Gabarito da Lista de exercícios de Sistemas Algébricos

1) O modelo estacionário do estágio *i* de uma coluna de absorção de prato, na qual ocorre uma reação química irreversível na fase líquida, é descrito pelas equações de balanço de massa abaixo:

$L \cdot x_{i+1} + V \cdot y_{i-1} = L \cdot x_i + V \cdot y_i + H \cdot k \cdot x_i^2$ para $i = 1,\ 2,\ \cdots, N$ (*N*: número total de pratos)

L: vazão molar da fase líquida;

V: vazão molar da fase gás;

H: número de mols da fase líquida no prato *i*;

k: constante de velocidade da reação [tempo^{-1}];

x_i : fração molar na fase líquida;

y_i : fração molar na fase gás.

A relação de equilíbrio entre as fases é dada pela expressão: $y_i = \dfrac{m \cdot x_i}{1 + \alpha \cdot x_i}$.

Utilizando os seguintes valores das varáveis e de parâmetros: *L* = 40 kmol/h; *V* = 60 kmol/h; *H* = 20 kmol; *k* = ½ h^{-1}, *m* = 0,75 , α = 0,05, *N* = 6; y_0 = 0,254237 e x_7 = 0 , as equações do modelo transformam-se em:

$$\frac{2}{3} \cdot y_{i-1} - \left(x_i + \frac{2}{3} \cdot y_i + \frac{x_i^2}{6} \right) + x_{i+1} = 0 \text{ para } i = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6$$

Em que $y_0 = 0,254237$; $x_7 = 0$ e $y_i = \dfrac{0,75 \cdot x_i}{1 + 0,05 \cdot x_i}$ para $i =$ 1, 2, 3, 4, 5, 6 .

Para resolver este sistema, adotam-se inicialmente os valores iniciais que constituem a solução do problema linear:

$$\frac{2}{3} \cdot y_{i-1}^{(0)} - \left(x_i^{(0)} + \frac{2}{3} \cdot y_i^{(0)} \right) + x_{i+1}^{(0)} = 0 \text{ para } i = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6$$

Em que $y_0^{(0)} = 0,254237$; $x_7^{(0)} = 0$ e $y_i^{(0)} = 0,75 \cdot x_i^{(0)}$ para $i = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6$

Este sistema por ser linear e tri-diagonal pode ser resolvido recursivamente resultando nos valores:

$$\begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ x_3^{(0)} \\ x_4^{(0)} \\ x_5^{(0)} \\ x_6^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,168157 \\ 0,082744 \\ 0,040037 \\ 0,018684 \\ 0,008007 \\ 0,002669 \end{pmatrix}$$

1a) Explique sucintamente como estes valores foram determinados;

Substituindo $y_i^{(0)} = 0,75 \cdot x_i^{(0)}$ em: $\dfrac{2}{3} \cdot y_{i-1}^{(0)} - \left(x_i^{(0)} + \dfrac{2}{3} \cdot y_i^{(0)} \right) + x_{i+1}^{(0)} = 0$ para $i = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6$

Resulta:

$x_{i-1}^{(0)} - 3 \cdot x_i^{(0)} + 2 \cdot x_{i+1}^{(0)} = 0$ para $i = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6$, com $x_0^{(0)} = \dfrac{y_0^{(0)}}{0,75} = \dfrac{4}{3} \cdot y_0^{(0)}$; $x_7^{(0)} = 0$

Para i =1, tem-se: $3 \cdot x_1^{(0)} = x_0^{(0)} + 2 \cdot x_2^{(0)} \Rightarrow x_1^{(0)} = \dfrac{x_0^{(0)}}{3} + \dfrac{2}{3} \cdot x_2^{(0)} = \dfrac{4 \cdot y_0^{(0)}}{9} + \dfrac{2}{3} \cdot x_2^{(0)}$

Para $i = 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6$ $x_i^{(0)} = \gamma_i + \dfrac{2}{\beta_i} \cdot x_{i+1}^{(0)}$, como $x_1^{(0)} = \dfrac{4 \cdot y_0^{(0)}}{9} + \dfrac{2}{3} \cdot x_2^{(0)}$, tem-se

$\beta_1 = 3$ e $\gamma_1 = \dfrac{4 \cdot y_0^{(0)}}{9}$

Mas: $x_{i-1}^{(0)} = \gamma_{i-1} + \dfrac{2}{\beta_{i-1}} \cdot x_i^{(0)}$, logo:

$$3 \cdot x_i^{(0)} - x_{i-1}^{(0)} = \left(3 - \frac{2}{\beta_{i-1}}\right) \cdot x_i^{(0)} - \gamma_{i-1} = 2 \cdot x_{i+1}^{(0)} \Rightarrow x_i^{(0)} = \frac{\gamma_{i-1}}{3 - \dfrac{2}{\beta_{i-1}}} + \frac{2}{3 - \dfrac{2}{\beta_{i-1}}} \cdot x_{i+1}^{(0)}$$

Permitindo identificar: $\beta_i = 3 - \dfrac{2}{\beta_{i-1}}$ e $\gamma_i = \dfrac{\gamma_{i-1}}{\beta_i}$ para $i = 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6$, com

$\beta_1 = 3$ e $\gamma_1 = \dfrac{4 \cdot y_0^{(0)}}{9} = \dfrac{x_0^{(0)}}{\beta_1}$.

Resultando em:

k	1	2	3	4	5	6
β_k	3,000000	2,333333	2,142857	2,066667	2,032258	2,015873
γ_k	0,112994	0,048426	0,022599	0,010935	0,005381	0,002669

Como $x_7^{(0)} = 0$, $x_6^{(0)} = \gamma_6 + \dfrac{x_7^{(0)}}{\beta_6} = \gamma_6$ e $x_i^{(0)} = \gamma_i + \dfrac{2}{\beta_i} \cdot x_{i+1}^{(0)}$ para i =5, 4, 3, 2, 1.

Obtém-se:

k	6	5	4	3	2	1
$x_k^{(0)}$	0,002669	0,008007	0,018684	0,040037	0,082744	0,168157

1b) Para resolver o problema aplicou-se o método de Newton-Raphson ao sistema original, indique abaixo como seria este procedimento indicando claramente a matriz Jacobiana correspondente;

Representando o sistema pelas equações:

Primeira equação: $f_1(x_1, x_2) = \dfrac{2}{3} \cdot y_0 - \left(1 + \dfrac{2}{3} \cdot \dfrac{0,75}{1 + 0,05 \cdot x_1} + \dfrac{x_1}{6}\right) \cdot x_1 + x_2 = 0$

i´ésima equação: $f_i\left(x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right)=\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75\cdot x_{i-1}}{1+0,05\cdot x_{i-1}}-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{1+0,05\cdot x_i}+\frac{x_i}{6}\right)\cdot x_i+x_{i+1}=0$ para i = 2, 3,4,5

Última equação: $f_6\left(x_5,x_6\right)=\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75\cdot x_5}{1+0,05\cdot x_5}-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{1+0,05\cdot x_6}+\frac{x_i}{6}\right)\cdot x_6=0$.

