3ª Prova de Cálculo Numérico
Curso: Engenharia de Alimentos & Engenharia Química

DAMAT, 2021

Nome: ____

Instruções:

(i) Em todas as páginas da avaliação a ser resolvida, tem que o nome do aluno no **início** e no **fim** de cada página;

(ii) A prova deve ser anexada no *Google Classroom* e a mesma deve ser escaneada em boa resolução e em **pdf**. Não serão aceitas imagens separadas do tipo jpg! (use um aplicativo do tipo *CamScanner* para celular);

(iii) A prova tem que ter **todos os passos apresentados na sala de aula e nas videoaulas**. Resoluções incompletas, apenas apresentando a resposta serão descontadas nota da questão;

(iv) Não esqueça de devolver a atividade no *Google Classroom*;

(v) O aluno precisará do seu R.A. para fazer sua prova. Os alunos devem fazer a seguinte correspondência entre os dígitos d_i's e os dígitos de seus R.A's. Por exemplo, um aluno com o R.A. dado por 002173581, deve fazer a seguinte correspondência:

0	0	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6	d_7
0	0	2	1	7	3	5	8	1

Assim, neste exemplo, $d_1 = 2, d_2 = 1, d_3 = 7, \ldots, d_7 = 1$ e o aluno deve substituir estes valores nas questões da prova;

(vi) Se as instruções (i),(ii), (iv) e (v) não forem obedecidas, a prova será anulada.

Do exposto, preencha a tabela abaixo colocando o seu R.A. **(Esta tabela deve estar no início de sua prova juntamente com seu nome)**:

0	0	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6	d_7
0	0							

Questões:

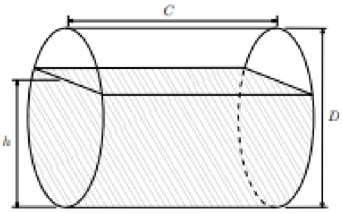
1 (1,8) *Faça o que se pede:*

(a) Formule, pelo método de diferenças finitas, um sistema linear cuja solução aproxime a solução do seguinte problema de contorno:

$$\begin{cases} y'' = (d_1+2)y' + (d_4+2)y + (d_6+1)\cos x \\ y(0) = -d_1 - 0,9 \\ y(\pi/2) = -d_1 - 0,4 \end{cases}$$

(b) Atribuindo $n = 4$ no item anterior, resolva o sistema pelo Método de Gauss-Seidel com $X^{(0)} = (0,0,0)^t, \varepsilon \leq 10^{-1}$ e $k = 0,1,2$.

2 (1,8) *O maior dos tanques cilíndricos, mostrados na figura a seguir, tem diâmetro D = 1,5 m, comprimento C = 4 m com líquido até a altura h = 1,2 m. O volume de líquido é dado pela integral*



$$V(h) = 2\,C \int_0^h \sqrt{x\,(D-x)}\,dx$$

(a) *Determine uma estimativa numérica para o volume de líquido no tanque recorrendo à regra 3/8 de Simpson com $n = 6$.*

(b) *Discorra sobre o resultado numérico obtido no item (a) em relação ao resultado exato dado por*

$$V(h) = C\left\{\frac{\pi\,D^2}{8} + \left(h - \frac{D}{2}\right)\sqrt{h(D-h)} - \frac{D^2}{4}\,\mathrm{arcsen}\left(1 - \frac{2\,h}{D}\right)\right\}.$$

3 (1,8) *Pirólise é um processo químico no qual um composto (sólido ou líquido) é volatilizado sob altas temperaturas e ausência de oxigênio. Se α é a fração de material volatilizado, a taxa de transformação em função da temperatura T do reator pode ser modelada por*

$$\frac{d\,\alpha}{d\,T} = \frac{A}{\beta}\exp\left(-\frac{E}{R\,T}\right)\,(1-\alpha),$$

onde A é o fator pré-exponencial, β é a taxa de aquecimento do reator, E é a energia de ativação do processo,R é a constante universal dos gases. Em um experimento, determinou-se que $A = 0,0d_3d_5 min^{-1}, E = 0,5d_2d_4\ J/mol, R = 8,d_3d_1d_4\ J/(\text{mol}\cdot\text{K}), \beta = 0,3d_6d_2 K/min$. Resolva o PVI com $3d_1d_5 \leq T \leq 5d_3d_4$ K empregando o método de Runge-Kutta de ordem 4 com $n = 3$.

4 (1,8) *Numa reação química, uma molécula de um reagente A combina-se com uma molécula de um outro reagente B para formar uma molécula de um produto C. Sabe-se que a concentração $y(t)$ de C, no tempo, é solução do seguinte p.v.i.:*

$$\begin{cases} y' = k(a-y)\,(b-y) \\ y(0) = d_4 + 3 \end{cases}$$

onde k é a constante de reação, $a = (d_5+1)$ e $b = (d_3+2)$ são, respectivamente, a concentração inicial do reagente A e B. Considerando os seguintes dados: $k = (d_2+1)\times 10^{-2}$, determine a concentração do produto C sobre o intervalo [0, 24], empregando o método de Euler para $h = 4$.

