Ministério da Educação
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Campus Campo Mourão
Wellington José Corrêa

1ª Prova de Cálculo Numérico

Curso: Engenharia de Alimentos & Engenharia Química

DAMAT, 2021

Nome: ____

Instruções:

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

(ii) A prova deve ser anexada no *Google Classroom* e escaneada em pdf (como sugestão use os aplicativos *CamScanner* ou *Adobe Scan*). **Atenção:** Não serão aceitas fotos da prova! Somente o arquivo em pdf!

(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) Temos que*

$$\sum_{i=1}^{D} \frac{1}{i^2} = 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + \ldots + \frac{1}{D^2}, \quad \textit{(Valor Exato)},$$

onde

$$D = \begin{cases} d_2 + d_5 + 1; & \textit{se } d_2 + d_5 + 1 \leq 9 \\ 10; & \textit{caso contrário} \end{cases}$$

Usando a aritmética de truncamento com três algarismos, calcule:

$$S_1 = 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + \ldots + \frac{1}{D^2} \quad e \quad S_2 = \frac{1}{D^2} + \ldots + \frac{1}{9} + \frac{1}{4} + 1\,.$$

Além disso, qual soma é a mais precisa? Por quê?

2 *(1,8) O pH de soluções diluídas de um hipotético ácido fraco é a raiz positiva da equação*

$$[H_3O^+]^3 + K_a[H_3O^+]^2 - (K_a\,C_a + K_\omega)[H_3O^+] - K_\omega\,K_a = 0,$$

sendo $pH = \log_{10}[H_3O^+]$, K_a *a constante de dissociação do ácido,* C_a *a concentração do ácido e* K_ω *o produto iônico da água. Empregando o método da secante com* $\varepsilon \leqslant 10^{-3}$, *calcule o pH de uma solução de ácido bórico a* $25°\,C$, *sabendo que* $K_a = 0, d_2d_1d_6 \times 10^{-3}\,M$, $C_a = 0, d_3d_4 \times 10^{-5}\,M$ *e* $K_\omega = 1, d_5 \times 10^{-14}\,M$.
Justifique *o resultado numérico obtido!*

3 *(1,0) Recorrendo ao método do ponto fixo com erro* $\varepsilon \leqslant 10^{-2}$, *determine uma raiz da equação*

$$f(x) = \cos((d_7+4)\,x) - (d_1+1)\,x = 0\,.$$

4 *(1,8) A tabela abaixo exibe as porcentagens de albumina, carboidrato e lipídio em cada um dos alimentos A, B e C. Investigue* **justificando** *se seria possível combinar esses alimentos formando uma refeição que contenha 40% de albumina, 40% de carboidrato e 20% de lipídio recorrendo à decomposição LU.*

	A	B	C
Albumina	$(d_3+3)\times 10\%$	$(d_3+1)\times 10\%$	*20%*
Carboidrato	*30%*	*30%*	$(d_5+1)\times 10\%$
Lipídio	*40%*	*20%*	$(d_7+1)\times 10\%$

5 *(1,8) Considere o seguinte sistema de equações para determinar as concentrações* c_1, c_2 *e* $c_3\,(g/m^3)$ *numa série de 3 reatores como função da quantidade de massa à entrada de cada reator (termo independente do sistema em g):*

$$\begin{pmatrix} (d_3+7) & 1 & d_4 \\ 3 & (d_6+8) & -d_1 \\ d_4 & -1 & -(d_5+6) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_3 \\ d_5 \\ d_7 \end{pmatrix}$$

(a) Resolva o sistema abaixo pelo método de Gauss-Seidel com $\varepsilon \leq 10^{-1}$ *e* $\overset{(0)}{X} = (0,0,0)^t$.

Observação: *Faça no máximo,* $k = 3$ *iterações com todos os detalhes.* **Justifique** *a solução obtida.*

(b) O sistema é bem condicionado? Justifique.

6 (0,8) *Faça o que se pede:*

(a) Aplique o método de Newton-Raphson para construir um esquema computacional para calcular $\dfrac{1}{\sqrt{A}}$, $A > 0$

(b) Tendo em mente o esquema obtido no item (a), exiba três iterações de uma aproximação de $\dfrac{1}{\sqrt{A}}$ *onde* $A = (d_2+1)\,(d_4+1)\,(d_6+1)\,.$

Sucesso!!!

Formulário

Método do Ponto Fixo

Considere o problema de resolver a equação $f(x) = 0$. Obtenha o problema de ponto fixo $x = F(x)$ satisfazendo as condições:

- $F(x)$ é contínua em $[a, b]$;
- $a \leq F(x) \leq b$ para todo $x \in [a, b]$;
- $|F'(x)| \leq k < 1$ para todo $x \in (a, b)$.

Sendo satisfeitas as condições acima, com $x_0 \in [a, b]$, use a fórmula de iteração:

$$\boxed{x_{k+1} = F(x_k)} \tag{1}$$

satisfazendo o critério da parada:

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

onde ε é a precisão pré-fixada.

Método de Cholesky

Se $A = A^t$ e $\det(A_k) > 0$, $k = 1, 2, \ldots, n$, então

$$\boxed{A = G \cdot G^t}$$

onde

$$\boxed{G = \begin{pmatrix} g_{11} & & & & \\ g_{21} & g_{22} & & 0 & \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & g_{n3} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix}.}$$

Além disso,

$$\boxed{\det(A) = (g_{11}\, g_{22}\, \ldots\, g_{nn})^2 .}$$

Procedimento:

- Elementos Diagonais

$$\boxed{g_{11} = \sqrt{a_{11}}}$$

$$\boxed{g_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}^2\right)^{\frac{1}{2}}, \ i = 2, 3, \cdots, n .}$$

- Elementos não diagonais de G

1. Primeira coluna:

$$\boxed{g_{i1} = \frac{a_{i1}}{g_{11}}, \ i = 2, 3, \cdots, n .}$$

2. Segunda coluna:

$$\boxed{g_{i2} = \frac{a_{i2} - g_{i1}\, g_{21}}{g_{22}}, \ i = 3, 4, \cdots, n .}$$

3. Demais colunas:

$$\boxed{g_{ij} = \frac{a_{ij} - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk}}{gjj}, \ 2 \leq j < i .}$$

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.

Algoritmo:

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

Critério da Parada:

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

onde ε é a precisão pré-fixada.

Método de Newton- Raphson

Algoritmo:

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}}.$$

Método Regula Falsi

Considere $x_0 = a$ e $x_1 = b$.

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)\cdot(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}}$$

O método *Regula Falsi* retém o ponto no qual o valor da função tem sinal oposto no ponto mais recente, assegurando desta forma, que a raiz continue isolada entre dois pontos com o seguinte critério de parada:

$$\boxed{|x_{k+1} - x_k| \leqslant \varepsilon\,.}$$