UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

EQE-358 – Métodos Numéricos em Engenharia Química

EXERCÍCIOS COMPUTACIONAIS (2020-PLE)

Implementar na linguagem computacional PYTHON a resolução dos seguintes exercícios e entrega-los através da plataforma MOODLE, para cada exercício: **um arquivo aluno_X.py (em que "aluno" é o nome e último sobrenome do aluno no formato NomeSobrenome e X é o número do exercício) e um relatório aluno_X.pdf (com a mesma regra de nomenclatura) contendo os resultados do exercício reportado pelo programa, discutindo a acurácia dos resultados**.

1) Implementar o algoritmo abaixo para aproximar $f(x) = e^{-x}$ em polinômio de Taylor com critério de convergência δ para determinar o grau do polinômio (n).

$y \leftarrow x$

$m \leftarrow 0$

$n \leftarrow 0$

$T \leftarrow 1$

$S \leftarrow 1$

Enquanto $|\, y \,| \geq 1$, faça

  $m \leftarrow m + 1$

  $y \leftarrow y / 2$

Faça

  $n \leftarrow n + 1$

  $T \leftarrow -\dfrac{y}{n} \cdot T$

  $S \leftarrow S + T$

enquanto $|\, T / S \,| > \delta$

Para $j = 1, 2, ..., m$, faça

  $S \leftarrow S \cdot S$

Ao final o programa deve reportar o valor da exponencial de x, o grau do polinômio obtido, e os erros absoluto e relativo da aproximação. Reporte os resultados com critério de convergência de 10^{-5} para $x = 2$, $x = 0{,}5$ e $x =$ DRE3/100 (em que DRE3 são os 3 últimos dígitos do seu DRE).

2) Implementar o seguinte algoritmo computacional de interpolação polinomial de Lagrange:

Dados n+1 pontos $\{x_i, y_i\}$, deseja-se interpolar a função em $x = x^*$

Para i = 0, 1, 2, ..., n, faça

$p_i \leftarrow 1$

Para j = 0, 1, 2, ..., n, faça

Se $i \neq j$: $p_i \leftarrow \left(\dfrac{x^* - x_j}{x_i - x_j} \right) \cdot p_i$

$y^* \leftarrow 0$

Para i = 0, 1, 2, ..., n, faça

$y^* \leftarrow y^* + p_i \cdot y_i$

Ao final do algoritmo y^* contém o valor interpolado de $f(x)$ em $x = x^*$. O programa deve reportar o valor de x^*, o valor interpolado y^* e o grau do polinômio interpolador.

Reporte os resultados usando os dados da tabela abaixo para interpolar os dados nos seguintes valores de x: {–1, –½, 0, ½, 1, 1½, 2, 2½, DRE3/500} (em que DRE3 são os 3 últimos dígitos do seu DRE). Apresentar uma figura, em Python, com duas curvas (no formato de linhas e símbolos), uma com os dados da tabela abaixo e outra com os valores interpolados.

I	x_i	$y_i = f(x_i)$
0	–0,5	–0,4
1	0,5	0,4
2	1	0,5
3	2	0,4

3) Implementar o seguinte algoritmo computacional do método de Wegstein, para o cálculo de raízes de funções a uma variável:

Dados a, b, ε, δ, k_{max},

$f_a \leftarrow f(a)$

$f_b \leftarrow f(b)$

se $f_a \,.\, f_b > 0$ então entrar com novos valores de a e b

$k \leftarrow 0$

Faça

$$\lambda \leftarrow \frac{f_a}{f_a - f_b}$$

$x^0 \leftarrow a + \lambda \cdot (b - a)$

$y \leftarrow f(x^0)$

se $y \,.\, f_a > 0$, então

$f_a \leftarrow y$

$a \leftarrow x^0$

senão

$f_b \leftarrow y$

$b \leftarrow x^0$

$\Delta \leftarrow |\, b - a \,|$

$k \leftarrow k + 1$

enquanto ($\Delta > \varepsilon$ ou $|y| > \delta$) e $k < k_{max}$

Ao final do algoritmo, se $k < k_{max}$ então x^0 contém a raiz encontrada de $f(x)$ e y contém o valor de $f(x^0)$.