5 (1,8) *Usando a quadratura de Gauss, obtenha uma aproximação da integral* $\displaystyle\int_{d_3+1}^{d_3+3} x^2\,\mathrm{e}^{-x^5}\,dx$ *com* $n = 3$.

Sucesso!!!

Feliz Natal e Feliz 2022!!!

Formulário

Integração Numérica

Regra do Trapézio

- Regra do Trapézio Simples

  Para $h = x_1 - x_0$, temos:

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\,[f(x_0) + f(x_1)]\ .} \tag{1}$$

  Erro:

$$\boxed{E = -\frac{h^3}{12}\,f''(\xi),\ x \in\ [x_0, x_n]\,.} \tag{2}$$

- Regra dos Trapézios Generalizadas

  Considerando

$$\boxed{h = \frac{x_n - x_0}{n},\ x_0 = a, x_n = b,}$$

  temos:

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\,[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)]\,dx\,.} \tag{3}$$

  cuja estimativa do erro é

$$\boxed{|E| \leq \frac{h^2}{12}\,M\ \cdot\ (x_n - x_0),}$$

  onde

$$\boxed{M = \max\left\{|f''(\xi)|;\ \xi\ \in\ [x_0\,, x_n]\right\}\ .}$$

Regra de Simpson

- Regra 1/3 de Simpson

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\,[f(x_0) + 4\,f(x_1) + f(x_2)]\,,}$$

  onde $h = \dfrac{x_2 - x_0}{2}$.

  Uma estimativa para o erro nesta situação é

$$\boxed{|E| \leq \frac{h^5}{90}\,M,}$$

  onde

$$\boxed{M = \max\left\{|f^{(4)}(\xi)|;\ \xi\ \in\ [x_0\,, x_2]\right\}\ .}$$

- Regra 1/3 de Simpson Generalizada:

  Tendo em mente que $h = \dfrac{x_n - x_0}{n}$ temos que

$$\boxed{\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \cong \frac{h}{3}\Big[&f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3)\\ &+ \ldots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\Big]\end{aligned}} \tag{4}$$

  onde n é um número <u>par</u> e o erro estimado é

$$\boxed{|E| \leq \frac{h^4}{180}\,(x_n - x_0)\,M}$$

  onde

$$\boxed{M = \max\{|f^{(4)}(\theta)|,\, \theta \in\, [x_0, x_n]\}.}$$

- Regra 3/8 de Simpson

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_3} f(x)\,dx \approx \frac{3}{8}\,h\,[f(x_0) + 3\,f(x_1) + 3\,f(x_2) + f(x_3)]}$$

  com $h = \dfrac{x_3 - x_0}{3}$ e um limitante superior para o erro é

$$\boxed{|E| \leq \frac{3}{80}\,h^5\,M}$$

  onde

$$\boxed{M = \max\{|f^{(4)}(\theta)|,\, \theta \in\, [x_0, x_3]\}.}$$

- Regra 3/8 de Simpson Generalizada:

$$\boxed{\begin{aligned}&\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \cong \frac{3}{8}\,h\,\Big[f(x_0)\\ &+ 3\,(f(x_1) + f(x_2) + f(x_4) + f(x_5) + \ldots + f(x_{n-2}) + f(x_{n-1}))\\ &+ 2\,(f(x_3) + f(x_6) + \ldots + f(x_{n-3})) + f(x_n)\Big]\end{aligned}}$$

  com $h = \dfrac{x_n - x_0}{n}$, onde n é <u>múltiplo</u> de <u>três</u>. Neste caso, o limitante para o erro superior é

$$\boxed{|E| \leq \frac{h^4}{80}(x_n - x_0)\,M}$$

  onde

$$\boxed{M = \max\{|f^{(4)}(\theta)|,\, \theta \in\, [x_0, x_n]\}.}$$

Quadratura de Gauss

Se $P(x)$ é qualquer polinômio de grau menor que $2\,n$, então,

$$\int_{-1}^{1} P(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} c_i \cdot P(x_i)\,. \tag{5}$$

Os valores das contantes c_i quanto das raízes x_i dos polinômios de Legendre são extensivamente tabuladas. A seguinte tabela lista esses valores para $n = 2, 3, 4$ e 5.

n	raízes x_i	Coeficientes c_i	i
2	0,5773502692	1	1
	-0,5773502692	1	2
3	0,7745966692	0,5555555556	1
	0	0,8888888889	2
	-0,7745966692	0,5555555556	3
4	0,8611363116	0,3478548451	1
	0,3399810436	0,6521451549	2
	-0,3399810436	0,6521451549	3
	-0,8611363116	0,3478548451	4
5	0,9061798459	0,2369268850	1
	0,5384693101	0,4786286705	2
	0	0,5688888889	3
	-0,5384693101	0,4786286705	4
	-0,9061798459	0,2369268850	5

Figura 1: Tabela que lista os valores das raízes x_i e dos coeficientes c_i para $n = 2, 3, 4, 5$.