Em vista de $\frac{d}{dx}\left(\frac{0,75\cdot x}{1+0,05\cdot x}\right)=\frac{0,75}{\left(1+0,05\cdot x\right)^2}$, tem-se:

$$J_{1,1}=\frac{\partial f_1\left(x_1,x_2\right)}{\partial x_1}=-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{\left(1+0,05\cdot x_1\right)^2}+\frac{x_1}{3}\right)\text{ e }J_{1,2}=\frac{\partial f_1\left(x_1,x_2\right)}{\partial x_2}=1$$

$$J_{i,i-1}=\frac{\partial f_i\left(x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right)}{\partial x_{i-1}}=\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{\left(1+0,05\cdot x_{i-1}\right)^2};\ J_{i,i}=\frac{\partial f_i\left(x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right)}{\partial x_i}=-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{\left(1+0,05\cdot x_i\right)^2}+\frac{x_i}{3}\right)\text{ e}$$

$$J_{i,i+1}=\frac{\partial f_i\left(x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right)}{\partial x_{i+1}}=1\text{ para } i = 2, 3,4,5$$

$$J_{6,5}=\frac{\partial f_6\left(x_5,x_6\right)}{\partial x_5}=\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{\left(1+0,05\cdot x_5\right)^2}\quad\text{e}\quad J_{6,6}=\frac{\partial f_6\left(x_5,x_6\right)}{\partial x_6}=-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{\left(1+0,05\cdot x_6\right)^2}+\frac{x_6}{3}\right).$$

Os demais elementos da matriz **J** são nulos!

Ter-se-ia em cada iteração um sistema tridiagonal:

Primeira equação:

$$b_1^{(k)}\cdot\left[x_1^{(k+1)}-x_1^{(k)}\right]+\left[x_2^{(k+1)}-x_2^{(k)}\right]=d_1^{(k)}=\frac{2}{3}\cdot y_0-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{1+0,05\cdot x_1^{(k)}}+\frac{x_1^{(k)}}{6}\right)\cdot x_1^{(k)}+x_2^{(k)}$$

i-ésima equação:

$$a_i^{(k)}\cdot\left[x_{i-1}^{(k+1)}-x_{i-1}^{(k)}\right]+b_i^{(k)}\cdot\left[x_i^{(k+1)}-x_i^{(k)}\right]+\left[x_{i+1}^{(k+1)}-x_{i+1}^{(k)}\right]=d_i^{(k)}=$$

$$=\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75\cdot x_{i-1}^{(k)}}{1+0,05\cdot x_{i-1}^{(k)}}-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{1+0,05\cdot x_i^{(k)}}+\frac{x_i^{(k)}}{6}\right)\cdot x_i^{(k)}+x_{i+1}^{(k)}$$

Última equação:

$$a_6^{(k)}\cdot\left[x_5^{(k+1)}-x_5^{(k)}\right]+b_6^{(k)}\cdot\left[x_6^{(k+1)}-x_6^{(k)}\right]=d_6^{(k)}=\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75\cdot x_5^{(k)}}{1+0,05\cdot x_5^{(k)}}-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{1+0,05\cdot x_6^{(k)}}+\frac{x_6^{(k)}}{6}\right)\cdot x_6^{(k)}$$

Sendo: $a_i^{(k)}=\left.\frac{\partial f_i\left(x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right)}{\partial x_{i-1}}\right|_{x_{i-1}^{(k)}}=\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{\left(1+0,05\cdot x_{i-1}^{(k)}\right)^2}$ para i = 2, 3, 4, 5, e 6

$$b_i^{(k)}=\left.\frac{\partial f_i\left(x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right)}{\partial x_i}\right|_{x_i^{(k)}}=-\left(1+\frac{2}{3}\cdot\frac{0,75}{\left(1+0,05\cdot x_i^{(k)}\right)^2}+\frac{x_i^{(k)}}{3}\right)\text{ para } i = 1, 2, 3, 4, 5, e 6$$

1c) Como pode ser aproveitada a estrutura tri-diagonal da matriz Jacobiana no método iterativo desenvolvido?

Após determinar os valores de $a_i^{(k)}, b_i^{(k)}$ e $d_i^{(k)}$ aplica-se em cada iteração o método de Thomas levando-se em conta que $c_i^{(k)} \equiv 1$ (não varia com *i* e *k*!).

1d) Na Tabela a seguir apresentam-se os valores obtidos nas 3 primeiras iterações do procedimento implementado em computador. Comente estes resultados!

x_i	Chute Inicial	Iteração 1	Iteração 2	Iteração 3
x_1	0,168157	0,162553	0,162543	0,162543
x_2	0,082744	0,078082	0,078072	0,078072
x_3	0,040037	0,037362	0,037356	0,037356
x_4	0,018684	0,017350	0,017347	0,017347
x_5	0,008007	0,007422	0,007420	0,007420
x_6	0,002669	0,002472	0,002472	0,002472

2) Em um conjunto de reações químicas, para determinar o número de reações independentes monta-se uma matriz composta pelos coeficientes estequiométricos das reações considerando-os como positivo quando o componente for reagente na reação correspondente e como negativo quando o componente for produto na reação (esta matriz se chama de *matriz estequiométrica*). Assim para o conjunto de reações químicas:

1ª Reação: $4\ NH_3 + 5\ O_2 \leftrightarrows 4\ NO + 6\ H_2O$

2ª Reação: $4\ NH_3 + 3\ O_2 \leftrightarrows 2\ N_2 + 6\ H_2O$

3ª Reação: $4\ NH_3 + 6\ NO \leftrightarrows 5\ N_2 + 6\ H_2O$

4ª Reação: $2\ NO + O_2 \leftrightarrows 2\ NO_2$

5ª Reação: $2\ NO \leftrightarrows N_2 + O_2$

6ª Reação: $N_2 + 2\ O_2 \leftrightarrows 2\ NO_2$

A *matriz estequiométrica* correspondente a este esquema de reações é:

$$A := \begin{pmatrix} 4 & 5 & -6 & 0 & -4 & 0 \\ 4 & 3 & -6 & -2 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -6 & -5 & 6 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

O número de reações independentes é igual ao *posto* (*rank*) da matriz **A**, sendo neste exemplo igual a 3 (três). Baseado nesta informação indique três reações do esquema apresentado que sejam independentes entre si, justificando sua escolha pelo cálculo do posto da matriz estequiométrica das reações escolhidas.

