Lista de Exercícios - Sistemas lineares e Revisão de Métodos Numéricos

1. Obtenha as expressões para aproximação de derivadas por série de Taylor para os seguintes casos:

a. $$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i = \frac{-3\phi_i + 4\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

b. $$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i = \frac{\phi_{i-2} - 8\phi_{i-1} + 8\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4)$$

c. $$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i = \frac{2\phi_i - 5\phi_{i+1} + 4\phi_{i+2} - \phi_{i+3}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

2. Considere os sistemas lineares colocados abaixo:

A.

$$\begin{aligned} x_1 - 2x_2 + x_3 &= -1 \\ 2x_1 + x_2 + 2x_3 &= 3 \\ -x_1 + x_2 + 3x_3 &= 8 \end{aligned}$$

B.

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & 5 \\ 3 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

C.

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -7 \\ -1 \end{bmatrix}$$

2.1.Implemente o método de Eliminação Gaussiana e resolva os sistemas lineares A e B.

2.2. Implemente o método de Gauss-Seidel e resolva os sistemas lineares A e B. Avalie os valores de erro e resíduo a cada iteração.

2.3.Implemente o método SOR e resolva os sistemas lineares A e B usando diferentes fatores de relaxação (0.5, 1.2, 1.7 e 2.5). Avalie os valores de erro e resíduo a cada iteração e compare o padrão de convergência (número total de iterações) para os diferentes fatores de relaxação.

2.4. Implemente o método de Thomas e resolva o sistema linear C.

3. Considere as equações abaixo:

$$f(x) = e^x - \sin(\pi x/3) = 0 \qquad \text{(A)}$$

$$f(x) = x^3 - 2x^2 - 2x + 1 = 0 \qquad \text{(B)}$$

a. Resolva (A) pelo método da bisseção e pela regula falsi, iniciando ambos pelo intervalo x = -3,5 e 2,5.

b. Resolva (B) pelo método da bisseção e pela regula falsi, iniciando ambos pelo intervalo x = 0,0 e 1,0.

c. Para ganhar experiência com o método, utilize outras estimativas iniciais nos problemas acima.

d. Resolva (A) pelo método de Newton Raphson, com estimativa inicial x = -3,0.

e. Resolva (B) pelo método de Newton Raphson, com estimativa inicial x = 1,0.

f. Resolva (A) pelo método da secante, com estimativas iniciais x = -3,0 e -2,5.

g. Resolva (B) pelo método da secante, com estimativas iniciais x = 0,0 e 1,0.

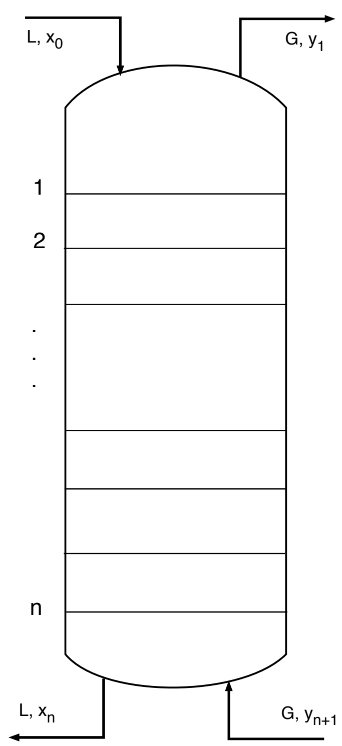
4. Desenvolva e implemente a metodologia de decomposição LU (Google it!) para sistemas matriciais e aplique aos problemas da Questão 2.

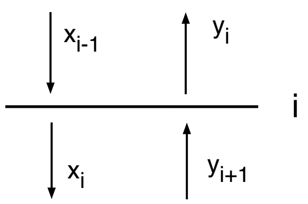
5. Com base no algoritmo de Thomas, desenvolva uma metodologia de solução direta para matrizes pentadiagonais.

6. Desenvolva um código para uma coluna de absorção em regime estacionário com *n* estágios. Pode-se assumir que existe uma relação linear de equilíbrio entre o líquido (x_m) e o vapor (y_m) em cada prato.

$$y_m = a\,x_m + b \qquad (1)$$

A composição de entrada x_0 e y_{n+1} são especificadas junto as taxas molares (moles/tempo) das correntes de líquido (L) e gás (G). O sistema completo para a coluna e para uma bandeja (estágio) genérica *i* estão esquematizados nas figuras.





De modo a resolver o problema, deve-se estruturar o balanço material estacionário para cada bandeja i.

$$L x_{i-1} + G y_{i+1} = L x_i + G y_i$$

Utilizando a relação de equilíbrio apresentada na Equação 1, pode-se expressar o problema em relação das frações molares no líquido apenas. Note que as equações da primeira e última bandejas devem ser adaptadas de acordo com os valores de composição nas entradas. Para este problema, use como valores de referência: $a = 0{,}72$, $b = 0{,}0$, $G = 66{,}7$ kmol/min e $L = 40{,}8$ kmol/min.

a. Estruture o sistema linear formado e programe seu código de forma genérica em relação ao número de bandejas usadas e parâmetros de operação. Em outras palavras, use como variáveis de entrada!! NUNCA deixe seu código com valores especificados ao longo do mesmo, mas usem variáveis genéricas!!

b. Considere os casos abaixo com $n = 2{,}4{,}6{,}8{,}10{,}20{,}40$ bandejas e avalie as composições de saída em:

(i) Caso I : simule as situações para $x_0 = 0$ (líquido puro) e $y_{n+1} = 0{,}2$ kmol soluto/kmol inerte.

(ii) Caso II : simule as situações para $x_0 = 0$ (líquido puro) e $y_{n+1} = 0{,}3$ kmol soluto/kmol inerte.

c. Reestruture e proponha um algoritmo para solução do problema considerando que os coeficientes da relação termodinâmica (Equação 1) sejam dependentes das composições ($a = f(x_i, y_i)$ e $b = g(x_i, y_i)$) na bandeja.

Como referência, segue abaixo o resultado para $n = 12$ bandejas.