Para aplicar o método da quadratura de Gauss para a integral $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ sobre um intervalo arbitrário $[a, b]$, devemos usar a seguinte mudança de variável

$$x = \frac{1}{2}[(b-a)\,t + a + b],$$

o que resulta

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{(b-a)}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)\,t + a + b}{2}\right) dt\,. \tag{6}$$

Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

Considere o seguinte problema de valor inicial:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Método de Euler

Tomando n subintervalos de $[a, b]$, $n \geq 1$ de modo que

$$\boxed{x_j = x_0 + j \cdot h; \quad h = \frac{b-a}{n},} \tag{7}$$

onde $j = 0, 1, \ldots, n$, $x_0 = a$ e $x_n = b$.

O método de Euler é

$$\boxed{y_{j+1} = y_j + h\, f(x_j, y_j),\ j = 0, 1, \ldots, n-1.}$$

com erro dado por

$$\boxed{e_n = \frac{h^2}{2!}\, y''(\xi),\ \ \xi \in [x_n, x_{n+1}]\,.} \tag{8}$$

Método de Runge - Kutta

- Método de Runge - Kutta de Segunda Ordem

  Considere n subintervalos de $[a, b]$, $n \geq 1$, tendo em mente que

  $$\boxed{x_j = x_0 + j\ \cdot\ h; \quad h = \frac{b-a}{n},} \tag{9}$$

  onde $j = 0, 1, \ldots, n$, $x_0 = a$ e $x_n = b$.

  O Método de Runge - Kutta de Segunda Ordem é

  $$\boxed{\begin{cases} y_{j+1} = y_j + \dfrac{h}{2}(k_1 + k_2), \\ k_1 = f(x_j, y_j), \\ k_2 = f(x_j + h, y_j + h\, k_1) \end{cases} \quad ,\ \ j = 0, 1, 2, \ldots, n-1.} \tag{10}$$

- Método de Runge–Kutta de Ordem 4

  Neste caso, temos as seguintes fórmulas:

$$\boxed{\begin{cases} y_{j+1} = y_j + \dfrac{h}{6}\left(k_1 + 2\,k_2 + 2\,k_3 + k_4\right), \\ k_1 = f(x_j, y_j) \\ k_2 = f\left(x_j + \dfrac{h}{2}, y_j + \dfrac{h}{2}\,k_1\right) \\ k_3 = f\left(x_j + \dfrac{h}{2}, y_j + \dfrac{h}{2}\,k_2\right) \\ k_4 = f\left(x_j + h, y_j + h\,k_3\right) \end{cases} \quad ,\ \ j = 0, 1, \ldots, n-1\,.} \tag{11}$$

Método das Diferenças Finitas

Considerando n subintervalos e a caracterização apresentada em (7), temos as seguintes aproximações:

$$\boxed{y(x_i) \approx y_i} \tag{12}$$

$$\boxed{y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\,h}} \tag{13}$$

$$\boxed{y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2\,y_i + y_{i-1}}{h^2}\,.} \tag{14}$$

Método de Gauss-Seidel

Convergência: Ocorre nas seguintes situações:

1. O critério de Sanssenfeld for satisfeito, isto é, se

$$\boxed{\max_{1 \leq i \leq n} \beta_i < 1,}$$

onde

$$\boxed{\beta_i = \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \beta_j + \sum_{j=i+1}^{n} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right|, \ i = 1, 2, \ldots, n.}$$

2. Se a matriz A do sistema $AX = B$ for estritamente diagonalmente dominante.

3. O critério das linhas é satisfeito, isto é, $\|F\|_\infty < 1$, onde F..

   Algoritmo:

$$\boxed{\begin{array}{rcl} x_1^{(k+1)} & = & \dfrac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12}\, x_2^{(k)} - a_{13}\, x_3^{(k)} - \ldots - a_{1n}\, x_n^{(k)} \right) \\ x_2^{(k+1)} & = & \dfrac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21}\, x_1^{(k+1)} - a_{23}\, x_3^{(k)} - \ldots - a_{2n}\, x_n^{(k)} \right) \\ x_3^{(k+1)} & = & \dfrac{1}{a_{33}} \left(b_3 - a_{31}\, x_1^{(k+1)} - a_{32}\, x_2^{(k+1)} - a_{34}\, x_4^{(k)} \ldots - a_{3n}\, x_n^{(k)} \right) \\ \vdots & & \vdots \\ x_n^{(k+1)} & = & \dfrac{1}{a_{nn}} \left(b_n - a_{n1}\, x_1^{(k+1)} -_{n2}\; x_2^{(k+1)} - \ldots - a_{nn-1}\, x_{n-1}^{(k+1)} \right) \end{array}}$$

Critério da Parada:

$$\boxed{\frac{\|X^{(k+1)} - X^{(k)}\|_\infty}{\|X^{(k+1)}\|_\infty} < \varepsilon}$$

onde ε é a precisão pré-fixada.