Primeira Tentativa: as três primeiras reações . $B := \text{augment}\left(M^{\langle 0\rangle}, M^{\langle 1\rangle}, M^{\langle 2\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 5 & -6 & 0 & -4 & 0 \\ 4 & 3 & -6 & -2 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -6 & -5 & 6 & 0 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 2$ ***Fracasso***	**Sexta Tentativa: Segunda, terceira e quinta reações.** $B := \text{augment}\left(M^{\langle 1\rangle}, M^{\langle 2\rangle}, M^{\langle 4\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 3 & -6 & -2 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -6 & -5 & 6 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 2$ ***Fracasso***
Segunda Tentativa: Primeira, segunda e quarta reações. $B := \text{augment}\left(M^{\langle 0\rangle}, M^{\langle 1\rangle}, M^{\langle 3\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 5 & -6 & 0 & -4 & 0 \\ 4 & 3 & -6 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & -2 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 3$ ***Sucesso***	**Sétima Tentativa: Segunda, terceira e sexta reações.** $B := \text{augment}\left(M^{\langle 1\rangle}, M^{\langle 2\rangle}, M^{\langle 5\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 3 & -6 & -2 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -6 & -5 & 6 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & -2 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 3$ ***Sucesso***
Terceira Tentativa: Primeira, segunda e quinta reações. $B := \text{augment}\left(M^{\langle 0\rangle}, M^{\langle 1\rangle}, M^{\langle 4\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 5 & -6 & 0 & -4 & 0 \\ 4 & 3 & -6 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 2$ ***Fracasso***	**Oitava Tentativa: Terceira, quarta e quinta reações.** $B := \text{augment}\left(M^{\langle 2\rangle}, M^{\langle 3\rangle}, M^{\langle 4\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 0 & -6 & -5 & 6 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 3$ ***Sucesso***
Quarta Tentativa: Primeira, segunda e sexta reações. $B := \text{augment}\left(M^{\langle 0\rangle}, M^{\langle 1\rangle}, M^{\langle 5\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 5 & -6 & 0 & -4 & 0 \\ 4 & 3 & -6 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & -2 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 3$ ***Sucesso***	**Nona Tentativa: Terceira, quarta e sexta reações.** $B := \text{augment}\left(M^{\langle 2\rangle}, M^{\langle 3\rangle}, M^{\langle 5\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 0 & -6 & -5 & 6 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & -2 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 3$ ***Sucesso***
Quinta Tentativa: Segunda, terceira e quarta reações. $B := \text{augment}\left(M^{\langle 1\rangle}, M^{\langle 2\rangle}, M^{\langle 3\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 4 & 3 & -6 & -2 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -6 & -5 & 6 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & -2 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 3$ ***Sucesso***	**Décima Tentativa: Quarta, quinta e sexta reações.** $B := \text{augment}\left(M^{\langle 3\rangle}, M^{\langle 4\rangle}, M^{\langle 5\rangle}\right)^T$ $B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & -2 \end{pmatrix}$ $\text{rank}(B) = 2$ ***Fracasso***

3) O método de Gauss-Jacobi consiste em resolver de forma iterativa o sistema linear de equações: $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot x_j = b_i$ para $i = 1, 2, \ldots, n$ na forma:

Sendo $x_j^{(r)}$ o valor da variável x_j na iteração r. Este procedimento tem a convergência garantida se: $\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{n} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ik}} \right| < 1$ para $i = 1, 2, \ldots, n$.

Baseado nestas informações descreva claramente um procedimento iterativo, inequivocamente convergente, resultante da aplicação do método de Gauss-Jacobi ao sistema linear abaixo:

$$\begin{cases} x_1 + 2 \cdot x_2 + 4 \cdot x_3 = 11 \\ 2 \cdot x_2 - x_3 = 3 \\ 4 \cdot x_1 + x_2 + 2 \cdot x_3 = 16 \end{cases}$$

<u>Variável x_1</u>:

Através da primeira equação: $x_1 = 11 - 2 \cdot x_2 - 4 \cdot x_3 \Rightarrow |-2| + |-4| = 6 > 1$: *convergência não assegurada*

Através da segunda equação: $2 \cdot x_2 - x_3 = 3 \Rightarrow$ x_1 não está presente: *não é possível explicitar* x_1

Através da terceira equação: $x_1 = 4 - \frac{1}{4} \cdot x_2 - \frac{1}{2} \cdot x_3 \Rightarrow \left|-\frac{1}{4}\right| + \left|-\frac{1}{2}\right| = \frac{3}{4} < 1$: *convergência assegurada*

<u>Variável x_2</u>:

Através da primeira equação: $x_2 = \frac{11}{2} - \frac{1}{2} \cdot x_1 - 2 \cdot x_3 \Rightarrow \left|-\frac{1}{2}\right| + \left|-2\right| = \frac{5}{2} > 1$: *convergência não assegurada*

Através da segunda equação: $x_2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot x_3 \Rightarrow \left|\frac{1}{2}\right| < 1$: *convergência assegurada*

<u>Variável x_3</u>:

Através da primeira equação: $x_3 = \frac{11}{4} - \frac{1}{4} \cdot x_1 - \frac{1}{2} \cdot x_2 \Rightarrow \left|-\frac{1}{4}\right| + \left|-\frac{1}{2}\right| = \frac{3}{4} < 1$: *convergência assegurada*

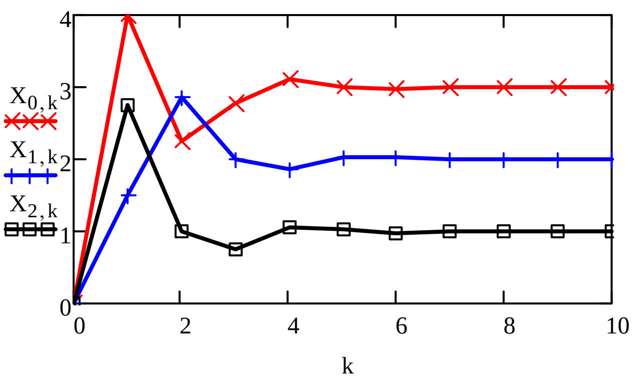
Resultando no procedimento iterativo:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = 4 - \frac{1}{4} \cdot x_2^{(k)} - \frac{1}{2} \cdot x_3^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot x_3^{(k)} \\ x_3^{(k+1)} = \frac{11}{4} - \frac{1}{4} \cdot x_1^{(k)} - \frac{1}{2} \cdot x_2^{(k)} \end{cases}$$

Com $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = x_3^{(0)} = 0$, obtém-se os resultados:

