EQE-749 – Métodos Numéricos Aplicados
Escola de Química/ UFRJ
Prof. Luiz Fernando Lopes R. Silva

Lista de Exercícios

Problemas Teóricos ou Computacionais (Dedique seu tempo na implementação dos códigos para resolver os problemas abaixo, a menos que seja explícito o contrário).

1. Considere o problema transiente da troca de calor com radiação de $t = 0$ a 50 segundos,

$$\frac{dT}{dt} = -\alpha\left(T^4 - {T_a}^4\right),$$
$$T(t = 0) = T_0$$

e sua solução analítica,

$$\tan^{-1}\left(\frac{T}{T_a}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{T_0}{T_a}\right) + \frac{1}{2}ln\left[\frac{\left(T_0 - T_a\right)\left(T + T_a\right)}{\left(T - T_a\right)\left(T_0 + T_a\right)}\right] = 2\alpha T_a^3 t.$$

Para $T_0 = 2500\ K$, $T_a = 250\ K$ e $\alpha = 4 \times 10^{-12}\ \left(K^3 s\right)^{-1}$, resolva os itens abaixo:

a. Resolva a EDO pelo método de Euler Explícito, inicialmente utilizando $\Delta t = 20\ s$ e repita o cálculo diminuindo o passo de tempo até obter convergência temporal. Avalie ainda:
   i. O gráfico comparando as curvas obtidas para diferentes passos de tempo e a solução analítica.
   ii. O gráfico do erro absoluto e relativo para diferentes passos de tempo.
b. Repita a letra a, utilizando o método de Euler Implícito.
c. Para um mesmo passo de tempo, avalie os erros obtidos pelos diferentes métodos.

2. O deslocamento angular, $\theta(t)$ em radianos, de um pêndulo sem fricção é dado pela equação:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{L}\sin\theta = 0$$
$$\theta(0) = \theta_0$$
$$\theta'(0) = \theta'_0$$

onde g é a aceleração da gravidade (9,80665 m^2/s) e L é o comprimento do pêndulo (m). Para pequenas oscilações, a equação pode ser aproximada com $\sin\theta \approx \theta$:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{L}\theta = 0$$

Para os itens abaixo, considere $\theta'(0{,}0) = 0{,}0$:

a. Monte no papel o sistema de EDOs resultante considerando uma formulação explícita. Explicite o algoritmo de solução.
b. Repita o procedimento da letra a. considerando uma formulação implícita.
c. Resolva a EDO aproximada utilizando a formulação explícita, com as condições $\theta(0{,}0) = 0{,}1$ e 0,5 radianos e $L = 0{,}1$, 1,0 e 10 m. Utilize diferentes passos de tempo

para avaliar a convergência temporal.

d. Repita a letra c. utilizando a <u>EDO sem aproximação</u> de pequenas oscilações.
e. Para um mesmo passo de tempo, compare os resultados obtidos nas letras c. e d.

3. Em um sistema fechado com três componentes, ocorrem as seguintes reações:

$$A \xrightarrow{k_1} B$$
$$B + C \xrightarrow{k_2} A + C$$
$$2B \xrightarrow{k_3} C + B$$

com as equações de conservação de espécie química colocadas abaixo:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A + k_2 C_B C_C$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B C_C - k_3 C_B^2$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_3 C_B^2$$

$$C_A(0) = 1\ kg/m^3, \quad C_B(0) = C_C(0) = 0\ kg/m^3$$

Calcule a evolução temporal das concentrações para $k_1 = 0{,}08\ s^{-1}$, $k_2 = 2 \times 10^4\ m^3 kg^{-1} s^{-1}$ e $k_3 = 6 \times 10^7\ m^3 kg^{-1} s^{-1}$ utilizando:

a. Uma formulação explícita para solução das EDOs. Usem passos de tempo pequenos!!!
b. Uma formulação implícita para solução das EDOs.
c. Avalie as soluções em gráfico. Em consideração ao erro das aproximações, qual a diferença prática na aplicação da formulação explícita e implícita? E o custo computacional?