*

$$\left(D_{a+}^{\alpha} f^{(k)}\right) = \left(D_{a+}^{\alpha} \frac{d^k f}{dt^k}\right) = D_{a+}^{\alpha+k} f.$$

*Demonstração.* Basta provar para  $k = 1$  e usar o fato que

$$D_{a+}^{\alpha} (f^{(k)}) = D_{a+}^{\alpha} \left( \frac{d}{dt} \frac{d}{dt} \cdots \frac{d}{dt} f \right),$$

sendo que o segundo membro possui  $k$  operadores derivada  $\frac{d}{dt}$ . Para o caso geral basta eliminar uma derivada por vez.

O caso  $k = 1$  por sua vez é imediato. Suponha então que  $n$  é o natural que satisfaz  $\alpha \in [n - 1, n)$ . Então  $(\alpha + 1) \in [n, n + 1)$ . Da definição de derivada fracionária de Caputo, temos que

$$\begin{aligned} (D_{a+}^{\alpha+1} f)(t) &= (J_{a+}^{(n+1)-(\alpha+1)} f^{(n+1)})(t) \\ &= \left( J_{a+}^{(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} f' \right)(t) = (D_{a+}^{\alpha} f')(t), \end{aligned}$$

para qualquer  $t > a$ . □

Muito cuidado para não confundir a ordem das derivadas da Proposição anterior. Em geral  $\frac{d^k}{dt^k} (D_{a+}^{\alpha} f)(t) \neq (D_{a+}^{k+\alpha} f)(t)$ . Para mais detalhes sobre esta propriedade pode-se consultar Oliveira (2012) ou Kilbas et al. (2006).

Um outro resultado importante para nós é a Transformada de Laplace da derivada de ordem fracionária. Para ser mais preciso queremos generalizar a Proposição 5.3 para  $y^{(\alpha)}$ , a derivada fracionária de ordem  $\alpha > 0$  da função  $y$ . Para estabelecer este resultado, usaremos indução finita sobre o natural  $n$  que satisfaz  $\alpha \in (n - 1, n)$ . Faremos o caso  $n = 1$  como lema preliminar.

**Lema 7.4.** *Se  $\alpha \in (0, 1) \subset \mathbb{R}$  e  $y$  é uma função  $\alpha$  derivável cujas Transformadas de Laplace de  $y$  e de  $D_{0+}^{\alpha} y$  existem, então*

$$\mathcal{L}(D_{0+}^{\alpha} y)(s) = s^{\alpha} (\mathcal{L}y)(s) - s^{\alpha-1} y(0),$$

para todo  $s > 0$ .

*Demonstração.* Começemos pelas definições da Transformada de Laplace e da derivada de Caputo de ordem  $\alpha \in (0, 1)$ . Temos então

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(D_{0+}^{\alpha}y)(s) &= \int_0^{\infty} e^{-st}(D_{0+}^{\alpha}y)(t)dt \\ &= \int_0^{\infty} e^{-st}(J_{0+}^{\alpha}y')(t)dt \\ &= \int_0^{\infty} e^{-st} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-u)^{-\alpha}y'(u)dudt \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} \int_0^t e^{-st}(t-u)^{-\alpha}y'(u)dudt.\end{aligned}$$

Vamos agora mudar a ordem de integração. A região de integração  $0 \leq t < \infty$  e  $0 \leq u \leq t$  pode ser reescrita colocando  $0 \leq u < \infty$  e  $u \leq t < \infty$ . Temos então que

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(D_{0+}^{\alpha}y)(s) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} \int_0^t e^{-st}(t-u)^{-\alpha}y'(u)dudt \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} \int_u^{\infty} e^{-st}(t-u)^{-\alpha}y'(u)dtdu \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} y'(u) \int_u^{\infty} e^{-st}(t-u)^{-\alpha}dtdu.\end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variáveis  $\tau = t - u$  na integral interna temos que  $\frac{d\tau}{dt} = 1$  e então

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(D_{0+}^{\alpha}y)(s) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} y'(u) \int_u^{\infty} e^{-st}(t-u)^{-\alpha}dtdu \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} y'(u) \int_0^{\infty} e^{-s(\tau+u)}\tau^{-\alpha}d\taudu \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} e^{-su}y'(u) \int_0^{\infty} e^{-s\tau}\tau^{-\alpha}d\taudu.\end{aligned}$$

Vamos agora calcular a integral interna. Para isto fazemos a mudança de variáveis  $\omega = s\tau$  e portanto  $\frac{d\omega}{d\tau} = s$ . Assim,

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} e^{-s\tau}\tau^{-\alpha}d\tau &= \frac{1}{s} \int_0^{\infty} e^{-\omega}\left(\frac{\omega}{s}\right)^{-\alpha}d\omega \\ &= \frac{s^{\alpha}}{s} \int_0^{\infty} e^{-\omega}\omega^{-\alpha}d\omega = s^{\alpha-1}\Gamma(1-\alpha).\end{aligned}$$

Voltando então com esta integral calculada, obtemos

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(D_{0+}^{\alpha}y)(s) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} e^{-su}y'(u) \int_0^{\infty} e^{-s\tau}\tau^{-\alpha}d\tau du \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{\infty} e^{-su}y'(u)s^{\alpha-1}\Gamma(1-\alpha)du \\ &= s^{\alpha-1} \int_0^{\infty} e^{-su}y'(u)du,\end{aligned}$$

e integrando por partes temos

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(D_{0+}^{\alpha}y)(s) &= s^{\alpha-1} \int_0^{\infty} e^{-su}y'(u)du \\ &= s^{\alpha-1} \left( [e^{-su}y(u)]_{u=0}^{\infty} + s \int_0^{\infty} e^{-su}y(u)du \right).\end{aligned}$$

Notemos agora que como a Transformada de Laplace de  $y$  existe então a integral imprópria de  $e^{-st}y(t)$  existe e assim a função  $e^{-st}y(t)$  tende a zero quando  $t \rightarrow \infty$ . Segue que

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(D_{0+}^{\alpha}y)(s) &= s^{\alpha-1} \left( [e^{-su}y(u)]_{u=0}^{\infty} + s \int_0^{\infty} e^{-su}y(u)du \right) \\ &= s^{\alpha-1} (-y(0) + s(\mathcal{L}y)(s)) \\ &= s^{\alpha}(\mathcal{L}y)(s) - s^{\alpha-1}y(0),\end{aligned}$$

como desejado. □

**Teorema 7.5.** *Sejam  $\alpha > 0$  e  $n \in \mathbb{N}$  satisfazendo  $\alpha \in (n-1, n]$ . Se  $y$  é uma função derivável até a ordem  $n$  e cujas Transformadas de Laplace de  $y$  e de  $y^{(k)} = \frac{d^k y}{dt^k}$  existem para todos  $k = 1, 2, \dots, n-1$ , então*

$$(\mathcal{L}D_{0+}^{\alpha}y)(s) = s^{\alpha}(\mathcal{L}y)(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1}y^{(k)}(0).$$

*Demonstração.* Usaremos o lema anterior e a Proposição 7.3. Da Proposição 7.3 temos que

$$(D_{0+}^{\alpha}y)(s) = (D_{0+}^{\alpha-n+1}y^{(n-1)})(s),$$

e como  $\alpha \in (n-1, n]$ , então  $\alpha - n + 1 \in (0, 1]$ , e pelo lema anterior

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}D_{0+}^{\alpha}y)(s) &= (\mathcal{L}D_{0+}^{\alpha-n+1}y^{(n-1)})(s) \\ &= s^{\alpha-n+1}(\mathcal{L}y^{(n-1)})(s) - s^{\alpha-n}y^{(n-1)}(0). \end{aligned}$$

Agora usando a propriedade da Transformada de Laplace de derivadas de ordem inteira positiva, provada na Proposição 5.3, temos que

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}D_{0+}^{\alpha}y)(s) &= s^{\alpha-n+1}(\mathcal{L}y^{(n-1)})(s) - s^{\alpha-n}y^{(n-1)}(0) \\ &= s^{\alpha-n+1} \left( s^{n-1}(\mathcal{L}y)(s) - \sum_{k=0}^{n-2} s^{n-2-k}y^{(k)}(0) \right) - s^{\alpha-n}y^{(n-1)}(0) \\ &= s^{\alpha}(\mathcal{L}y)(s) - \sum_{k=0}^{n-2} s^{\alpha-1-k}y^{(k)}(0) - s^{\alpha-n}y^{(n-1)}(0) \\ &= s^{\alpha}(\mathcal{L}y)(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1}y^{(k)}(0), \end{aligned}$$

como desejado. □

O leitor interessado em outras propriedades envolvendo a integral fracionária de Riemann-Liouville e a derivada fracionária de Caputo, ou outras noções de integral e derivada de ordem fracionária, pode consultar Carmargo (2015), Kilbas (2006) ou Podlubny (1999).

## 8. EDOs de ordem fracionária

Nesta seção vamos usar os resultados anteriores em duas aplicações bem simples. Vamos considerar dois problemas de valor inicial envolvendo equações diferenciais ordinárias de ordem fracionária.

Lembremos primeiro do clássico problema de valor inicial de ordem 1,

$$\begin{cases} y'(t) + ay(t) = 0, & t > 0, \\ y(0) = y_0, & y_0 \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

para  $a \in \mathbb{R}$ , cuja solução é  $y(t) = y_0 e^{-at}$ .

Vamos generalizar este problema. Consideremos o problema de valor inicial de ordem  $\alpha \in (0, 1]$ ,

$$\begin{cases} y^{(\alpha)}(t) + ay(t) = 0, & t > 0, \\ y(0) = y_0, & y_0 \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

sendo  $a \in \mathbb{R}$  uma constante e  $y^{(\alpha)}(t) = D_{0+}^{\alpha}y(t)$  a derivada fracionária de Caputo de ordem  $\alpha$  da função  $y$ .

Para resolver este problema consideremos que  $y$  seja suficientemente regular para que possamos usar qualquer um dos resultados vistos nas seções anteriores. Tomando a Transformada de Laplace da equação diferencial, obtemos

$$(\mathcal{L}(y^{(\alpha)} + ay))(s) = 0. \quad (10)$$

Levando em conta a Proposição 5.2 e o Teorema 7.5, temos que

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}(y^{(\alpha)} + ay))(s) &= (\mathcal{L}y^{(\alpha)})(s) + a(\mathcal{L}y)(s) \\ &= s^{\alpha}(\mathcal{L}y)(s) - s^{\alpha-1}y(0) + a(\mathcal{L}y)(s) \\ &= (s^{\alpha} + a)(\mathcal{L}y)(s) - s^{\alpha-1}y_0, \end{aligned}$$

e assim podemos reescrever a igualdade (10) como

$$(s^{\alpha} + a)(\mathcal{L}y)(s) = s^{\alpha-1}y_0,$$

ou ainda,

$$(\mathcal{L}y)(s) = y_0 \frac{s^{\alpha-1}}{(s^{\alpha} + a)}.$$

Para determinar a função  $y$ , solução do problema de valor inicial, usamos o resultado da Proposição 5.6, obtendo

$$y(t) = \mathcal{L}^{-1} \left( y_0 \frac{s^{\alpha-1}}{(s^{\alpha} + a)} \right) (t) = y_0 E_{\alpha}(-at^{\alpha}),$$

a solução explícita do problema de valor inicial.

Note que quando  $\alpha = 1$  então o problema de valor inicial e sua solução recuperam o caso clássico.

Vamos agora considerar um Problema de Valor Inicial de ordem maior. Lembremos do clássico problema de valor inicial de ordem 2,

$$\begin{cases} y''(t) + ay(t) = 0, & t > 0, \\ y'(0) = y_1, \quad y(0) = y_0, & y_1, y_0 \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

com  $a \in \mathbb{R}$  constante, cuja solução (que depende de  $a$ ) é dada por uma das expressões

$$y(t) = y_0 \cos(\sqrt{a}t) + \frac{y_1}{\sqrt{a}} \operatorname{sen}(\sqrt{a}t) \quad (\text{se } a > 0),$$

$$y(t) = y_0 + y_1 t \quad (\text{se } a = 0),$$

$$y(t) = \frac{y_0 \sqrt{-a} + y_1}{2\sqrt{-a}} e^{\sqrt{-a}t} + \frac{y_0 \sqrt{-a} - y_1}{2\sqrt{-a}} e^{-\sqrt{-a}t} \quad (\text{se } a < 0).$$

Vamos generalizar este problema considerando o problema de valor inicial de ordem  $\alpha \in (1, 2]$ , dado por

$$\begin{cases} y^{(\alpha)}(t) + ay(t) = 0, & t > 0, \\ y'(0) = y_1, \quad y(0) = y_0, & y_1, y_0 \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

com  $a \in \mathbb{R}$  constante e  $y^{(\alpha)}(t) = D_{0+}^{(\alpha)}y(t)$  a derivada de Caputo de  $y$ .