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$x_1^{(k)}$	0	4,00	2,250	2,781	3,125	3,004	2,978	3,003	3,003	2,999	3,000	3,000
$x_2^{(k)}$	0	1,50	2,875	2,000	1,875	2,027	2,016	1,993	1,999	2,001	2,000	2,000
$x_3^{(k)}$	0	2,75	1,000	0,750	1,055	1,031	0,985	0,998	1,003	1,000	1,000	1,000

Este procedimento iterativo é representado graficamente a seguir:



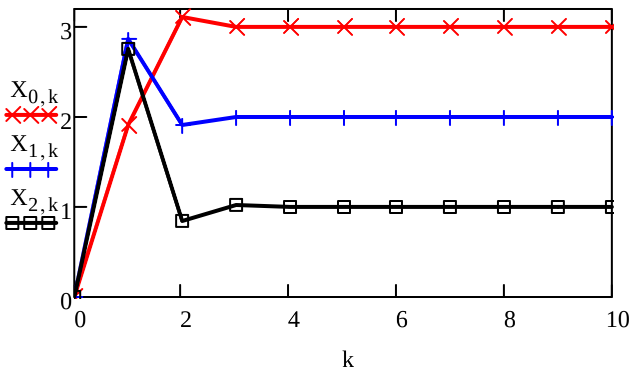
Para acelerar o algoritmo poderíamos modificar o método de acordo com (Gauss-Seidel):

$$\begin{cases} x_3^{(k+1)} = \dfrac{11}{4} - \dfrac{1}{4}\cdot x_1^{(k)} - \dfrac{1}{2}\cdot x_2^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{3}{2} + \dfrac{1}{2}\cdot x_3^{(k+1)} \\ x_1^{(k+1)} = 4 - \dfrac{1}{4}\cdot x_2^{(k+1)} - \dfrac{1}{2}\cdot x_3^{(k+1)} \end{cases}$$

Com $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = x_3^{(0)} = 0$, obtém-se os resultados:

k	0	1	2	3	4	5	6
$x_1^{(k)}$	0	1,906	3,103	2,990	3,001	3,000	3,000
$x_2^{(k)}$	0	2,875	1,918	2,008	1,999	2,000	2,000
$x_3^{(k)}$	0	2,750	0,836	1,015	0,999	1,000	1,000

Este procedimento iterativo é representado graficamente a seguir:



Mostrando-se assim a aceleração do procedimento, pois converge à solução em um menor número de iterações!

4) Uma coluna de absorção é composta por *N* estágios de equilíbrio. As fases gasosa e líquida percorrem a coluna em contracorrente, considera-se a fase gasosa composta de um gás inerte e não solúvel na fase líquida transportando um soluto a uma concentração *y* [massa de soluto/massa de gás inerte] e a fase líquida é composta por um líquido inerte e não volátil que transporta o mesmo soluto a uma concentração *x* [massa de soluto/massa de líquido inerte]. A relação de equilíbrio de fases em cada estágio é suposta linear: $y = K \cdot x$. Considerando que o líquido alimenta a coluna isento do soluto e baseado nas suposições chega-se às equações de balanço do soluto:

Estágio 1: $0 - (1+\alpha)\cdot X_1 + \alpha \cdot X_2 = 0$

Estágio *i* [*i* = 2, ..., *N*–1]: $X_{i-1} - (1+\alpha)\cdot X_i + \alpha \cdot X_{i+1} = 0$

Estágio *N*: $X_{N-1} - (1+\alpha)\cdot X_N + \alpha = 0$

onde $\alpha = K \cdot \dfrac{G}{L}$; $\mathrm{X}_i = \dfrac{y_i}{y_N}$, *G*: vazão mássica de gás inerte (constante) e *L*: vazão mássica de líquido inerte (constante).

4a) Mostre que a solução deste sistema linear e tri-diagonal é expressa por:

$X_i = \alpha^{N+1-i} \cdot \left(\dfrac{\alpha^i - 1}{\alpha^{N+1} - 1} \right)$ para $i = 1, \ldots, N$. Como removeria a aparente singularidade desta expressão para $\alpha = 1$?

A equação de balanço do estágio i é: $X_{i-1} - (1+\alpha) \cdot X_i + \alpha \cdot X_{i+1} = 0$ com $X_0 = 0$ e $X_{N+1} = 1$, essa equação pode ser interpretada como uma equação de diferenças de segunda ordem, linear, coeficientes constantes e homogênea. Para determinar sua solução, supõe-se que a mesma pode ser expressa por: $X_{i+1} = p \cdot X_i$, ou seja: $X_i = p \cdot X_{i-1}$ e $X_{i+1} = p \cdot X_i = p^2 \cdot X_{i-1}$, substituindo as duas últimas expressões em: $X_{i-1} - (1+\alpha) \cdot X_i + \alpha \cdot X_{i+1} = 0$, resulta:

$\left[\alpha \cdot p^2 - (1+\alpha) \cdot p + 1 \right] \cdot X_{i-1} = \left[(p-1) \cdot (\alpha \cdot p - 1) \right] \cdot X_{i-1} = 0$, como $X_{i-1} \neq 0$ há dois valores de p que satisfazem a equação: $p = 1$ e $p = \dfrac{1}{\alpha}$ o que permite expressar a solução da equação de diferenças por: $X_i = A + \dfrac{B}{\alpha^i}$, como $X_0 = A + B = 0 \Rightarrow B = -A$ e $X_i = \left(1 - \dfrac{1}{\alpha^i} \right) \cdot A = \left(\dfrac{\alpha^i - 1}{\alpha^i} \right) \cdot A$

Como: $X_{N+1} = \left(\dfrac{\alpha^{N+1} - 1}{\alpha^{N+1}} \right) \cdot A = 1 \Rightarrow A = \dfrac{\alpha^{N+1}}{\alpha^{N+1} - 1}$. E, finalmente:

$$\boxed{X_i = \alpha^{N+1-i} \cdot \left(\frac{\alpha^i - 1}{\alpha^{N+1} - 1} \right) \quad \text{para } i = 1, \ldots, N}$$

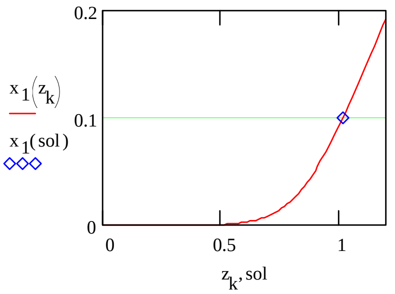
Note que: $\lim\limits_{\alpha \to 1} \dfrac{\alpha^i - 1}{\alpha^{N+1} - 1} = \dfrac{i}{N+1}$, assim quando $\alpha = 1$ a solução do problema é:

$$\boxed{X_i = \frac{i}{N+1} \quad \text{para } i = 1, \ldots, N \quad \text{se } \alpha = 1}$$