Usando o algoritmo implementado, obtenha as três raízes do reator CSTR, dado pela seguinte expressão:

$$f(x) = x + 0{,}1 - \frac{0{,}05\exp\left(\dfrac{20x}{1+x}\right)}{1 + 0{,}1\exp\left(\dfrac{20x}{1+x}\right)} = 0$$

Considere $\varepsilon = 10^{-6}$, $\delta = 10^{-7}$, $k_{max} = 100$ e escolha valores adequados para a e b através de análise gráfica da função. Reporte para cada raiz encontrada: o valor da raiz, de $f(x)$ na raiz, o número de iterações e os valores de a e b. Mostre também o gráfico da função, em Python, ressaltando no gráfico as raízes encontradas. Mostre também no gráfico o valor da função para o ponto x = DRE3/1000 (em que DRE3 são os 3 últimos dígitos do seu DRE).

4) Implementar o seguinte algoritmo computacional para fatoração LU de uma matriz quadrada A de dimensão $N \times N$ em uma matriz triangular inferior, L, com elementos unitários na diagonal principal e outra triangular superior, U. Ao final do algoritmo, a matriz U está armazenada na parte triangular superior da matriz A (incluindo a diagonal) e a matriz L está armazenada na parte triangular inferior da matriz A (não incluindo a diagonal).

$$\begin{matrix} k = 1, \ldots, N-1 \\ i = k+1, \ldots, N \\ j = k+1, \ldots, N \end{matrix} \quad \begin{cases} a_{ik} \leftarrow \dfrac{a_{ik}}{a_{kk}} \\ \\ a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik}\, a_{kj} \end{cases} \qquad \text{(Doolittle)}$$

Implementar também um algoritmo para resolver um sistema linear de equações, $A\,x = b$, utilizando a matriz A fatorada pelo algoritmo acima e pela aplicação de substituição direta seguida de retro-substituição, conforme descritas abaixo.

$$y_1 = b_1\,, \quad y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}\, y_j\,, \quad i = 2,\ldots, N \quad \text{(substituição direta)}$$

$$x_N = \frac{y_N}{a_{N,N}}\,, \quad x_i = \frac{1}{a_{i,i}}\left(y_i - \sum_{j=i+1}^{N} a_{i,j}\, x_j \right), \quad i = N{-}1,\ldots,1 \quad \text{(retro-substituição)}$$

Para ilustrar o funcionamento dos algoritmos, resolva os seguintes sistemas de equações:

$$\begin{cases} 2x_1 - 5x_2 + 4x_3 = 1 \\ x_1 + 3x_2 - 6x_3 = -10 \\ -x_1 - 2x_2 + 5x_3 = 9 \end{cases} \qquad \begin{cases} 2x_1 - 5x_2 + 4x_3 = 1 \\ x_1 + 3x_2 - 6x_3 = -DRE3/100 \\ -x_1 - 2x_2 + 5x_3 = 9 \end{cases}$$

Apresentando como resultados as matrizes L, U e o vetor solução x (em que DRE3 são os 3 últimos dígitos do seu DRE).

5) Implementar o seguinte algoritmo para o cálculo numérico de integrais pelo método de Simpson em subintervalos (Regra de Simpson Composta):

ETAPA 0: Especificação pelo usuário de *a, b, N* (número inicial de parábolas, $N > 0$), δ (critério de convergência) e ε (menor valor do passo de integração, h_{min}).

ETAPA 1: Cálculo da primeira integral numérica (com *N* parábolas):

$$S_0 \leftarrow f(a) + f(b)$$

$$h \leftarrow \frac{b-a}{2 \cdot N}$$

$$S_{impar} \leftarrow \sum_{j=1}^{N} f\left[a + (2j-1) \cdot h\right]$$

Se $N > 1$ então $S_{par} \leftarrow \sum_{j=1}^{N-1} f(a + 2j \cdot h)$, senão $S_{par} \leftarrow 0$

$$I \leftarrow \frac{h}{3} \cdot \left(S_0 + 4 \cdot S_{impar} + 2 \cdot S_{par}\right)$$

ETAPA 2: Processo Recursivo:

Faça

$$I_{velho} \leftarrow I$$

$$N \leftarrow N + N$$

$$h \leftarrow \frac{h}{2}$$

$$S_{par} \leftarrow S_{par} + S_{ímpar}$$

$$S_{impar} \leftarrow \sum_{j=1}^{N} f\left[a + \left(2j-1\right) \cdot h\right]$$

$$I \leftarrow \frac{h}{3} \cdot \left(S_0 + 4 \cdot S_{impar} + 2 \cdot S_{par}\right)$$

Enquanto $| I - I_{velho} | > \delta$ e $| h | > \varepsilon$

ETAPA 3: Cálculo final da integral numérica (extrapolação de Richardson):

$$I \leftarrow \frac{16 \cdot I - I_{velho}}{15}$$

Imprima o valor de *I*.