Vamos considerar que  $y$  seja suficientemente regular para podermos aplicar todos os resultados das seções anteriores. Aplicando a Transformada de Laplace em ambos os membros da EDO, obtemos

$$(\mathcal{L}(y^{(\alpha)} + ay))(s) = 0.$$

Usando a Proposição 5.2 e o Teorema 7.5 obtemos

$$(\mathcal{L}(y^{(\alpha)} + ay))(s) = (\mathcal{L}y^{(\alpha)})(s) + a(\mathcal{L}y)(s)$$

$$\begin{aligned}
&= s^\alpha (\mathcal{L}y)(s) - s^{\alpha-1}y(0) - s^{\alpha-2}y'(0) + a(\mathcal{L}y)(s) \\
&= (s^\alpha + a)(\mathcal{L}y)(s) - s^{\alpha-1}y_0 - s^{\alpha-2}y_1.
\end{aligned}$$

Segue que

$$(s^\alpha + a)(\mathcal{L}y)(s) = s^{\alpha-1}y_0 + s^{\alpha-2}y_1,$$

e então

$$(\mathcal{L}y)(s) = \frac{s^{\alpha-1}y_0 + s^{\alpha-2}y_1}{s^\alpha + a} = y_0 \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + a} + y_1 \frac{s^{\alpha-2}}{s^\alpha + a}.$$

Usando os resultados obtidos nas Proposições 5.6 e 5.7 obtemos

$$\begin{aligned}
y(t) &= \mathcal{L}^{-1} \left( y_0 \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + a} + y_1 \frac{s^{\alpha-2}}{s^\alpha + a} \right) (t) \\
&= \mathcal{L}^{-1} \left( y_0 \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + a} \right) (t) + \mathcal{L}^{-1} \left( y_1 \frac{s^{\alpha-2}}{s^\alpha + a} \right) (t) \\
&= y_0 E_\alpha(-at^\alpha) + y_1 t E_{\alpha,2}(-at^\alpha),
\end{aligned}$$

a solução explícita desejada para o Problema de Valor Inicial de ordem  $\alpha \in (1, 2]$ .

Analisemos esta solução no caso particular  $\alpha = 2$ . Esta análise dependerá também do valor de  $a$ . Se  $a > 0$  então diretamente das identidades (3) e (5) temos que

$$y(t) = y_0 E_2(-at^2) + y_1 t E_{2,2}(-at^2) = y_0 \cos(\sqrt{at}) + \frac{y_1}{\sqrt{a}} \text{sen}(\sqrt{at}).$$

Se  $a = 0$  então das duas igualdades em (7), segue que

$$y(t) = y_0 E_2(0) + y_1 t E_{2,2}(0) = y_0 + y_1 t \Gamma(2) = y_0 + y_1 t.$$

Finalmente, se  $a < 0$  então das identidades (4) e (6) temos que

$$y(t) = y_0 E_2(-at^2) + y_1 t E_{2,2}(-at^2)$$

$$\begin{aligned}
&= y_0 \cosh(\sqrt{-a}t) + \frac{y_1}{\sqrt{-a}} \sinh(\sqrt{-a}t) \\
&= y_0 \frac{e^{\sqrt{-a}t} + e^{-\sqrt{-a}t}}{2} + \frac{y_1}{\sqrt{-a}} \frac{e^{\sqrt{-a}t} - e^{-\sqrt{-a}t}}{2} \\
&= \left( y_0 + \frac{y_1}{\sqrt{-a}} \right) \frac{e^{\sqrt{-a}t}}{2} + \left( y_0 - \frac{y_1}{\sqrt{-a}} \right) \frac{e^{-\sqrt{-a}t}}{2} \\
&= \frac{y_0 \sqrt{-a} + y_1}{2\sqrt{-a}} e^{\sqrt{-a}t} + \frac{y_0 \sqrt{-a} - y_1}{2\sqrt{-a}} e^{-\sqrt{-a}t}.
\end{aligned}$$

Em qualquer um dos casos (para a constante  $a$ ) notemos que as soluções recuperam as soluções do clássico Problema de Valor Inicial de ordem 2.

### 9. Considerações finais

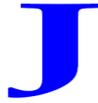
A ideia principal deste texto foi trazer ao leitor um pouco de conhecimento sobre assuntos relacionados com o cálculo fracionário. Cada um destes assuntos pode ter seu estudo aprofundado, já que mencionamos apenas as definições e as propriedades necessárias ao entendimento deste texto.

Deixamos aqui registrado que vários destes assuntos podem render muitas horas e muitas páginas de estudo. Para mais informações sobre a teoria do cálculo fracionário, suas propriedades ou suas consequências, recomendamos principalmente Kilbas (2006) e Podlubny (1999).

### Referências

1. Camargo, Rubens Figueiredo e Oliveira, Edmundo Capelas de. *Cálculo fracionário*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2015. p.
2. Kilbas, Anatoly A., Srivastava, Hari M. & Trujillo, Juan J. *Theory and applications of fractional differential equations*. North-Holland Mathematics studies. Amsterdam: Jan van Mill, 2006.

3. Humbert, P. e Agarwal, R. P. *Sur la fonction de Mittag-Leffler et quelques-unes de ses généralisations*. Bull. Sci. Mathématiques, **77**, 180-185, (1953).
4. Mittag-Leffer, Magnus G. *Sur la nouvelle fonction  $E_\alpha(x)$* . Comp. Rend. Acad. Sci. Paris. **137**. 554-558, 1903.
5. Oliveira, Edmundo Capelas de. *Funções especiais com aplicações*. 2<sup>a</sup> ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2012. 326p.
6. Podlubny, Igor. *Fractional differential equations*. Mathematics in science and engineering, vol 198. Academic press, 1999.
7. Raimbault, J. L. *Transformées de Laplace des fonctions et des distributions: Cours et exercices*. Université de Paris-Sud, 2008.
8. Zill, Denis G. *Equações diferenciais com aplicações em modelagem*. Tradução da 10<sup>a</sup> edição norte-americana. 3<sup>a</sup> ed. São Paulo: Cengage Learning, 2016.



## Números Primos e Números de Mersenne

Doherty Andrade– FEITEP

**RESUMO:** Neste artigo faremos uma breve discussão sobre os números primos e sobre os números de Mersenne, origens e aplicações.

**Palavras Chave:** Números Primos. Primos de Mersenne.

### Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>81</b>
<b>2</b>	<b>Números de Mersenne compostos</b>	<b>86</b>
<b>3</b>	<b>Alguns problemas clássicos</b>	<b>87</b>
<b>4</b>	<b>Conclusão</b>	<b>88</b>
	<b>Referências</b>	<b>88</b>

### 1. Introdução

Os números primos sempre despertaram a curiosidade dos matemáticos. Um número natural  $N$  é dito primo se os seus divisores positivos são apenas 1 e  $N$ . Ou seja, números inteiros que não se fatoram são chamados de primos. Acredita-se que Euclides tenha

sido o primeiro a demonstrar que existem infinitos números primos, há cerca de 2300 anos, na Proposição 20 do Livro IX dos seus *Os Elementos* há uma demonstração para esse resultado.

O argumento utilizado por Euclides é conhecido e admirado até hoje. A argumentação é bastante simples e vamos repeti-la aqui. Ele considerou que se existissem apenas os números primos  $2, 3, 5, \dots, p$ , onde  $p$  seria o maior e último número primo, então o número

$$N = (2 \times 3 \times 5 \times \dots \times p) + 1$$

não seria primo. Note que  $N > p$ . Assim, sendo  $N$  um número composto,  $N$  teria que ser divisível por algum dos primos listados acima:  $2, 3, 5, \dots, p$ . Mas  $N$  não poderia ser divisível por 2, pois dividindo  $N$  por 2 sobraria resto igual a 1. O mesmo ocorre com os outros primos: dividindo  $N$  por qualquer outro primo, sobraria resto igual a 1. Assim,  $N$  seria divisível apenas por 1 e por ele mesmo. Ou seja,  $N$  seria um número primo, o que é um absurdo, pois  $N > p$  e o maior primo é  $p$ . Logo, existem infinitos números primos.

Ao longo do tempo, muitas fórmulas foram propostas para gerar números primos arbitrariamente grandes: Fermat, por exemplo, conjecturou que todo número da forma  $2^{2^n} + 1$  fosse primo, coube a Euler provar que isso não é verdade:  $(2^{2^5} + 1)$  é número inteiro composto, divisível por 641. A maioria dos matemáticos acredita que não exista uma tal fórmula, sendo este um problema ainda sem resposta.

Existem, entretanto, algumas fórmulas que geram famílias interessantes de primos. A fórmula deste tipo que mais nos interessa aqui é  $M_n = 2^n - 1$ , os chamados números de Mersenne. Quando  $M_p$  é primo, dizemos que  $M_p$  é um primo de Mersenne. Parte da

razão pela qual números desta forma são interessantes é que apesar de  $M_p$  nem sempre ser primo é relativamente fácil testar computacionalmente para um dado expoente  $p$ , mesmo bastante grande, se  $M_p$  é primo ou composto. Por isso muitos dos números grandes primos conhecidos atualmente são primos de Mersenne.

Embora números da forma  $M_n = 2^n - 1$  já fossem conhecidos por Euclides, deve-se a Mersenne (1588-1648) sua popularização. Mersenne durante sua vida no mosteiro mantinha correspondência com todos os nomes importantes no domínio do conhecimento. Por meio de correspondências Mersenne transmitia notícias relativas a avanços científicos em troca de mais informações para divulgação. Deste modo, divulgando questões e solicitando contribuições, estimulou o desenvolvimento científico. Depois da sua morte, foram encontradas cartas de 78 correspondentes espalhados pela Europa, entre os quais Fermat na França, Huygens na Holanda, Pell e Hobbes na Inglaterra e Galileu e Torricelli na Itália, entre outros. Mersenne foi um grande interessado no conceito de divisibilidade, em correspondências com Fermat questionava-o sobre a possível factoração de alguns números.

Muitos matemáticos antigos acreditavam que  $2^p - 1$  seria primo para qualquer  $p$  primo considerado. Em 1536, Hudalrichus Regius apresentou a factorização de  $2^{11} - 1 = 2047 = 23 \times 89$ , demonstrando que a convicção era incorreta.

Um número de Mersenne  $M_n$  só tem chance de ser primo, se  $n$  for primo. De fato.

**Proposition 1.1** *Se  $2^n - 1$  é primo, então  $n$  é primo.*

**Demonstração:** Se  $n = ab$  com  $a, b \geq 2$  então  $1 < 2^a - 1 < 2^n - 1$  e  $2^n - 1 = 2^{ab} - 1 = (2^a)^b - 1 \equiv 1^b - 1 = 0 \pmod{2^a - 1}$  e  $2^n - 1$  é

composto. ■

Esse resultado simplifica a busca por números primos de Mersenne: basta procurar por  $M_p$  primo, considerando apenas  $p$  primo. Mas isto não basta, pois pode ocorrer que  $p$  seja primo, mas  $M_p$  não, como já vimos.

Mesmo assim, algumas questões relacionadas aos números primos de Mersenne ainda não foram respondidas. Veja duas delas:

1. existem infinitos primos de Mersenne?
2. existem infinitos primos  $p$  para os quais  $M_p$  seja primo?

Não se sabe responder a essas perguntas, pois não se sabe demonstrar matematicamente.

Conjectura-se, no entanto, que existam infinitos primos  $p$  para os quais tem-se que  $M_p$  seja primo. Por isso há uma busca computacionalmente insana pelos números de Mersenne que são primos. Você pode também participar da descoberta de novos números primos de Mersenne, basta aderir ao projeto GIMPS, *Great Internet Mersenne Prime Search*, acesse [www.mersenne.org](http://www.mersenne.org) e deixe seu computador executar um algoritmo para encontrar novos números primos de Mersenne.

Divulgado recentemente (03/Jan/2018) pelo projeto GIMPS a descoberta de mais um número primo de Mersenne. Chamado simplesmente de

$$M_{77232917} = 2^{77232917} - 1,$$

é o maior número primo de Mersenne conhecido, ele tem mais de 23 milhões de dígitos, quase um milhão a mais de dígitos do que o recorde anteriormente alcançado em 2016. O progresso comutacio-

nal trouxe a possibilidade, e a facilidade, de testarmos conjecturas no campo da teoria dos números.