4b) Para uma coluna com 10 estágios [N = 10] deseja-se calcular o valor de α que faz com que haja a remoção de 90% do soluto da corrente gasosa, isto é deseja-se determinar α que corresponda a $X_1 = 0{,}1$. Deste modo o problema reduz-se à resolução da equação não linear:

$$X_1 = \alpha^{10} \cdot \left(\frac{\alpha - 1}{\alpha^{11} - 1} \right) = 0{,}1 \;\Rightarrow \alpha^{10} \cdot \left(\frac{\alpha - 1}{\alpha^{11} - 1} \right) - 0{,}1 = 0$$

Abaixo, representa-se o gráfico de X_1 *versus* α

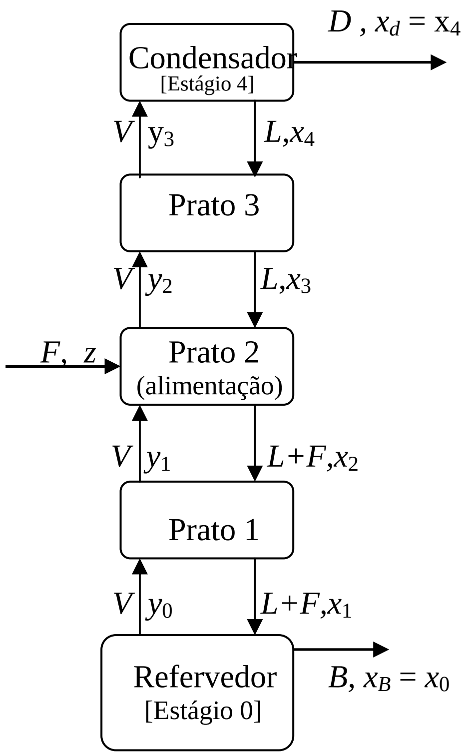


Aplicou-se a essa equação o método de Newton-Raphson obtendo-se os resultados:

chute inicial = 0,8		*chute inicial* = 1,5		*chute inicial* = 0,4	
iteração k	α_k	iteração k	α_k	iteração k	α_k
0	0,8	0	1,5	0	0,4
1	1,1704	1	0,9361	1	68,4705
2	1,0250	2	1,0294	2	$-4{,}0824.\ 10^3$
3	1,0197	3	1,0197	3	DIVERGIU
4	1,0196	4	1,0196		
5	1,0196	5	1,0196		

Descreva o procedimento iterativo aplicado e comente os resultados apresentados, em particular, explicando por que com *chute inicial* = 0,4 o procedimento iterativo não convergiu.

5) Uma coluna de destilação de 3 pratos é operada de forma contínua para destilar um mistura binária, segundo o esquema:



Em que as composições acima se referem à fração molar do elemento mais leve.
Considera-se esta mistura binária com a volatilidade relativa constante, isto é:

$$\alpha = \left(\frac{y_i}{1-y_i}\right)\cdot\left(\frac{1-x_i}{x_i}\right) \Rightarrow x_i = \frac{y_i}{y_i+\alpha\cdot(1-y_i)} \quad \text{ou } y_i = \frac{\alpha\cdot x_i}{\alpha\cdot x_i+(1-x_i)} \quad \text{para } i = 0,\ 1,\ 2 \text{ e } 3.$$

Os balanços molares do elemento mais volátil nos estágios são descritos por:

<u>Refervedor</u> (estágio "0"): $$(1+R)\cdot(y_0-x_0)+\left(R+\frac{F}{D}\right)\cdot(x_0-x_1)=0$$

<u>Prato 1</u>: $$(1+R)\cdot(y_1-y_0)+\left(R+\frac{F}{D}\right)\cdot(x_1-x_2)=0$$

<u>Prato 2</u> (prato de alimentação): $$(1+R)\cdot(y_2-y_1)+\left(R+\frac{F}{D}\right)\cdot x_2-R\cdot x_3=\frac{F}{D}\cdot z$$

Prato 3: $(1+R)\cdot(y_3-y_2)+R\cdot(x_3-x_4)=0$

Condensador (estágio 4): $y_3-x_4=0$

Sendo: $R = L/D$: razão de refluxo; $V=(1+R).D$: vazão molar do vapor.

Além destes balanços têm-se os balanços globais:

$$\begin{cases} B+D=F \\ B\cdot x_B+D\cdot x_D=F\cdot z \end{cases}$$

Sendo: $x_B = x_0$ e $x_D = x_4$.

Sabendo-se que F = 100 kmol/h e z = 0,5, considere os dois problemas:

5a) Dados D = 80 kmol/h e R = 5 calcular as vazões molares B, L e V e as composições internas da coluna;

5b) Dados x_D = 0,8 e x_B = 0,25 calcular as vazões molares D, B, L, V e R e as composições internas da coluna.

Descreva de forma detalhada os procedimentos numéricos que deveriam ser implementados para resolver cada um dos problemas, enfatizando em sua descrição as condições iniciais a serem adotadas.

Abaixo se apresentam os resultados convergidos aplicando procedimentos numéricos adequados:

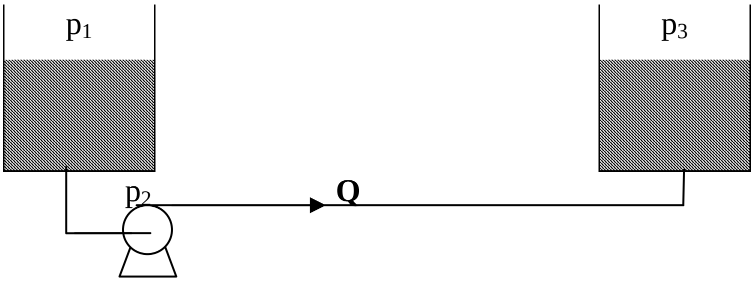
Problema a: B = 20 kmol/h; L = 400 kmol/h e V = 480 kmol/h

i	0	1	2	3
x_i	0,009 (produto de fundo)	0,034	0,117	0,292
y_i	0,035	0,122	0,347	0,623 (produto de topo)

Problema b: D = 61,538 kmol/h; B = 38,462 kmol/h; L = 489,721 kmol/h; V = 551,26 kmol/h e R = 7,958

i	0	1	2	3
x_i	0,020 (produto de fundo)	0,072	0,222	0,500
y_i	0,075	0,236	0,533	0,800 (produto de topo)

6) No sistema hidráulico abaixo, uma bomba centrífuga é utilizada para transferir líquido de um tanque a outro, estando os tanques no mesmo nível



A bomba eleva a pressão do líquido de p_1 (pressão atmosférica) a p_2, mas ocorre uma perda de carga na tubulação que liga os dois tanques e a pressão na saída da tubulação cai para p_3 novamente a pressão atmosférica.