FIM

Para ilustrar o funcionamento do algoritmo, calcule a seguinte integral:

$$I = \int_0^1 3x \frac{senh(\Phi\, x)}{senh(\Phi)} dx \qquad \text{para} \quad \Phi = \text{DRE3}/200$$

Apresentando como resultados o valor da integral, o número de intervalos usados para o critério de convergência $\delta = 10^{-6}$ e $\varepsilon = 10^{-8}$, e o montante da correção pela extrapolação de Richardson (em que DRE3 são os 3 últimos dígitos do seu DRE).

6) Em um biorreator contínuo de tanque agitado, a volume constante V = 10 m^3, e temperatura fixa de 35 °C, com alimentação de substrato a uma concentração de x_{2f} = 4,0 kg/m^3 e taxa F = 3 m^3/h, ocorre uma reação de fermentação descrita pelo seguinte modelo:

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{\mu_{\max}\, x_1\, x_2}{k_m + x_2} - \left(\frac{F}{V} + k_d\right) x_1 \qquad \text{com } x_1(0) = 1{,}65$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{F}{V}\left(x_{2f} - x_2\right) - \frac{1}{Y}\left(\frac{\mu_{\max}\, x_1\, x_2}{k_m + x_2}\right) \qquad \text{com } x_2(0) = 0{,}2$$

em que x_1 é a concentração de células (biomassa), x_2 é a concentração de substrato, ambas em kg/m^3, $\mu_{\max}$ = 0,53 h^{-1} é a taxa máxima de crescimento específico, k_d = 0,01 h^{-1} é a constante da taxa de morte celular, e k_m = 0,12 kg/m^3 é a constante de saturação da taxa de crescimento celular e Y = 0,4 é o fator de rendimento da fermentação.

Implementar o método de Runge-Kutta de 4ª ordem com o arranjo de Butcher:

0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0
1/2	0	½	0	0
1	0	0	1	0
	1/6	**1/3**	**1/3**	**1/6**

e utilizá-lo para resolver o problema de valor inicial do biorreator operando por 30 h com um passo de 0,1 h. Mostrar os gráficos em Python da evolução temporal das concentrações de biomassa e de substrato. Depois mude o valor da vazão para F = DRE3/300 m^3/h e mostre os novos gráficos da biomassa e substrato (em que DRE3 são os 3 últimos dígitos do seu DRE).

7) Implementar o seguinte algoritmo do método do gradiente conjugado para determinar um mínimo local de uma função objetivo:

1) Escolher um ponto inicial x^{o}
2) Calcular $d^{o} \leftarrow -\nabla S(x^{o})$, $k \leftarrow 0$
3) Encontrar α_k tal que $S(x^k + \alpha_k\, d^k) = \min\limits_{\alpha > 0}\; g_k(\alpha) = S(x^k + \alpha\, d^k)$
4) Calcular $x^{k+1} \leftarrow x^k + \alpha_k\, d^k$ e $\nabla S(x^{k+1})$
5) **Se** o critério de convergência foi satisfeito, **então** FIM.
6) Calcular $d^{k+1} \leftarrow -\nabla S(x^{k+1}) + d^k \dfrac{\nabla^T S(x^{k+1}) \nabla S(x^{k+1})}{\nabla^T S(x^k) \nabla S(x^k)}$, $k \leftarrow k + 1$
7) **Se** $k = n$, isto é, realizou n direções L.I. **então** fazer $x^{o} \leftarrow x^k$ e (ir para 2)
senão (ir para 3)

e utilizá-lo para obter o mínimo da função:

$$S(x_1, x_2) = 5\, x_1^2 - 2\,(5\, x_1 + x_2) + 2\, x_1\, x_2 + 3\, x_2^2 + \text{DRE3}/400$$

Considerando como critério de convergência a norma euclidiana do erro em x de iterações adjacentes menor que 10^{-6}. Reportar o ponto inicial e o ponto de mínimo e o valor da função objetivo nesses pontos, o número de iterações e o gráfico tridimensional em Python da função objetivo (em que DRE3 são os 3 últimos dígitos do seu DRE).