Os números primos são úteis em criptografia, em que são utilizados na criação de senhas (chaves) para proteger dados confidenciais. A busca por números primos cada vez maiores ou números primos de Mersenne cada vez maiores é só um exemplo nessa corrida. Sem esses números primos não seria possível efetuar compras seguras na internet. Atualmente, são usados números primos com algumas centenas de dígitos, mas à medida que os computadores forem se tornando mais rápidos, números primos maiores serão necessários. A corrida parece que não tem fim.

Essa corrida é altamente tecnológica e exige processadores cada vez mais velozes e confiáveis. Nesta corrida, os primos gêmeos (um par de primos  $p$  e  $q$  cuja diferença entre eles é 2, por exemplo, 5 e 7, 17 e 19) estão relacionados a um episódio importante na indústria dos computadores. Em 1993, o professor de matemática Thomas Nicely, tentando melhorar o cálculo da soma de Brun utilizando cinco computadores 486 e um Pentium, obteve resultados diferentes nas duas máquinas. O resultado obtido pelo computador 486 estava de acordo com os resultados já publicados. Mas os resultados obtidos com o Pentium não concordavam com os dados já publicados. Depois de várias verificações foi identificado o problema: o Pentium apresentava um erro  $10^{10}$  vezes superior ao 486. O prof. Nicely comunicou o fato a Intel, fabricante do processador, que o ignorou. A notícia se espalhou pela internet e o bug foi confirmado por dezenas de pessoas até que a notícia chegou às TVs. Após a IBM anunciar que ia deixar de comercializar PCs com Pentium, a cotação das suas ações da Intel despencaram nas Bolsas de Valores. Algum tempo, a Intel lança no mercado o Pentium II e III sem bugs e reconquista a confiança do mercado.

O sistema de criptografia atualmente usado é o RSA. É um algoritmo de criptografia de dados, que deve o seu nome a três professores do Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT), Ronald Rivest, Adi Shamir e Leonard Adleman. É considerado um dos sistemas mais seguros, já que resistiu a todas as tentativas de quebrá-lo e fundamenta-se em teorias clássicas dos números. Foi também o primeiro algoritmo a possibilitar criptografia e assinatura digital, é uma das grandes inovações em criptografia de chave pública.

## 2. Números de Mersenne compostos

E quanto aos números de Mersenne compostos, são infinitos? Euler, mostrou o seguinte teorema:

**Teorema 1** *Seja  $k > 1$ . Se  $p = 4k + 3$  é primo, então  $2p + 1$  é primo se, e somente se,  $2^p \equiv 1 \pmod{2p + 1}$ .*

Assim, se  $p = 4k + 3$  e  $2p + 1$  são primos, então o número de Mersenne  $2^p - 1$  é composto. Logo, é razoável conjecturar que existem infinitos números de Mersenne compostos, pois existem infinitos pares primos  $(p, 2p + 1)$ .

Primos de Mersenne são interessantes também por causa de números perfeitos. Dado  $n \in \mathbb{N}^*$ , definimos

$$\sigma(n) = \sum_{d|n} d,$$

a soma dos divisores (positivos) de  $n$ . Um inteiro positivo  $n$  é dito perfeito se  $\sigma(n) = 2n$ . Como exemplo, apresentamos os primeiros números perfeitos:  $6 = 1 + 2 + 3 + 6$ ,  $28 = 1 + 2 + 4 + 7 + 14 + 28$ ,  $496$  e  $8128$ .

A última proposição do nono livro dos Elementos de Euclides, sua mais famosa obra, Euclides não só define número perfeito, como enuncia e demonstra um método para calculá-los, método conhecido por fórmula dos números perfeitos euclidianos.

**Proposition 2.1** *Se  $M_p$  é um primo de Mersenne, então  $2^{p-1}M_p$  é um número perfeito.*

*Além disso, todo número perfeito par é da forma  $2^{p-1}M_p$  para algum primo  $p$ , sendo  $M_p$  um primo de Mersenne.*

Entre outros resultados da teoria dos números, Euler demonstrou o recíproco do teorema de Euclides: que todos os números perfeitos pares são da forma  $(2^{k-1} - 1)(2^k - 1)$ .

**Teorema 2** *Se  $n$  é um número perfeito par, então  $n = (2^{k-1} - 1)(2^k - 1)$ , com  $2^k - 1$  número primo.*

### 3. Alguns problemas clássicos

Iniciamos com a conjectura de Goldbach. Ela afirma que se  $n$  é um natural maior do que ou igual a 4, então  $n$  pode ser escrito como soma de dois números primos. Por exemplo,  $6=3+3$  e  $8=3+5$ .

O matemático peruano Harald Helfgott, tornou-se em 2015 o primeiro latino-americano e também o cientista mais jovem a ganhar o Prêmio de Pesquisa Humboldt, concedido pela Fundação Alexander von Humboldt, da Alemanha. Ele recebeu o prêmio por ter respondido uma pergunta que vinha desafiando matemáticos por quase trezentos anos: é verdade que todo número ímpar maior do que cinco pode ser expresso como uma soma de três números primos? Essa é a conjectura fraca de Goldbach.

Em 1742, o matemático prussiano Christian Goldbach enviou uma carta a seu colega suíço Leonhard Euler na qual propunha que todo número par maior do que dois podia ser expresso como a soma de dois números primos. Ainda não foi possível encontrar uma demonstração para esse conjectura. Desde Goldbach e Euler essa conjectura espera por uma demonstração ou refutação.

Tomás Oliveira e Silva, Siegfried Herzog e Silvio Pardi, verificaram em 2014 que até o número  $4 \times 10^{18}$  a conjectura se mantém. Veja o artigo em: *Mathematics of Computation* 83, 2033-2060 (2014). *Empirical verification of the even Goldbach conjecture, and computation of prime gaps up to  $4 \times 10^{18}$ .*

Outra questão em aberto é a conjectura dos números primos gêmeos diz que existem infinitos números primos gêmeos. Ao leitor interessado nos assuntos tratados aqui recomendamos o livro [4] que contém fatos históricos e as demonstrações.

#### 4. Conclusão

Os números naturais, início e origem dos corpos numéricos, apesar de sua simplicidade, escondem muitos mistérios: muitas perguntas permanecem ainda sem respostas. Vimos aqui uma pequena parte dos estudos avançados sobre a teoria dos números primos e suas aplicações: criar senhas invioláveis, testar processadores e arrebanhar uma legião de estudiosos para decifrar seus segredos. Aceita o convite?

#### Referências

1. P. Ribenboim, *The new book of prime number records*, 3rd edition, Springer-Verlag, New York, NY, 1995. pp. xxiv+541, ISBN 0-387-94457-5.

2. Nielsen, Pace P., "Odd perfect numbers have at least nine distinct prime factors," *Math. Comp.*, 76:260 (2007) 2109–2126.
3. McKee, Maggie (14 de maio de 2013). «First proof that infinitely many prime numbers come in pairs». *Nature*. ISSN 0028-0836.
4. H.M. Edwards, *Riemann zeta function*. Academic Press, 1974 [88](#)



## Modelagem Matemática de Dissolução Controlada de Comprimidos

Ricardo V. P. Rezende – E-mail: [rezendervp@gmail.com](mailto:rezendervp@gmail.com) – (DEC–UEM) & Regiani Ap.  
Almeida – E-mail: [regianial@hotmail.com](mailto:regianial@hotmail.com) – (DEQ–UEM)

**RESUMO:** Na indústria farmacêutica, o processo de controle de liberação de um determinado fármaco vem se desenvolvendo nas últimas décadas e por diversos meios. O processo de *Drug Delivery*, como é denominado, permite que se controle a taxa com que o composto esteja à disposição do organismo bem como impedindo-o de ser degradado, ou que um comprimido tenha suas atividades farmacológicas prejudicadas pelo pH estomacal, por exemplo. O presente trabalho apresenta um exemplo desta abordagem propondo um modelo matemático que descreve o tempo de dissolução de um comprimido revestido de forma a controlar o início de sua liberação.

**Palavras-Chave:** Drug-Delivery, Dissolution, Mathematical Modeling, Shrinking Core Model.

### Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>91</b>
<b>2</b>	<b>Definição do Problema</b>	<b>92</b>
<b>3</b>	<b>Modelagem Matemática</b>	<b>93</b>
3.1	Hipóteses adotadas: . . . . .	93
3.2	Etapa I: Dissolução do Revestimento . . . . .	94
3.2.1	Balanço de Massa do Revestimento . . . . .	94
3.3	Etapa II: Dissolução do Fármaco . . . . .	98
3.3.1	Balanço de Massa no Núcleo . . . . .	100
<b>4</b>	<b>Conclusões</b>	<b>102</b>

**Referências**

102

**1. Introdução**

O termo *Drug-Delivery* refere-se a qualquer meio, tecnologia, ou abordagem terapêutica que permita que um determinado fármaco seja administrado de forma controlada de maneira a ter seu efeito terapêutico melhorado e com minoração de efeitos colaterais. Por esta abordagem, drogas muito agressivas podem ser administradas em suas doses mínimas de uma maneira contínua, mas cujo efeito terapêutico se equivale, ou até mesmo supera, a administração em uma única dose, sem contudo, apresentar os efeitos colaterais consequentes de uma alta contração do componente.

Dosadores eletrônicos clínicos, como bombas de infusão de morfina intratecal<sup>1</sup> para controle da dor são um exemplo de sistemas de drug-delivery em que uma dose de morfina é administrada de forma controlada exatamente na quantidade necessária e por um longo período de tempo. Outros exemplos comuns são implantes subcutâneos de anticoncepcionais que permitem a contracepção de forma contínua por períodos que variam de meses até alguns anos; e adesivos de Nicotina para tratamento do vício de tabaco. Estes dois últimos exemplos, ao contrário do primeiro, não dependem de um equipamento implantado ou externo ao paciente. Seus princípios de ação se baseiam em processos físicos de dissolução, absorção e transferência de massa entre o corpo e o suporte que contém o fármaco.

Assim, o entendimento dos mecanismos físicos de transferência e o controle das propriedades que afetam este processo são fatores determinantes da qualidade do sistema de drug-delivery de um determinado medicamento.

Outras abordagens dizem respeito às propriedades organolépticas de um medicamento, pois em sua grande maioria, possuem gosto ou aroma desagradável ao paladar. Para se contornar isto, pode-se revestir o comprimido com uma camada inerte e que não dissolve na boca sob a ação da saliva, e tem seu processo de dissolução apenas no trato gastrointestinal. Todavia, a dissolução para posterior absorção do fármaco propriamente dita ocorre ape-

---

<sup>1</sup> O termo intratecal refere-se a injeções aplicadas diretamente na região subaracnoidea no líquido céfalo raquidiano, evitando a barreira hematoencefálica.

nas após a dissolução desta camada que a mantém isolada. Assim, ela pode interferir no tempo efetivo em que o medicamento começa a agir. E conhecer este tempo é fundamental para se definir uma posologia e saber como isto afeta sua farmacocinética.

E neste contexto, este trabalho apresenta a modelagem matemática do processo de dissolução de um comprimido revestido para se definir o seu tempo de dissolução completa.

## 2. Definição do Problema

Comprimidos podem ser encontrados nos mais variados formatos, mas por simplicidade, considere-se um comprimido de formato esférico, consistindo de uma camada de revestimento de diâmetro  $D_e$ , e um núcleo poroso de diâmetro  $D_i$  de porosidade  $\phi$ , contendo um fármaco qualquer  $B$  de acordo com a Figura (1).

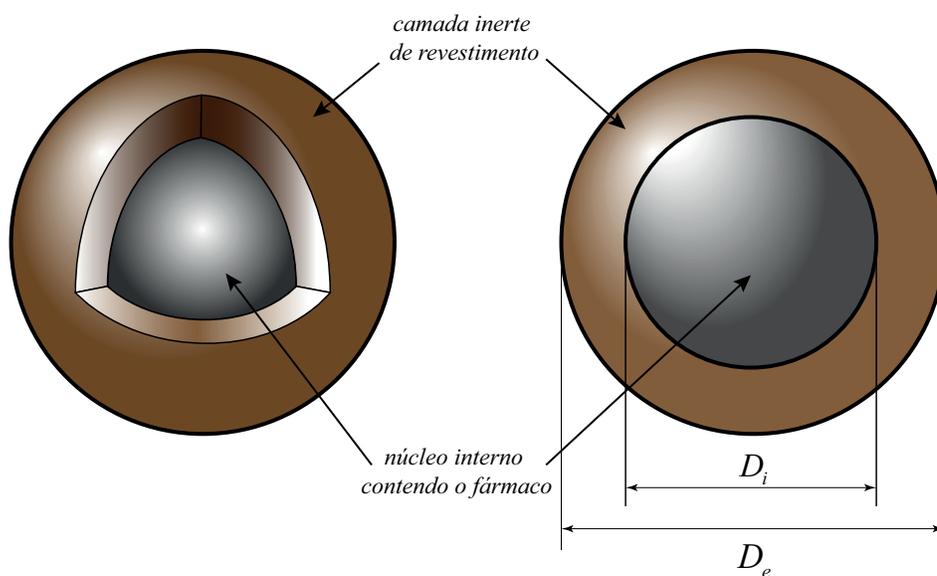


Figura 1: Geometria do comprimido em formato esférico composto de uma camada de revestimento e um núcleo poroso.