A elevação da pressão devido à bomba centrífuga é dada por sua curva característica e é expressa por:

$$p_2 - p_1 = a - b \cdot Q^{3/2}$$

Sendo a e b constantes características da bomba e Q a vazão volumétrica.

A perda de carga na tubulação é expressa por: $p_2 - p_3 = 8 \cdot \dfrac{f_M \cdot \rho \cdot L \cdot Q^2}{\pi^2 \cdot D^5}$

Sendo:

f_M : fator de atrito de Moody do interior da tubulação (suposto constante);

ρ : massa específica do líquido;

L : comprimento da tubulação;

D: diâmetro interno do tubo.

Calcule a vazão de líquido e a pressão na saída da bomba nos dois casos abaixo:

	Dados **1**	Dados **2**
D (polegadas)	1,049	2,469
L (pés)	50,0	210,6
f_M (adimensional)	0,032	0,026
a , psi	16,7	38,5
b, psi/(gpm)$^{1.5}$	0,052	0,0296

Resolver o problema para os dois conjuntos de dados e para os dois líquidos: (a) água: ρ = 62,4 lb_m/ft^3 ; (b) querosene: ρ =51,4 lb_m/ft^3.

$D := \begin{pmatrix} 1.049 \\ 2.469 \end{pmatrix} \cdot in \quad L := \begin{pmatrix} 50 \\ 210.6 \end{pmatrix} \cdot ft \quad \rho := \begin{pmatrix} 62.4 \\ 51.4 \end{pmatrix} \cdot \frac{lb}{ft^3} \quad f_M := \begin{pmatrix} .032 \\ .026 \end{pmatrix} \quad a := \begin{pmatrix} 16.7 \\ 38.5 \end{pmatrix} \cdot psi \quad b := \begin{pmatrix} .052 \\ .0296 \end{pmatrix} \cdot \frac{psi}{\left(\frac{gal}{min}\right)^{1.5}}$

$p_{ref} := 1 \cdot atm$

$\alpha := \frac{a}{p_{ref}} \qquad \alpha = \begin{pmatrix} 1.136 \\ 2.62 \end{pmatrix}$

$Q_{ref} := \begin{bmatrix} \left(\frac{a_0 - p_{ref}}{b_0}\right)^{\frac{2}{3}} \\ \left(\frac{a_1 - p_{ref}}{b_1}\right)^{\frac{2}{3}} \end{bmatrix} \qquad Q_{ref} = \begin{pmatrix} 7.198\times 10^{-4} \\ 5.456\times 10^{-3} \end{pmatrix} \frac{m^3}{s}$

$\beta := \begin{bmatrix} \frac{b_0 \cdot \left(Q_{ref_0}\right)^{1.5}}{p_{ref}} \\ \frac{b_1 \cdot \left(Q_{ref_1}\right)^{1.5}}{p_{ref}} \end{bmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} 0.136 \\ 1.62 \end{pmatrix} \qquad \gamma := \begin{bmatrix} \frac{8 \cdot f_{M_0} \cdot \rho_0 \cdot L_0 \cdot \left(Q_{ref_0}\right)^2}{\pi^2 \cdot \left(D_0\right)^5 \cdot p_{ref}} \\ \frac{8 \cdot f_{M_1} \cdot \rho_1 \cdot L_1 \cdot \left(Q_{ref_1}\right)^2}{\pi^2 \cdot \left(D_1\right)^5 \cdot p_{ref}} \end{bmatrix} \qquad \gamma = \begin{pmatrix} 0.15 \\ 0.337 \end{pmatrix}$

$d := \frac{\rho}{\rho_0} \qquad d = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.824 \end{pmatrix}$

$f(x,i,j) := \begin{bmatrix} x_0 - 1 - \left[\alpha_i - \beta_i \cdot \left(x_1\right)^{1.5}\right] \\ x_0 - 1 - \gamma_i \cdot d_j \cdot \left(x_1\right)^2 \end{bmatrix} \qquad F(x,i,j) := \begin{pmatrix} 1 & \beta_i \cdot 1.5 \cdot \sqrt{x_1} \\ 1 & -2 \cdot \gamma_i \cdot d_j \cdot x_1 \end{pmatrix}$

$g(x,i,j) := \begin{bmatrix} x_0 - 1 - \left[\alpha_i - \beta_i \cdot \left(x_1\right)^{.75}\right] \\ x_0 - 1 - \gamma_i \cdot d_j \cdot x_1 \end{bmatrix} \qquad G(x,i,j) := \begin{pmatrix} 1 & \frac{\beta_i \cdot .75}{\sqrt[4]{x_1}} \\ 1 & -\gamma_i \cdot d_j \end{pmatrix}$

$ff(x,i,j) := \alpha_i - \beta_i \cdot x^{1.5} - \gamma_i \cdot d_j \cdot x^2 \qquad p2_{adm}(x,i) := 1 + \left(\alpha_i - \beta_i \cdot x^{1.5}\right) \qquad gg(x,i,j) := \alpha_i - \beta_i \cdot x^{.75} - \gamma_i \cdot d_j \cdot x$

$iter := 4$
$i := 0 \qquad j := 0 \qquad k := 1 .. iter$

$x := \begin{bmatrix} 2 \\ \left(\frac{\alpha_i - 1}{\beta_i}\right)^{\frac{2}{3}} \end{bmatrix} \qquad x^{\langle k \rangle} := x^{\langle k-1 \rangle} - \text{lsolve}\left(F\left(x^{\langle k-1 \rangle}, i, j\right), f\left(x^{\langle k-1 \rangle}, i, j\right)\right)$

$x = \begin{pmatrix} 2 & 1.656 & 1.697 & 1.703 & 1.703 \\ 1 & 2.681 & 2.205 & 2.162 & 2.162 \end{pmatrix}$

$p_2 := x_{0,iter} \cdot 1 \cdot atm \qquad p_2 = 1.703 atm \qquad p_2 = 25.027 psi \qquad Q := x_{1,iter} \cdot Q_{ref_i} \qquad Q = 24.662 \frac{gal}{min}$

$k := 0 .. iter \qquad \left|f\left(x^{\langle iter \rangle}, i, j\right)\right| = 1.959\times 10^{-8}$

$x := \begin{bmatrix} 2 \\ \left(\frac{\alpha_i - 1}{\beta_i}\right)^{\frac{4}{3}} \end{bmatrix} \qquad k := 1 .. iter \qquad x^{\langle k \rangle} := x^{\langle k-1 \rangle} - \text{lsolve}\left(G\left(x^{\langle k-1 \rangle}, i, j\right), g\left(x^{\langle k-1 \rangle}, i, j\right)\right)$

