

DATA DE ENTREGA: 21 DE NOVEMBRO DE 2002

1. É dada a seguinte família de métodos de passo simples

$$u_{i+1} + \alpha u_i = h[\beta_0 f(t_i, u_i) + \beta_1 f(t_{i+1}, u_{i+1})].$$

Determine os valores dos parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta_0$  e  $\beta_1$  que tornam máxima a ordem de consistência do método. Compare o método resultante com o dos trapézios e tire conclusões.

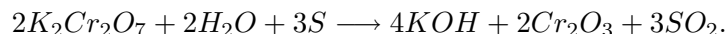
2. Dê uma interpretação geométrica do método de Euler-Cauchy

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}.$$

3. Determine a região de estabilidade absoluta do método de Heun

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}.$$

4. A equação química irreversível na qual duas moléculas de dicromato de potássio ( $K_2Cr_2O_7$ ) sólido, duas moléculas de água ( $H_2O$ ) e três átomos de enxofre ( $S$ ) sólido dão origem a três moléculas de dióxido de enxofre ( $SO_2$ ) gasoso, quatro moléculas de hidróxido de potássio ( $KOH$ ) sólido e duas moléculas óxido de crómio ( $Cr_2O_3$ ) sólido pode ser representada, simbolicamente, pelo esquema



Se existirem inicialmente  $n_1$  moléculas de  $2K_2Cr_2O_7$ ,  $n_2$  moléculas de  $H_2O$  e  $n_3$  moléculas de  $S$  a equação seguinte descreve a quantidade  $x(t)$  de  $KOH$  ao fim de um tempo  $t$  (em segundos)

$$x' = k \left( n_1 - \frac{x}{2} \right)^2 \left( n_2 - \frac{x}{2} \right)^2 \left( n_3 - \frac{3x}{4} \right)^3,$$

onde  $k$  é a velocidade da reação (constante). Se  $k = 6.22 \times 10^{-19}$ ,  $n_1 = n_2 = 1000$  e  $n_3 = 1500$ , quantas unidades de hidróxido de potássio serão formadas ao fim de 2 segundos?

Responda a esta questão usando o Runge-Kutta-Fehlberg  $RKF4(5)$

0						
1/4	1/4					
3/8	3/32	9/32				
12/13	1932/2197	-7200/2197	7296/2197			
1	439/216	-8	3680/513	-845/4104		
1/2	-8/27	2	-3544/2565	1859/4104	-11/40	
	25/216	0	1408/2565	2197/4104	-1/5	0
	16/135	0	6656/12825	28561/56430	-9/50	2/55

com um algoritmo de passo variável.