A camada externa é inerte e se dissolve apenas na presença de um ambiente ácido como o suco gástrico. A camada de revestimento tem a função de isolar o núcleo que contém o medicamento tornando-o palatável, e

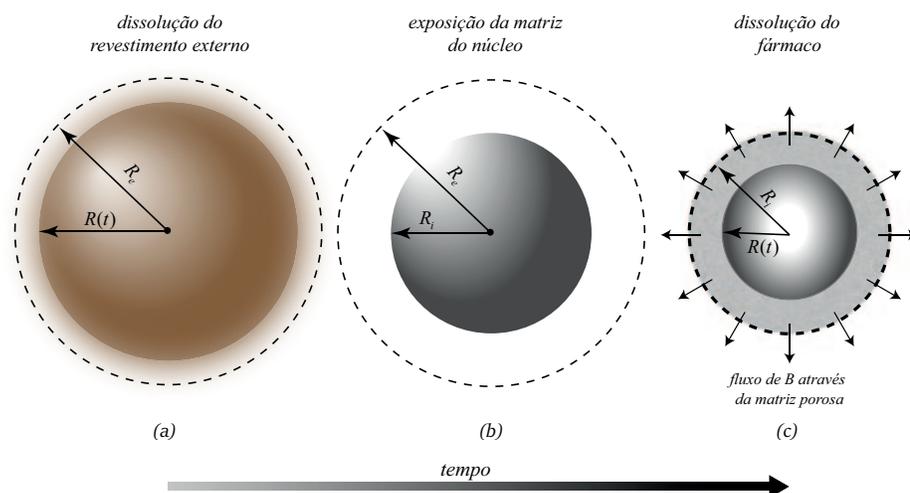


Figura 2: Ilustração do processo de dissolução do comprimido revestido. O processo inicia-se com a dissolução do revestimento  $M$  (a). Com a dissolução completa, a matriz do núcleo é exposta (b) e inicia-se a dissolução do fármaco  $B$ , o processo de dissolução deixa para trás somente a matriz porosa inerte e um núcleo ainda não dissolvido (c).

impedindo que o fármaco comece a ser liberado na boca assim que entra em contato com a saliva.

O núcleo interno é formado por uma matriz inerte porosa insolúvel e inerte que serve como veículo e, por sua natureza porosa, impede a dissolução do fármaco pela ação do suco gástrico, controlando a velocidade com que ele se dissolve.

Assim, o processo ocorre em duas etapas: primeiramente dissolução instantânea da camada externa e, após isto, o fármaco começa a ser liberado gradualmente pela matriz porosa do núcleo como ilustrado na Figura (2).

### 3. Modelagem Matemática

A fim de se obter uma solução fechada para o problema, algumas hipóteses devem ser consideradas. Estas hipóteses são listadas a seguir.

#### 3.1. HIPÓTESES ADOTADAS:

1. O comprimido está imerso no suco gástrico (solução de ácido clorídrico);

2. A solubilidade do revestimento e do fármaco no suco gástrico são elevadas;
3. A dissolução da camada de revestimento se dá por transferência de massa;
4. A cada unidade de massa de solução que penetra a camada de revestimento, uma igual quantidade de material da camada se dissolve na solução;
5. O tempo gasto no processo é diretamente proporcional à taxa de dissolução;
6. O fármaco não se dissolve enquanto houver o revestimento.
7. O ambiente estomacal pode ser considerado um reator em batelada, ou seja, as reações se dão a volume constante em ciclos sem períodos de influxo ou efluxo do sistema;
8. O processo de mistura é lento e moderado em função do peristaltismo;
9. O comprimido possui diâmetros pequenos da ordem de alguns milímetros;
10. A temperatura de operação é constante em torno de 37C;
11. O pH do estômago não é afetado pela presença do comprimido;
12. As propriedades físicas e de transporte são constantes.

### 3.2. ETAPA I: DISSOLUÇÃO DO REVESTIMENTO.

3.2.1. *Balanço de Massa do Revestimento.* De acordo com as hipóteses a taxa de variação da massa do revestimento  $M$  é diretamente proporcional à taxa de dissolução  $R_d''$ , ou seja,

$$\frac{dm_M}{dt} = a \cdot R_d'' \quad (1)$$

onde  $m_M$  representa a massa do revestimento;  $a$  a área da superfície em contato com a solução; e  $R_d''$  a taxa de dissolução por unidade de área.

De forma geral, a massa  $m_M$  é o volume multiplicado pela massa específica  $\rho_M$ ,

$$m_M = \rho_M \cdot \frac{\pi D^3}{6}, \quad (2)$$

a área superficial é dada por  $\pi D^2$ . Assim, pode-se escrever o balanço de massa em termos da taxa de decremento do diâmetro  $D$  :

$$\frac{dD}{dt} = -\frac{2}{\rho_M} \left( -R_d'' \right). \quad (3)$$

A taxa de dissolução do revestimento  $M$ ,  $W_A$ , deve ser igual à taxa com que a solução do suco gástrico  $A$  é transferida para a camada de revestimento, logo,

$$W_A = k_c (C_A - C_{A_s}) = -R_d'' \quad (4)$$

onde  $C_A$  e  $C_{A_s}$  representam a concentração de ácido clorídrico no revestimento e no suco gástrico, respectivamente; e  $k_c$  representa o coeficiente de transferência de massa.

A taxa de dissolução pode ser considerada diretamente proporcional à uma constante de dissolução,  $k_d$ , e a concentração de solvente  $A$  (solução de ácido clorídrico) que penetra o revestimento pela superfície, portanto,

$$\left( -R_d'' \right) = k_d C_{A_s}, \quad (5)$$

onde sinal negativo indica que o *fluxo de massa se dá para fora da camada*. Igualando as Equações (4) e (5),

$$k_c (C_A - C_{A_s}) = k_d C_{A_s}, \quad (6)$$

ou seja,

$$C_{A_s} = \frac{k_c}{k_d + k_c} \cdot C_A. \quad (7)$$

Substituindo este resultado na Equação (5), define-se a taxa de dissolução em função da concentração de solvente permeando o revestimento:

$$\left( -R_d'' \right) = \frac{k_d k_c}{k_d + k_c} \cdot C_A. \quad (8)$$

Nesta etapa, deve-se avaliar em que regime se dá o processo. As hipóteses (2) e (10), devido a alta solubilidade e a temperatura constante,

permitem considerar que a dissolução de  $M$ ,  $R_d''$  é muito mais rápida quando comparada à transferência de massa do  $W_A$ , o que implica em  $k_d \gg k_c$ . E isto permite afirmar que a transferência de massa é a etapa controladora, ou seja, a que determina a velocidade efetiva do processo.

Uma manipulação algébrica da Equação (8) permite escrever,

$$\left(-R_d''\right) = \frac{k_c}{1 + \frac{k_c}{k_d}} \cdot C_A, \quad (9)$$

e com  $k_d \gg k_c$ , temos  $\frac{k_c}{k_d} \ll 1$ , logo

$$\left(-R_d''\right) = k_c C_A. \quad (10)$$

A determinação do coeficiente de transferência de massa é um dos pontos mais críticos dos modelos de transferência, pois depende de diversos fatores como viscosidade do meio, difusividade das espécies químicas envolvidas, área e morfologia das superfícies em que a transferência se dá, se o regime do escoamento é laminar ou turbulento. Há na literatura diversos métodos para sua determinação e um grande número de correlação empíricas e teóricas. Analiticamente, pela teoria da camada limite ([Batchelor, 1967](#); [Bird et al., 2002](#)), é possível demonstrar que

$$Sh \sim Re^n Sc^m, \quad (11)$$

onde  $Sh = \frac{k_c D_p}{D_{AM}}$  é o número de Sherwood que mede a razão entre o fluxo de massa convectivo<sup>2</sup>, dado por  $k_c D_p$ , onde  $D_p$  é a escala característica ou o diâmetro de partícula, e o fluxo difusivo, onde  $D_{AM}$  é o coeficiente de difusão da espécie química  $M$  em  $A$ . O número de Reynolds,  $Re = \frac{u D_p}{\nu}$  representa razão entre os fluxos de quantidade de movimento advectivo e difusivo (tensões); e o número de Schmidt,  $Sc = \frac{\nu}{D_{AM}}$  representa a razão entre as espessuras das camadas limites hidrodinâmica e de concentração. Estes grupos adimensionais determinam qual processo é predominante em determinado fenômeno físico.

<sup>2</sup> O termo Convecção denomina qualquer processo físico de transferência de calor ou massa em que pode ou não haver a participação ou interferência do escoamento; enquanto o transporte propriamente dito de uma propriedade qualquer com velocidade  $u$  em um escoamento, seja ela calor, ou espécie química é denominado Advecção.

A correlação Frössling (Fogler, 2016) fornece uma expressão fechada para o número de Sherwood:

$$Sh = 2 + Re^{1/2} Sc^{1/3}, \quad (12)$$

e, de acordo com as hipóteses (7), (8) e (9), temos que  $Re \approx 0$ , pois a velocidade  $U$  é quase nula devido ao regime de mistura lento e moderado e a falta de fluxos de entrada e saída, e o diâmetro de partícula é muito pequeno. Assim,

$$Sh = \frac{k_c D_p}{D_{AM}} \cong 2, \quad (13)$$

o que permite determinar o coeficiente transferência de massa em função do diâmetro de partícula e do coeficiente de difusão, o qual é muito mais simples de ser obtido em laboratório ou por via analítica; e depende dos compostos envolvidos, ou seja, pode ser calibrado de acordo com a morfologia do revestimento e do núcleo de suporte. Ao contrário de  $k_c$  que depende de fatores externos o regime de escoamento. Portanto,

$$k_c = \frac{2D_{AM}}{D_p}. \quad (14)$$

Então,

$$\left(-R_d''\right) = \frac{2D_{AM}}{D_p} C_A, \quad (15)$$

que substituída na Equação (3)

$$\frac{dD}{dt} = - \left( \frac{4D_{AM}}{\rho_M D} \right) C_A, \quad (16)$$

está sujeita a  $D(t=0) = D_e$  no início, e a  $D(t=t_M) = D_i$  ao fim da dissolução completa da camada de revestimento. A concentração de solvente  $A$  ainda é  $C_A = C_A(t)$ , contudo, pela hipótese (11) o pH não é afetado, ficando em torno de  $pH = 1,0$ , logo, a concentração de ácido clorídrico na solução é constante e pode ser obtida pela definição do pH:

$$pH = -\log [H^+], \quad (17)$$

onde  $[H^+]$  é a concentração de íon hidrônio dissociado na solução, e igual à concentração de ácido clorídrico que resulta em cerca de 0,1 mol/litro, ou seja,  $C_A = C_A^0 = 0,1 \text{ molar}$ . Com isto temos todos os termos constantes a exceção de  $D$ , e assim,

$$\left(D_e^2 - D_i^2\right) = \left(\frac{8D_{AM}C_A^0}{\rho_M}\right) t_M. \quad (18)$$

Então, o tempo total de dissolução  $t_M$  da camada de revestimento é dado por,

$$t_M = \alpha \left(D_e^2 - D_i^2\right), \quad (19)$$

onde  $\alpha = \frac{\rho_M}{8D_{AM}C_A^0}$ , e com  $D_e > D_i$ . Após este processo, tem início a dissolução do fármaco.

3.3. ETAPA II: DISSOLUÇÃO DO FÁRMACO. A abordagem empregada é a do modelo de núcleo não reagido de Levenspiel (*shrinking core model*) (Levenspiel, 1962; Fogler, 2016), considerando que a etapa limitante é o processo de difusão do composto contido na matriz porosa, e quaisquer outros processos como reações químicas e processos de adsorção tem um tempo característico muito mais rápido. E todo e qualquer parcela de um componente que vença a resistência difusiva é rapidamente reagido, adsorvido ou transferido, e pela hipótese (2), o fármaco, representado por  $B$ , solubiliza-se rapidamente e o modelo pode ser empregado. Pela Lei de Fick, o fluxo difusivo de  $A$  na direção radial é dado por (Cremasco, 2016; Bird et al., 2002),

$$W_{Ap} = -D_{AB} \frac{dC_A}{dr}, \quad (20)$$

em unidades de  $mol/min \cdot cm^2$ , ou seja, fluxo molar.