$x = \begin{pmatrix} 2 & 1.656 & 1.703 & 1.703 & 1.703 \\ 1 & 4.361 & 4.671 & 4.672 & 4.672 \end{pmatrix}$

$p_2 := x_{0,iter} \cdot 1 \cdot atm \qquad p_2 = 1.703 atm \qquad p_2 = 25.027 psi \qquad Q := \sqrt{x_{1,iter}} \cdot Q_{ref_i} \qquad Q = 24.662 \frac{gal}{min} \qquad \left|g\left(x^{\langle iter \rangle}, i, j\right)\right| = 0$

$X := 1 \qquad X := \text{root}(ff(X,i,j), X) \qquad X = 2.162 \quad p2_{adm}(X,i) \cdot 1 \cdot atm = 1.703 atm \qquad p2_{adm}(X,i) \cdot 1 \cdot atm = 25.027 psi$

$X \cdot Q_{ref_i} = 24.662 \frac{gal}{min}$

7) Na realidade o fator de atrito de Moody no interior da tubulação é função do número de Reynolds, $\mathrm{Re} = \dfrac{D \cdot \rho \cdot \bar{u}}{\mu}$ onde $\bar{u} = \dfrac{Q}{\pi \cdot (D/2)^2}$: velocidade média no interior do tubo e μ: viscosidade do líquido, e da rugosidade interna do tubo em acordo com:

(i) Para $Re \leq 2000$: $f_M = \dfrac{64}{\mathrm{Re}}$;

(ii) Para $Re > 2000$, o valor de f_M é solução da *Equação de Colebrook* expressa por:

$$\frac{1}{\sqrt{f_M}} = -2 \cdot \log\left[\frac{\varepsilon}{3,7 \cdot D} + \frac{2,51}{\mathrm{Re} \cdot \sqrt{f_M}}\right]$$

onde ε: rugosidade interna do tubo;

D: diâmetro interno do tubo.

Um bom *chute* inicial para essa equação é a *equação de Blassius* expressa por:

$f_M = 0.316 \cdot Re^{-0.25}$ que é válida para tubulações lisas (ε=0) e escoamento turbulento.

Refaça todas as situações do problema 1 com essas novas considerações usando ε = 0,0005 ft.

$TOL := 10^{-9}$

$$f(x, \mathrm{Re}, \varepsilon_{adm}) := x + 2 \cdot \log\left(\frac{\varepsilon_{adm}}{3.7} + \frac{2.52 \cdot x}{\mathrm{Re}}\right)$$

$$\mathrm{Moody}(\mathrm{Re}, \varepsilon_{adm}) := \begin{array}{|l} f_M \leftarrow \dfrac{64}{\mathrm{Re}} \quad \text{if } \mathrm{Re} \leq 2000 \\ \text{otherwise} \\ \quad \begin{array}{|l} x \leftarrow \dfrac{\mathrm{Re}^{.125}}{.316} \\ x \leftarrow \mathrm{root}(f(x, \mathrm{Re}, \varepsilon_{adm}), x) \\ f_M \leftarrow \dfrac{1}{x^2} \end{array} \\ f_M \end{array}$$

$$\mathrm{Re}_{ref}(i,j) := \frac{D_i \cdot \rho_j \cdot Q_{ref_i}}{\pi \cdot \left(\dfrac{D_i}{2}\right)^2 \cdot \mu_j} \qquad \varepsilon := \begin{pmatrix} \dfrac{.0005\,\mathrm{ft}}{D_0} \\ \dfrac{.0005\,\mathrm{ft}}{D_1} \end{pmatrix} \qquad \varepsilon = \begin{pmatrix} 5.72 \times 10^{-3} \\ 2.43 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$$

$$F(x,i,j) := \begin{bmatrix} x_0 - 1 - \left[\alpha_i - \beta_i \cdot (x_1)^{1.5}\right] \\ x_0 - 1 - \text{Moody}\left(Re_{ref}(i,j)\cdot x_1, \varepsilon_i\right)\cdot \gamma_i \cdot d_j \cdot (x_1)^2 \end{bmatrix} \qquad I := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad i := 0 \qquad j := 0$$

$$J(x,i,j) := \left| \begin{array}{l} y \leftarrow F(x,i,j) \\ \text{for } k \in 0..1 \\ \quad J^{\langle k \rangle} \leftarrow 10^4 \cdot \left[F\left[x + \left(10^{-4}\right)\cdot I^{\langle k \rangle}, i, j\right] - y\right] \\ J \end{array} \right. \qquad X := \begin{bmatrix} 2 \\ \left(\dfrac{\alpha_i - 1}{\beta_i}\right)^{\frac{2}{3}} \end{bmatrix} \qquad F(X,i,j) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.84 \end{pmatrix}$$

$$iter := 5 \qquad k := 1..iter \qquad X^{\langle k \rangle} := X^{\langle k-1 \rangle} - \text{lsolve}\left(J\left(X^{\langle k-1 \rangle}, i, j\right), F\left(X^{\langle k-1 \rangle}, i, j\right)\right)$$

$$X = \begin{pmatrix} 2 & 1.666 & 1.704 & 1.708 & 1.709 & 1.709 \\ 1 & 2.634 & 2.182 & 2.143 & 2.143 & 2.143 \end{pmatrix} \qquad V := X^{\langle iter \rangle}$$

$$p_2 := V_0 \cdot 1 \cdot atm \qquad p_2 = 1.709 atm \qquad p_2 = 25.108 psi \qquad Q := V_1 \cdot Q_{ref_i} \qquad Q = 24.453 \frac{gal}{min}$$

$$x := 1 \qquad x := \text{root}(g(x,i,j), x) \qquad x := \sqrt{x} \qquad x = 2.143$$

$$G(x,i,j) := \begin{bmatrix} x_0 - 1 - \left[\alpha_i - \beta_i \cdot (x_1)^{.75}\right] \\ x_0 - 1 - \text{Moody}\left(Re_{ref}(i,j)\cdot \sqrt{x_1}, \varepsilon_i\right)\cdot \gamma_i \cdot d_j \cdot x_1 \end{bmatrix}$$

$$J(x,i,j) := \left| \begin{array}{l} y \leftarrow G(x,i,j) \\ \text{for } k \in 0..1 \\ \quad J^{\langle k \rangle} \leftarrow 10^4 \cdot \left[G\left[x + \left(10^{-4}\right)\cdot I^{\langle k \rangle}, i, j\right] - y\right] \\ J \end{array} \right. \qquad X^{\langle 0 \rangle} := \begin{bmatrix} 2 \\ \left(\dfrac{\alpha_i - 1}{\beta_i}\right)^{\frac{4}{3}} \end{bmatrix}$$

$$X^{\langle k \rangle} := X^{\langle k-1 \rangle} - \text{lsolve}\left(J\left(X^{\langle k-1 \rangle}, i, j\right), G\left(X^{\langle k-1 \rangle}, i, j\right)\right) \qquad V := X^{\langle iter \rangle}$$

$$X = \begin{pmatrix} 2 & 1.666 & 1.708 & 1.709 & 1.709 & 1.709 \\ 1 & 4.267 & 4.592 & 4.593 & 4.593 & 4.593 \end{pmatrix}$$

$$p_2 := V_0 \cdot 1 \cdot atm \qquad p_2 = 1.709 atm \qquad p_2 = 25.108 psi \qquad Q := \sqrt{V_1} \cdot Q_{ref_i} \qquad Q = 24.453 \frac{gal}{min}$$