A Figura (3) ilustra o mecanismo de dissolução do fármaco e do solvente no núcleo da matriz porosa.

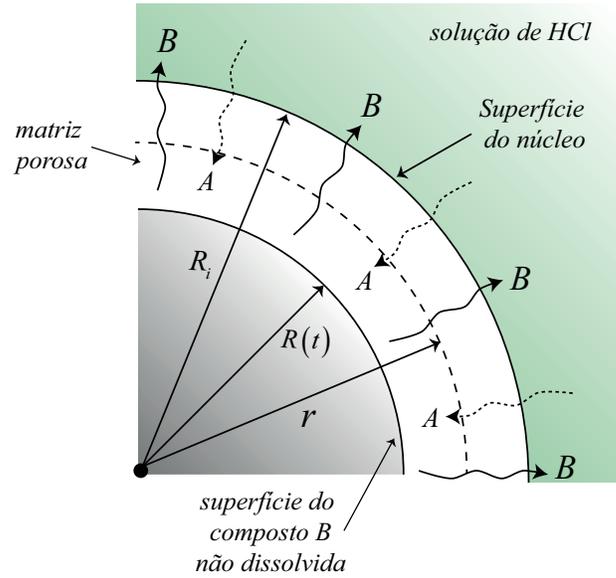


Figura 3: Modelo de núcleo não reagido: Processo de dissolução do fármaco.

Pelo princípio de conservação da massa, o fluxo difusivo que atravessa uma superfície  $r$  deve ser o mesmo que atravessa a superfície  $r + \Delta r$ , assim

$$W_{A_p} 4\pi r^2 \Big|_{r+\Delta r} - W_{A_p} 4\pi r^2 \Big|_r = 0, \quad (21)$$

dividindo ambos os membros por  $4\pi\Delta r$  e se calcularmos o limite quando  $\Delta r \rightarrow 0$ , obtemos (Pinho and Prazeres, 2008)

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \left( \frac{W_{A_p} 4\pi r^2 \Big|_{r+\Delta r} - W_{A_p} 4\pi r^2 \Big|_r}{4\pi\Delta r} \right) = \frac{d}{dr} (r^2 W_{A_p}) = 0, \quad (22)$$

e substituindo a Equação (20) neste resultado, tem-se

$$\frac{d}{dr} \left( -r^2 D_{AB} \frac{dC_A}{dr} \right) = 0, \quad (23)$$

e, pela hipótese (12),

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dC_A}{dr} \right) = 0, \quad (24)$$

com solução igual a

$$C_A = C_2 - \frac{C_1}{r}. \quad (25)$$

A Equação (25) está sujeita às seguintes condições de contorno:

- Na superfície do núcleo da matriz porosa, em  $r = R_i$  a concentração de  $A$  é igual à concentração da solução  $C_A^0$ ;
- E na superfície do núcleo do fármaco  $B$  ainda não dissolvido, em  $r = R(t)$  a concentração de  $A$  é igual a zero.

Esta última condição se baseia no mesmo princípio da hipótese (2) e (4). Exatamente na superfície do núcleo, quando a solução de  $A$  se difunde no sólido em uma superfície de espessura infinitesimal  $dr$ , esta mesma superfície  $B$  solubiliza-se muito rapidamente, expondo uma nova camada que no instante  $t$  ainda não contém  $A$ .

Assim,

$$\frac{C_A}{C_A^0} = \frac{\left(\frac{1}{R(t)} - \frac{1}{r}\right)}{\left(\frac{1}{R(t)} - \frac{1}{R_i}\right)}. \quad (26)$$

De posse do perfil de concentração de  $C_A$  na direção radial, a Equação (26) pode ser substituída na Equação (20), resultando em

$$W_{A_p} = -\frac{D_{AB}C_A^0}{\left(\frac{1}{R(t)} - \frac{1}{R_i}\right)} \cdot \frac{1}{r^2}, \quad (27)$$

e em termos do diâmetro,

$$W_{A_p} = -\frac{2D_{AB}C_A^0}{\left(\frac{1}{D(t)} - \frac{1}{D_i}\right)} \cdot \frac{1}{D^2}, \quad (28)$$

onde  $D_i > D > D(t)$ , ou seja, a região clara na Figura (3).

**3.3.1. Balanço de Massa no Núcleo.** De maneira similar ao efetuado na Etapa I, a variação da massa de  $B$  pode ser escrita como a variação da massa no núcleo

$$\frac{dm_B}{dt} = a \cdot (-R_B''), \quad (29)$$

e, portanto,

$$\frac{dD}{dt} = \frac{2}{\rho_B \phi} (-R_B''), \quad (30)$$

onde  $\rho_B$  é a massa específica do fármaco, e  $\phi$  a porosidade da matriz de suporte. O produto  $\rho_B \phi$  representa a massa do fármaco  $B$  que ocupa os poros

da matriz por unidade de volume, enquanto a massa da própria matriz por unidade de volume será dada por  $\rho_{Matriz}(1 - \phi)$ . Sendo a difusão a etapa controladora,

$$\left(-R_B''\right) = -W_{Ap}\Big|_{D=D(t)}, \quad (31)$$

assim, de (28),

$$\left(-R_B''\right) = \frac{2D_{AB}C_A^o}{\left(\frac{1}{D} - \frac{1}{D_i}\right)} \cdot \frac{1}{D^2} = \frac{2D_{AB}C_A^o}{\left(D - \frac{D^2}{D_i}\right)}. \quad (32)$$

Substituindo este resultado na Equação (30) obtemos

$$\frac{dD}{dt} = \left(\frac{4D_{AB}C_A^o}{\rho_B\phi}\right) \cdot \left(\frac{1}{D - \frac{D^2}{D_i}}\right), \quad (33)$$

sujeita a  $D(t=0) = D_i$ , considerando que  $t = 0$  leva em conta somente o início do processo de dissolução do fármaco uma vez transcorrido o intervalo de tempo  $t_M$  para dissolução do revestimento. Assim, a partir da solução da Equação (33)

$$t = \left(\frac{\rho_B\phi}{24D_{AB}C_A^o}\right) \cdot D_i^2 \left[1 - 3\left(\frac{D}{D_i}\right)^2 + 2\left(\frac{D}{D_i}\right)^3\right]. \quad (34)$$

Considerando que quando  $D = 0$  atingir-se-á o tempo total  $t_D$  para a dissolução completa do fármaco  $B$ . Assim,

$$t_D = \beta D_i^2, \quad (35)$$

onde  $\beta = \left(\frac{\rho_B\phi}{24D_{AB}C_A^o}\right)$ .

E deste modo, o tempo total para a dissolução do comprimido é dado pela soma do tempo de cada etapa, assim,

$$t_{Total} = \alpha \left(D_e^2 - D_i^2\right) + \beta D_i^2, \quad (36)$$

ou, reorganizando os termos resulta,

$$t_{Total} = \alpha D_e^2 + \gamma D, \quad (37)$$

onde  $\gamma = \beta - \alpha$ .

#### 4. Conclusões

Um modelo matemático para o processo de dissolução de comprimidos revestidos foi proposto para determinar o seu tempo de dissolução completa no estômago. O modelo se baseia em processos de transferência de massa, difusão e análise de escala. Por meio da solução analítica encontrada, é possível determinar o tempo para a dissolução do comprimido no estômago e, dispondo-se de diversas combinações de diâmetros e ajustando-se as constantes  $\alpha$  e  $\beta$  de acordo com a combinação correta dos parâmetros físicos durante o processo de fabricação, pode-se controlar quando o medicamento irá começar a se dissolver decorrido o tempo de dissolução do revestimento, e por quanto tempo o princípio ativo estará disponível para absorção pelo organismo.

#### Referências

- Batchelor, G. K., 1967. An introduction to fluid dynamics. U.P., Cambridge, 67021953 B67-17981 75/- (George Keith) by G.K. Batchelor. 24 plates, diags. 24 cm. Bibliography: p. 604-608. [96](#)
- Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N., 2002. Transport phenomena, 2nd Edition. J. Wiley, New York, 2001023739 (Robert Byron), R. Byron Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot. ill. ; 26 cm. Includes bibliographical references and indexes. [96](#), [98](#)
- Cremasco, M. A., 2016. Fundamentos de Transferência de Massa, 3rd Edition. Blucher, São Paulo. [98](#)
- Fogler, H. S., 2016. Elements of chemical reaction engineering, fifth edition. Edition. 2015032892 H. Scott Fogler. 27 cm Includes index. [97](#), [98](#)
- Levenspiel, O., 1962. Chemical reaction engineering; an introduction to the design of chemical reactors. Wiley, New York,, 62015185 illus. 24 cm. Includes bibliography. [98](#)
- Pinho, M. N. d., Prazeres, D. M. F., 2008. Fundamentos de Transferência de Massa. IST - Instituto Superior Técnico. [99](#)



## Simulação Numérica da Dispersão de CO<sub>2</sub> na atmosfera a partir de uma Chaminé Industrial

Regiani Ap. de Almeida (DEQ–UEM) & Ricardo V. P. Rezende (DEC–UEM)

**RESUMO:** O emprego de modelos matemáticos têm auxiliado como ferramenta complementar às técnicas observacionais nas medições da dispersão de poluentes emitidos por chaminés ou dutos de processos industriais como usinas termelétricas e incineradores de resíduos. Neste trabalho é apresentado um modelo matemático, bem como sua solução pelo método dos volumes finitos, para a medição da concentração de CO<sub>2</sub> e da variação de temperatura nas proximidades de uma chaminé industrial. Foram empregadas as equações de Navier-Stokes juntamente com a equação de concentração de espécies e da energia para verificar a influência da velocidade do vento, a concentração de CO<sub>2</sub> e a temperatura no domínio computacional contendo a chaminé. Para as condições estudadas, obteve-se que há aquecimento e dispersão de CO<sub>2</sub> em uma maior área do domínio computacional quando a velocidade de entrada do vento é menor.

**Palavras Chave:** Equação Diferencial Parcial, Dispersão de Poluentes, Fluidodinâmica Computacional.

### Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>104</b>
<b>2</b>	<b>Modelagem Matemática</b>	<b>106</b>
<b>3</b>	<b>Método dos Volumes Finitos Baseado em Elementos (EbFVM)</b>	<b>107</b>

DISPERSÃO DE CO <sub>2</sub> NA ATMOSFERA	104
<b>4 Domínio Computacional e Condições de Contorno</b>	<b>109</b>
4.1 Detalhamento Numérico . . . . .	111
<b>5 Resultados e Discussão</b>	<b>112</b>
5.1 Validação do Modelo . . . . .	112
5.2 Distribuição de Temperatura . . . . .	113
5.3 Distribuição da Concentração de CO <sub>2</sub> . . . . .	115
<b>6 Conclusões</b>	<b>119</b>
<b>Referências</b>	<b>120</b>

## 1. Introdução

A poluição do ar é um grande problema com forte impacto no meio ambiente e na saúde humana principalmente em áreas urbanas onde a emissão de poluentes é maior. O dióxido de carbono é encontrado naturalmente na atmosfera, vários organismos o liberam a partir do processo de respiração. Porém, a alta concentração em que se encontra ajuda a causar o aquecimento do planeta, pois o CO<sub>2</sub> faz parte do grupo dos gases de efeito estufa, os quais absorvem uma parte dos raios do sol e os redistribuem em forma de radiação na atmosfera. Este efeito tem se intensificado bastante devido a ações humanas tais como a queima de florestas e a queima de combustíveis fósseis por automóveis e indústrias (Toja-Silva et al., 2018).

Os resultados do quarto relatório de avaliação das mudanças climáticas do planeta (IPCC-AR4) (IPCC/ONU, 2007) apontam

para um aumento médio global das temperaturas em até 4C até 2100 e que grande parte do aumento de temperatura nos últimos 50 anos foi provocada por atividades humanas. Ainda segundo o IPCC-AR4, a concentração de CO<sub>2</sub> na atmosfera aumentou nos últimos 650.000 anos, de 180 ppm para 300 ppm e foi estipulado um limite máximo simbólico de 400 ppm para tal concentração.

Assim, é importante a avaliação e a previsão do comportamento das liberações de poluentes na atmosfera. Para tanto, os métodos experimentais de medições locais e instantâneas das emissões de poluentes e seus efeitos na saúde humana tem sido utilizados juntamente com modelos matemáticos. A fluido dinâmica computacional (Computational Fluid Dynamics - CFD) vem sendo empregada para simular emissões de gases tanto em túneis de vento como em áreas urbanas reais, com o aumento do poder computacional, o CFD tornou-se uma ferramenta comum e versátil para o estudo da poluição do ar (Vervecken et al., 2015; Takano and Moonen, 2013). As simulações são usadas para analisar a qualidade do ar em tempo real, administrar liberações acidentais e avaliar áreas de risco, bem como avaliar a contribuição de uma única fonte em um conjunto de focos poluidores.

As equações de Navier-Stokes descrevem o movimento de um fluido em um conjunto  $\Omega$  de  $\mathbb{R}^3$ . Porém existem poucas soluções regulares para escoamentos com aplicação prática. Por exemplo, não existe uma solução analítica para o escoamento em torno de um corpo como um carro ou um avião. E, para resolvê-las numericamente, é necessário transformar essas equações diferenciais em equações algébricas, através da aplicação de um método numérico. Assim, torna-se viável a simulação numérica de escoamentos sobre diversos tipos de geometrias empregando métodos como: diferenças finitas, método dos elementos finitos e dos volumes finitos. Em

particular, no método dos volumes finitos, a integração da equação diferencial é feita na sua forma conservativa, ou seja, aquela em que na equação diferencial as variáveis do fluxo aparecem dentro do operador derivada, e é feita sobre cada volume de controle discreto no espaço e no tempo (Rezende, 2008).

Neste trabalho a emissão de CO<sub>2</sub> a partir de uma chaminé do tipo industrial foi simulada por técnicas de CFD. Foi criado um domínio retangular contendo a chaminé e uma construção representativa de um prédio à uma determinada distância da chaminé, com o objetivo de analisar, delimitar e quantificar o calor e a concentração de gás gerados pela chaminé e que podem atingir a construção. O modelo foi resolvido pelo Método dos Volumes Finitos baseado em Elementos (EbFVM) conforme Maliska (2004) e com o emprego do software ANSYS CFX Release 18.1.

## 2. Modelagem Matemática

As equações tridimensionais de conservação da massa, quantidade de movimento, energia e concentração de CO<sub>2</sub> são dadas pelas equações (1), (2), (3) e (4):

$$\frac{\partial (\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla p + \nabla \cdot \left( \mu (\nabla u + \nabla u^T) - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot u \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u h) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + u \cdot \nabla p \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho y_1)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u y_1) = -\nabla \cdot (\rho D_1 \nabla y_1) \quad (4)$$

onde  $u \in \mathbb{R}^3$  é o vetor velocidade;  $\rho$  é a densidade da mistura ar e CO<sub>2</sub>;  $p$  a pressão;  $\mu$  é a viscosidade, que é uma medida da resistên-

cia de um fluido às forças de cisalhamento;  $\delta$  o delta de Kronecker;  $\lambda$  a condutividade térmica da mistura, que é a propriedade de um fluido que caracteriza sua capacidade de transferir calor por condução;  $D_1 = 1.6 \times 10^{-5} m^2 s^{-1}$  é o coeficiente de difusão molecular do CO<sub>2</sub> no ar; e  $y_1$  é a fração mássica de CO<sub>2</sub>;  $y_2$  é a fração mássica do ar que obedece à equação algébrica:  $y_2 = 1 - y_1$ . Sendo ainda que a densidade, a viscosidade e a condutividade térmica de cada componente foram consideradas constantes, e para a mistura foram calculadas de acordo com a regra de mistura ideal conforme equações (5), (6) e (7) para a densidade da mistura, viscosidade da mistura e condutividade térmica da mistura respectivamente:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{y_1}{\rho_1} + \frac{y_2}{\rho_2} \quad (5)$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{y_1}{\mu_1} + \frac{y_2}{\mu_2} \quad (6)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{y_1}{\lambda_1} + \frac{y_2}{\lambda_2} \quad (7)$$

### 3. Método dos Volumes Finitos Baseado em Elementos (EbFVM)

No método EbFVM, as equações diferenciais são integradas em cada volume de controle em uma malha de cálculo criada sobre o domínio computacional, os pontos de intersecção da malha são denominados nós e estes definem o centro do volume de controle o qual é montado entorno do nó. Em seguida procede-se à discretização das equações, gerando assim, um conjunto de equações algébricas onde as incógnitas são os valores médios das variáveis físicas de interesse calculados no centro das células. Finalmente a reso-

lução dos sistemas de equações algébricos por métodos numéricos resulta na solução sob a forma discreta dos valores das grandezas.

Esta formulação na qual o centro dos volumes de controle são posicionados sobre os nós da malha é chamada formulação *cell-vertex*. E como mostra a Figura 1, o volume de controle é formado pelo conjunto de sub volumes adjacentes que envolvem um nó. O fluxo que atravessa as fronteiras de um volume de controle é calculado nos pontos de integração  $p_{ij}$  (onde  $i$  e  $j$  são dependentes da enumeração dos nós na malha) na fronteira entre dois sub volumes de controle adjacentes dentro de um mesmo elemento.

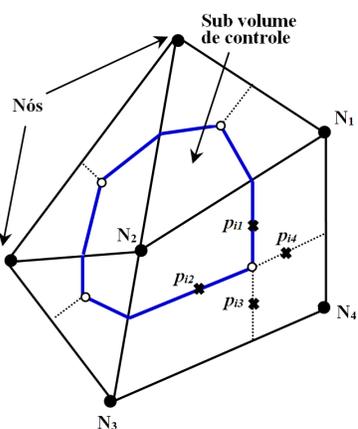


Figura 1: Montagem de um volume de controle (região interior ao contorno azul em torno do nó  $N_2$ ) à partir de três elementos triangulares e um elemento quadrangular.

As equações diferenciais (1) à (4) são integradas sobre cada volume de controle e o Teorema de Divergência de Gauss é aplicado para converter integrais de volume envolvendo operadores de divergência e gradiente em integrais de superfície, como exemplo,

a equação (1) fica:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_s \rho u_j dn_j = 0 \quad (8)$$

onde  $V$  e  $s$  denotam respectivamente as regiões de integração de volume e de superfície, e  $dn_j$  são os componentes cartesianos diferenciais do vetor normal à superfície externa. A partir da equação (8), depois de discretizar a integral de volume e de superfície, tem-se:

$$\Delta V \left( \frac{\rho - \rho^o}{\Delta t} \right) + p_i \sum (\rho u_j \Delta n_j)_{p_i} = 0 \quad (9)$$

onde agora,  $\Delta V$  é o volume de controle,  $\Delta t$  é o passo de tempo,  $\Delta n_j$  é o vetor discreto normal à superfície externa, o subscrito  $p_i$  denota avaliação em um ponto de integração. A soma é sobre todos os pontos de integração do volume de controle e o sobrescrito  $o$  refere-se ao nível de tempo anterior. Assim, após todas as equações serem discretizadas, são consideradas as condições de contorno e iniciais e são aplicados esquemas numéricos específicos para a obtenção da solução discreta.

#### 4. Domínio Computacional e Condições de Contorno

O domínio computacional tem dimensões  $500m \times 300m \times 100m$ . Dentro deste domínio foram construídos uma chaminé de  $3m$  de diâmetro com  $50m$  de altura e um prédio de base  $25m \times 40m$  e  $40m$  de altura. Os detalhes da geometria considerada juntamente com suas dimensões podem ser vistos na Figura 2.

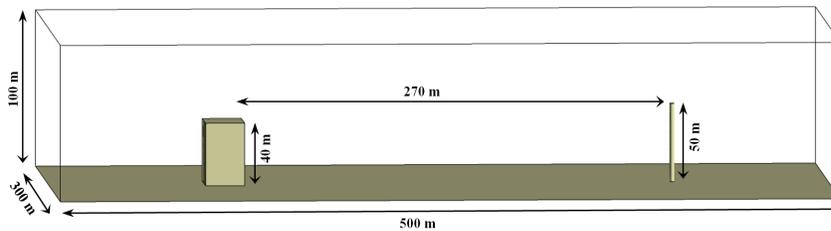


Figura 2: Geometria do domínio computacional

A partir do software ICEM-CFD, uma malha foi gerada com aproximadamente 250 mil elementos tetraédricos e 56 mil nós. Detalhes das superfícies da malha podem ser vistos na Figura (3).

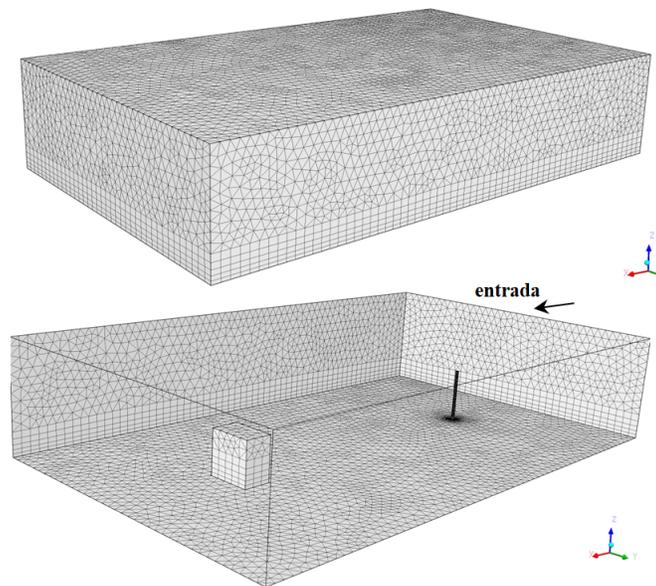


Figura 3: Vistas da malha tetraédrica empregada

As condições de contorno para as equações (1)-(4) na superfície de entrada do domínio, foram de velocidade de entrada do vento  $u_\infty$  prescrita e da mistura de gases que saem da chaminé  $u_0$ ,

a direção da velocidade é perpendicular à entrada do domínio. Foram analisados três casos, nos quais  $u_\infty$  foi variada em  $1\text{ m/s}$ ,  $2\text{ m/s}$  e  $3\text{ m/s}$ , respectivamente, e nas laterais do domínio foi prescrita a temperatura de  $26,85^\circ\text{C}$  ( $300\text{ K}$ ), e fração de  $0\%$  de CO<sub>2</sub>. A velocidade na saída da chaminé,  $u_0 = 2\text{ m/s}$  foi mantida constante em todas as simulações. Ainda na saída da chaminé foi considerada uma fração de CO<sub>2</sub> de  $98\%$  e  $2\%$  de ar. A temperatura com a qual o fluxo sai da chaminé é de  $426,85^\circ\text{C}$ . As condições de contorno nas outras paredes laterais do domínio foram de abertura ou *opening*, com temperatura  $26,85^\circ\text{C}$ , fração de  $0\%$  de CO, e com pressão estática prescrita nula, esta opção de condição de contorno é usada no software quando a direção do fluxo em relação à fronteira é desconhecida, e pode ocorrer fluxo reverso, fazendo-a atuar como uma condição de entrada. A pressão de referência no domínio foi de  $1\text{ bar}$ .

Para a inicialização da solução no domínio foi considerada velocidade e pressão nulas, temperatura de  $26,85^\circ\text{C}$  e fração de  $0\%$  de CO<sub>2</sub>.

4.1. DETALHAMENTO NUMÉRICO. O Ansys CFX usa uma método ILU (Incomplete Lower Upper) com AMG (Algebraic Multigrid), para resolver o sistema discreto de equações que é linearizado. É um solver iterativo no qual a solução exata das equações é aproximada durante várias iterações. O método iterativo é preferido, pois o sistema é em sua natureza não-linear e a cada ciclo iterativo, a matriz de coeficientes é atualizada com os novos campos disponíveis. Logo, o uso de métodos diretos com solução exata seria ineficaz, e computacionalmente mais custoso. O sistema linearizado de equações discretas, pode ser escrito na forma de matricial:

$$[A] [\varphi] = [b] \quad (10)$$

onde  $[A]$  é a matriz dos coeficientes,  $[\varphi]$  é o vetor solução e  $[b]$  armazena as condições de contorno, iniciais e os valores disponíveis das iterações anteriores.

Para a solução do sistema linear foi empregado o passo de tempo  $\Delta t = 0.8 s$ , foi usado esquema de advecção *high resolution* e esquema transiente foi um Euler regressivo de segunda ordem. Para avaliar a convergência, balanços de fluxo são avaliados durante a montagem das equações de conservação e, são baseados na solução do tempo anterior. O critério de convergência é baseado nestes balanços de fluxo (ANSYS, 2017). E a convergência requerida depende do propósito da simulação, Para o ANSYS CFX, um erro abaixo de  $10^{-4}$  é considerado suficiente para muitas aplicações de engenharia e é o que foi considerado neste trabalho. Para o cálculo de todas as simulações foi usado um processador Intel Core i7-7700HQ CPU 2.80 GHz e memória RAM de 16 GB e sistema operacional de 64 bits. Para um tempo físico de análise de 50 min, o tempo computacional para cada simulação foi de 3,93 horas. Para o pós-processamento dos resultados foi usado o software ANSYS CFD-Post Release 18.1.

## 5. Resultados e Discussão

5.1. VALIDAÇÃO DO MODELO. Conforme o trabalho de [Mahjoub Said et al. \(2005\)](#), que fez um estudo numérico e experimental da magnitude da velocidade e da pluma de um poluente em níveis próximos ao topo de uma chaminé, em condições similares às do presente trabalho, porém empregando o modelo de turbulência Reynolds Stress Model. Foram comparadas as características geométricas da pluma

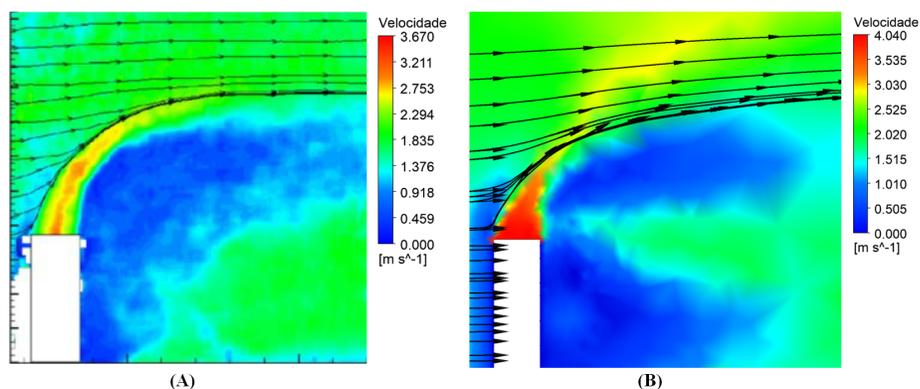


Figura 4: Comparativo da magnitude da velocidade na saída da chaminé; (A) Trabalho de [Mahjoub Said et al. \(2005\)](#); (B) Este trabalho.

do poluente a partir das linhas de corrente do escoamento e da magnitude da velocidade na região da saída da chaminé. A Figura 4 mostra os campos de velocidade para o trabalho experimental da literatura (A) e do presente trabalho (B) para a condição de contorno  $u_\infty = 2 \text{ m/s}$  sendo  $u_0 = 4 \text{ m/s}$ . Pode-se observar na figura que há boa concordância, tanto no campo de velocidade quanto nos padrões das linhas de corrente do escoamento. A magnitude da velocidade máxima do presente trabalho foi de  $0.37 \text{ m/s}$  (ou 9,1%) maior que a do trabalho da literatura, isto pode ser devido à resolução da malha e tamanho do domínio, visto que o domínio usado no presente trabalho é maior, porém mantém a proporcionalidade restando a similaridade hidrodinâmica. Ainda assim, sem considerar um modelo de turbulência, o resultado deste estudo mostrou-se viável.

5.2. DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA. Como dito acima, foi considerada uma temperatura na saída do gás da chaminé de  $426,85^\circ\text{C}$ . Para a condição  $u_\infty = 1 \text{ m/s}$  e  $u_0 = 2 \text{ m/s}$  Na Figura 5 aparece

um *volume rendering* da pluma térmica. Espacialmente, as temperaturas da pluma térmica caem rapidamente na região em torno da saída da chaminé de 426,85<sup>0</sup>C para 50<sup>0</sup>C em cerca de 10 m, porém o CO<sub>2</sub> chega até o prédio ainda com uma temperatura de aproximadamente 27,2<sup>0</sup>C em todas as condições. A partir da altura de 60 m há um maior aumento da temperatura vindo da chaminé. Para delimitar melhor a pluma de gás foi criada uma *iso-superfície*, que é o contorno da pluma térmica e representa a região do domínio na qual a temperatura é constante e igual à 28C. Ainda na Figura 5 foi criada uma linha de amostragem de 100 m de altura (com esferas amarelas) à frente do prédio para calcular como a temperatura varia com a altura naquela posição.

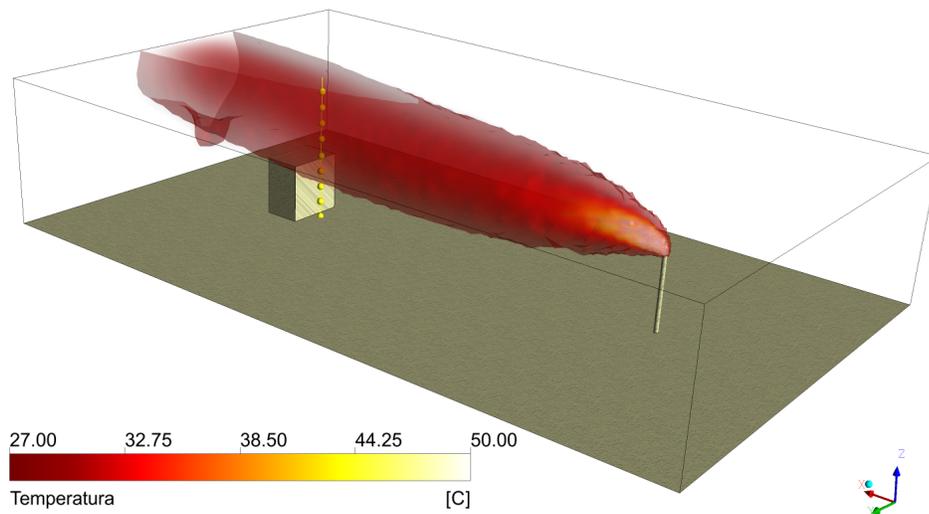


Figura 5: Distribuição de temperatura para  $u_{\infty} = 1 \text{ m/s}$  em  $t = 50 \text{ min}$ .

Para as três condições de velocidades do vento  $u_{\infty}$  estudadas, esta variação se encontra na Figura 6, na qual pode-se ver que

quando a velocidade do vento é menor, a temperatura na frente do prédio localizado à 270 m da chaminé é maior. A 40 m de altura, que é a altura do prédio considerado praticamente não há variação de temperatura quando é aumentada a velocidade do vento,  $\sim 0,4^{\circ}\text{C}$  de aumento para os três casos estudados. Mas se houver um outro prédio naquele mesmo local com 70 m de altura por exemplo, haverá aumento na temperatura de  $3,05^{\circ}\text{C}$  para  $u_{\infty} = 3 \text{ m/s}$ ,  $1,55^{\circ}\text{C}$  para  $u_{\infty} = 2 \text{ m/s}$  e apenas  $1,05^{\circ}\text{C}$  para  $u_{\infty} = 1 \text{ m/s}$ . Então, as áreas residenciais naquela área com prédios mais altos experimentariam um maior aumento da temperatura.

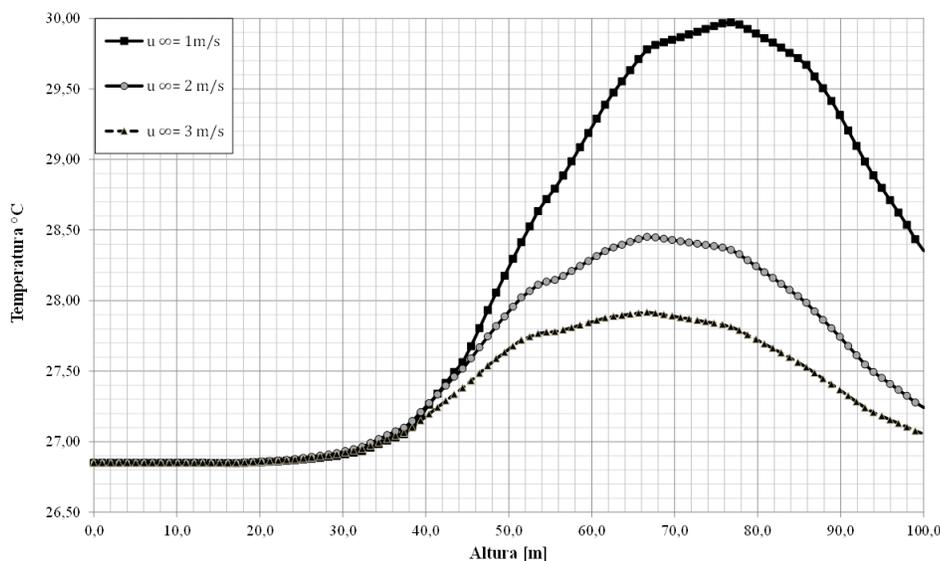


Figura 6: Variação da temperatura com a altura à frente da construção para  $u_{\infty} = 1, 2 \text{ e } 3 \text{ m/s}$ , em  $t = 50 \text{ min}$ .

5.3. DISTRIBUIÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE CO<sub>2</sub> Quanto à dispersão de CO<sub>2</sub>, para o tempo de simulação considerado, que foi de 50 minutos, há um comportamento similar ao da temperatura, ou seja, com o aumento da velocidade do vento, há menor concentração do

poluente no local da construção considerada. Isto pode ser visto no gráfico da Figura 8 que mostra a concentração mássica em um perfil vertical de CO<sub>2</sub> (sobre a mesma linha indicada na Figura 5), para os três casos da velocidade do vento, sendo este comportamento é observado somente para alturas maiores que 40m. Valores relevantes de concentração do gás são observados apenas para alturas maiores que 30m, próximo ao chão os valores são muito próximos de zero como se pode ver também na Figura 8 que mostra a nuvem de CO<sub>2</sub> formada à frente da chaminé para  $u_{\infty} = 1 \text{ m/s}$ .

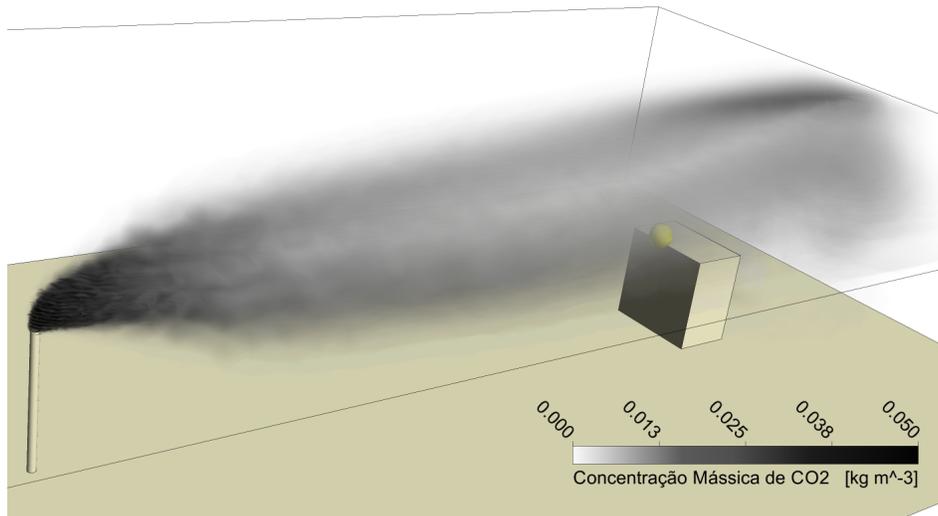


Figura 7: Fração Mássica de CO<sub>2</sub> em  $t = 50 \text{ min}$ .

Segundo recomendações da Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA, 2003), a concentração de CO<sub>2</sub> em ambientes interiores não deve ultrapassar 1000 ppm (equivalente à 1 kg/m). Visto que podem haver impactos diretos e mensuráveis na saúde humana, como por exemplo, de que a baixa renovação de ar pode resultar em sonolência e perda de produtividade até mesmo em

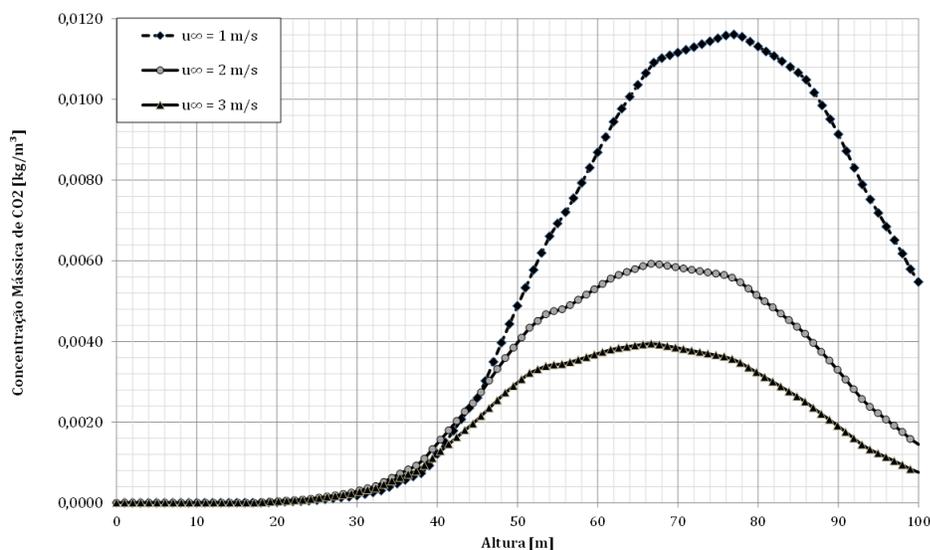


Figura 8: Concentração de CO<sub>2</sub> em relação a altura à frente da construção para  $u_\infty = 1, 2$  e  $3 \text{ m/s}$ .

indivíduos saudáveis. No presente estudo, a concentração máxima de CO<sub>2</sub> observada foi de 1,92 kg/m<sup>3</sup> o que equivale à 1920ppm na saída da chaminé (conforme Figura 9) ficando em torno de 12ppm à uma distância de 270m da chaminé e à 70m de altura para a condição  $u_\infty = 1 \text{ m/s}$ . Apesar de serem baixos os níveis do gás observados, caso haja um grande número de pontos de emissão similares ao considerado, os níveis de CO<sub>2</sub> em ambientes próximos aos focos emissores podem vir a ser preocupantes.

A Figura 9 mostra a influência local do vento na pluma de CO<sub>2</sub> lançada pela chaminé, a partir de mapas de contorno centrais coloridos pela concentração mássica e mostra ainda os campos vectoriais de velocidade para as três condições estudadas. Quando a velocidade do vento aumenta, a pluma se curva até se tornar quase horizontal em relação ao solo. Com o aumento da veloci-

dade do vento a pluma se espalha diminuindo sua extensão, sendo assim, maior sua dispersão no ambiente circundante. Observando os vetores velocidade, percebe-se bem a maior curvatura da pluma quando a velocidade do vento  $u_\infty$  aumenta, ainda a magnitude da velocidade nas proximidades da chaminé ficaram em torno de 1,6m/s para a primeira condição; 2,1m/s para a segunda condição; e 3,14m/s para a terceira condição.

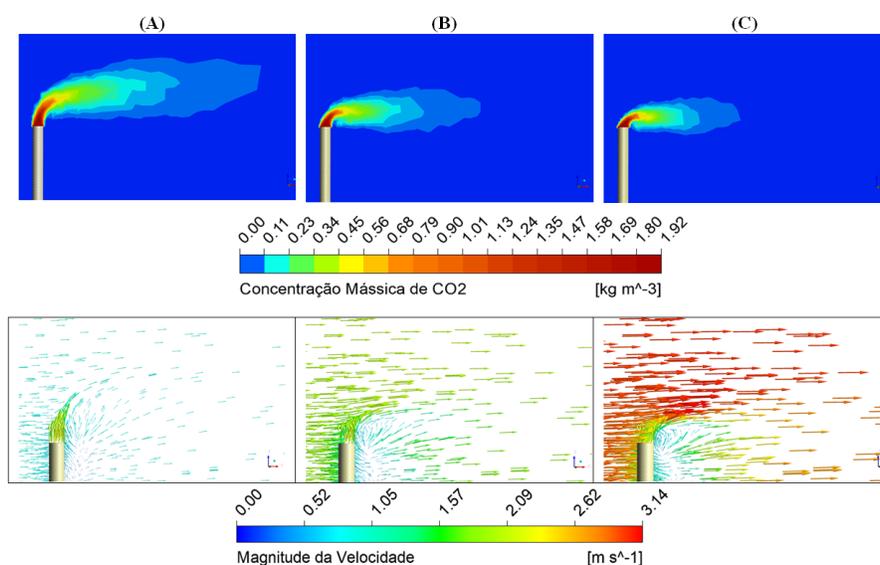


Figura 9: Influência da velocidade do vento na pluma em  $t = 50 \text{ min}$ : Fração mássica de CO<sub>2</sub> e campo de vetores velocidade; (A)  $u_\infty = 1 \text{ m/s}$ ; (B)  $u_\infty = 2 \text{ m/s}$  e (C)  $u_\infty = 3 \text{ m/s}$ .

Finalmente a Figura 10 mostra como evolui com o tempo a porcentagem de CO<sub>2</sub>, amostrada em um ponto localizado no topo do prédio à frente da chaminé (ponto em amarelo da Figura 8). Há variação crescente de fração mássica após  $t = 10 \text{ min}$  de simulação, pode-se dizer que este é o tempo que o gás leva para atingir o ponto no topo do prédio. A fração aumenta de 0% em  $t = 10 \text{ min}$

para 0,25% em  $t = 17 \text{ min}$ . Depois há oscilações com pequenos decréscimos de CO<sub>2</sub> até 0,22% em  $t = 50 \text{ min}$ .

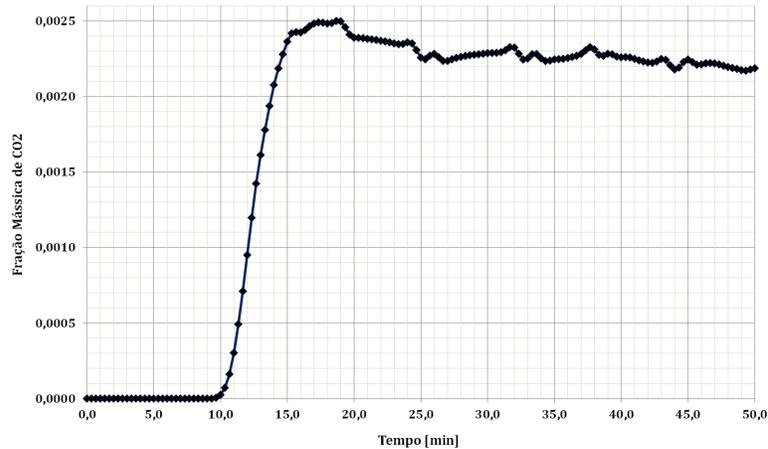


Figura 10: Evolução da fração mássica de CO<sub>2</sub> no tempo em um ponto do domínio em  $t = 50 \text{ min}$ .

## 6. Conclusões

O presente trabalho teve como objetivo estudar a dispersão de CO<sub>2</sub> em um domínio computacional fictício contendo uma chaminé industrial. Um modelo matemático foi apresentado e sua solução foi obtida a partir da fluidodinâmica computacional. O modelo foi validado a partir de um trabalho da literatura. Na sequência foram escolhidas três condições de velocidade de entrada do vento no domínio mantendo fixa a velocidade de saída do gás da chaminé.

Observou-se que com o aumento da velocidade do vento, há menor propagação de CO<sub>2</sub>, bem como são observadas menores valores de temperatura pelo domínio. Observou-se uma velocidade máxima de 3,14m/s dentro do domínio computacional quando foi

considerada a maior velocidade de entrada do vento, neste caso também houve maior dispersão de poluente para fora do domínio.

Apesar de serem obtidas baixas concentrações de CO<sub>2</sub> próximo ao prédio considerado, em grandes centros industriais nos quais há grande número de emissores de CO<sub>2</sub> e grande concentração de prédios ao redor, há necessidade de buscar meios para a diminuição destas emissões.

Considerou-se o vento entrando no domínio em apenas uma direção e perpendicular à superfície de entrada, para trabalhos futuros propõe-se estudar o problema com o vento entrando em um ângulo de 5<sup>o</sup>C a 10<sup>o</sup>C (graus) para determinar se isto pode causar maiores variações nos campos de temperatura ou de concentração do que no presente estudo.

### Referências

- ANSYS, I., 2017. Ansys cfx - solver theory guide. 112
- ANVISA, 2003. Resolução nº 9, de 16 de janeiro de 2003 - agência nacional de vigilância sanitária. Tech. rep., Ministério da Saúde. 116
- IPCC/ONU, R. d., 2007. Painel intergovernamental sobre mudança climática. Tech. rep. 104
- Mahjoub Said, N., Mhiri, H., Le Palec, G., Bournot, P., 2005. Experimental and numerical analysis of pollutant dispersion from a chimney. *Atmospheric Environment* 39 (9), 1727–1738. 112, 113
- Maliska, C., 2004. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, 2nd Edition. LTC - Livros Técnicos e Científicos, Universidade Federal de Santa Catarina - Departamento de Engenharia Mecânica. 106

Rezende, R. V. d. P., 2008. Modelagem matemática e desenvolvimento de metodologia computacional para a simulação numérica do escoamento bifásico de ar e ferro-gusa em canal de corrida de alto-forno. Ph.D. thesis. [106](#)

Takano, Y., Moonen, P., 2013. On the influence of roof shape on flow and dispersion in an urban street canyon. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 123, 107–120. [105](#)

Toja-Silva, F., Pregel-Hoderlein, C., Chen, J., 2018. On the urban geometry generalization for cfd simulation of gas dispersion from chimneys: Comparison with gaussian plume model. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 177, 1–18. [104](#)

Vervecken, L., Camps, J., Meyers, J., 2015. Stable reduced-order models for pollutant dispersion in the built environment. *Building and Environment* 92, 360–367. [105](#)

# CÁLCULO DIFERENCIAL E INTEGRAL: um kit de sobrevivência

$$\int_{\Omega} K d\Omega + \int_{\partial\Omega} k_p(s) ds + \sum_{p=1}^k \phi_p = 2\pi \chi(\Omega).$$

**Demonstração:** Seja  $\tau$  uma triangulação de  $\Omega$  tal que qualquer triângulo  $T$  tido em uma vizinhança coerente de uma parametrização ortogonal com orientação de  $S$  (essa triangulação existe pelos comentários feitos acima). Pelo Teorema 2.1 para cada triângulo, obtém-se:

$$\int_T K dT_i + \int_{\partial T} k_p(s) ds + \sum_{p=1}^k \phi_p = 2\pi.$$

Como pontos e arestas possuem medida nula, podemos somar a equação acima os triângulos e obter:

$$\sum_{i=1}^k \int_T K dT_i = \int_{\Omega} K d\Omega.$$

Como triângulos adjacentes induzem orientação contrária na aresta em comum, interseção dos triângulos se anula no integral. Logo,

$$\sum_{i=1}^k \int_{\partial T_i} k_p(s) ds = \int_{\partial\Omega} k_p(s) ds.$$

Portanto,

$$\int_{\Omega} K d\Omega + \int_{\partial\Omega} k_p(s) ds + \sum_{p=1}^k \sum_{i=1}^k \phi_p = 2\pi F.$$

$$\sum A_k = 1,219 < A(\mathbb{H}_t^+).$$

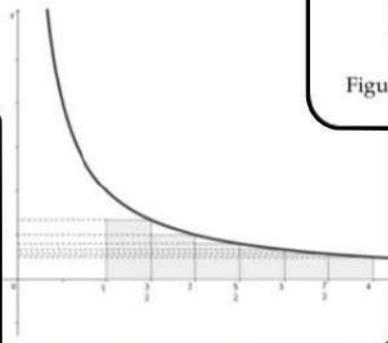


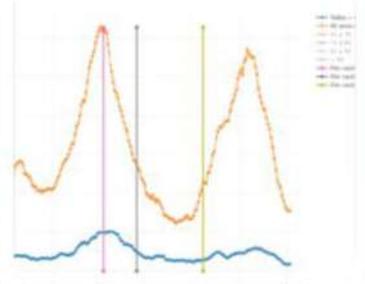
Figura 1: Gráfico da função  $g(t) = t^2 + \ln(t)$

O volume da esfera



Figura 8: Cone com área da base igual a  $\pi r^2$  e altura  $4r$ .

Fig. 1 - Médias móveis de 7 dias dos casos positivos de COVID-19



Esta revista é responsável pela formulação de textos autorais desenvolvido pelo projeto de extensão "Kit". Neste projeto, contamos com alunos graduandos e demais interessados em matemática aplicada. Entre seus textos, podemos encontrar, curiosidades, resoluções, demonstrações, fatos relevantes, ideais para IC, entre outros!