8) As principais reações que ocorrem na produção de gás de síntese através da oxidação parcial do metano com oxigênio são:

$$CH_4 + \tfrac{1}{2} O_2 \rightleftarrows CO + 2H_2$$

$$CH_4 + H_2O \rightleftarrows CO + 3H_2$$

$$H_2 + CO_2 \rightleftarrows CO + H_2O$$

Calcule a relação entre as vazões molares de oxigênio e metano na alimentação de um reator de gás de síntese operando adiabaticamente, tal que a temperatura de equilíbrio da mistura no interior do reator seja igual a 2200ºF. A pressão de operação do reator é igual a 20 atm e a temperatura de entrada dos reagentes é igual a 1000ºF.

Considerando o comportamento da mistura reacional como ideal as seguintes relações de equilíbrio prevalecem:

Reação 1: $K_1 = \dfrac{p_{CO} \cdot p_{H_2}^2}{p_{CH_4} \cdot p_{O_2}^{1/2}} \equiv 1,3 \cdot 10^{11}$ Reação 2: $K_2 = \dfrac{p_{CO} \cdot p_{H_2}^3}{p_{CH_4} \cdot p_{H_2O}} \equiv 1,7837 \cdot 10^5$

Reação 3: $K_3 = \dfrac{p_{CO} \cdot p_{H_2O}}{p_{C0_2} \cdot p_{H_2}} \equiv 2,6058$

Sendo: p_{CO}; p_{CO_2} ; p_{H_2O} ; p_{H_2} ; p_{CH_4} e p_{O_2} são as pressões parciais, respectivamente, do *CO*, CO_2, H_2O, H_2, CH_4 e O_2.

As entalpias dos diversos componentes envolvidos no processo a 1000 e 2200ºF estão listadas abaixo:

Componente	$H^{1000^o F}$ (*BTU/lbmol*)	$H^{2200^o F}$ (*BTU/lbmol*)
CH_4	-13492	8427
H_2O	-90546	-78213
CO_2	-154958	-139009
CO	-38528	-28837
H_2	10100	18927
O_2	10690	20831

Uma quarta reação química também ocorre a altas temperaturas:

Reação 4: $C + CO_2 \underset{\leftarrow}{\rightarrow} 2CO \quad \Rightarrow K_4 = \dfrac{p_{CO}^2}{a_C \cdot p_{C0_2}} \equiv 1329,5$

a_C é a atividade do carbono no estado sólido (seu valor pode ser considerado como unitário).

Considerando em primeira instância a inexistência da reação 4 e as seguintes variáveis:

x_1 : número de mols do *CO* no equilíbrio/mol de CH_4 na alimentação ;

x_2: número de mols do CO_2 no equilíbrio/mol de CH_4 na alimentação ;

x_3 : número de mols do H_2O no equilíbrio/mol de CH_4 na alimentação ;

x_4 : número de mols do H_2 no equilíbrio /mol de CH_4 na alimentação;

x_5: número de mols do CH_4 no equilíbrio /mol de CH_4 na alimentação;

x_6: número de mols do O_2 na alimentação /mol de CH_4 na alimentação;

x_7: número total de mols dos produtos /mol de CH_4 na alimentação.

Devido ao valor elevado da constante de equilíbrio da primeira reação, pode-se considerar como se todo o oxigênio alimentado ao sistema fosse consumido, isto é: $p_{O_2} \cong 0$, com essa consideração os balanços de massa de cada elemento químico presente e o balanço de energia conduzem ao sistema de equações:

Balanço de oxigênio: $2 \cdot x_6 = x_1 + 2 \cdot x_2 + x_3$

Balanço de hidrogênio: $4 = 2 \cdot x_3 + 2 \cdot x_4 + 4 \cdot x_5$

Balanço de carbono: $1 = x_1 + x_2 + x_5$

Balanço global do produto: $x_7 = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5$

Equilíbrio da segunda reação: $P_{total}^2 \cdot x_1 \cdot x_4^3 = 1{,}7837 \cdot 10^5 \cdot x_3 \cdot x_5 \cdot x_7^2$

Equilíbrio da terceira reação: $x_1 \cdot x_3 = 2{,}6058 \cdot x_2 \cdot x_4$

Balanço de energia:

$$-28837 \cdot x_1 - 139009 \cdot x_2 - 78213 \cdot x_3 + 18927 \cdot x_4 + 8427 \cdot x_5 = -13592 + 10690 \cdot x_6$$

Resolva este sistema de equações algébricas.

Após resolver o sistema calcule: $\bar{K} = \dfrac{p_{CO}^2}{a_C \cdot p_{CO_2}} \cong \dfrac{P_{total} \cdot x_1^2}{x_2 \cdot x_7}$ com $a_C = 1$. Se $\bar{K} > K_4 = 1329{,}5$ há possibilidade de formação de carvão sólido no interior do reator, caso contrário tal não ocorre. Verifique qual das possibilidades prevalece!

Entalpias dos Componentes

$$H := \begin{pmatrix} -38528 & -28837 \\ -154958 & -139009 \\ -90546 & -78213 \\ 10100 & 18927 \\ -13492 & 8427 \\ 10690 & 20831 \end{pmatrix} \qquad P := 20 \qquad \beta := \frac{P^2}{1.7837 \cdot 10^5} \qquad H := \frac{1}{\left|H_{1,0}\right|} \cdot H$$

Número Total de Mols da Mistura $\quad x_T(x) := \sum_{i=0}^{4} x_i$

Montagem do vetor das funções

$$f(x) := \begin{bmatrix} \frac{x_0}{2} + x_1 + \frac{x_2}{2} - x_5 \\ x_2 + x_3 + 2 \cdot x_4 - 2 \\ x_0 + x_1 + x_4 - 1 \\ \sum_{i=0}^{4} \left(H_{i,1} \cdot x_i\right) - H_{4,0} - H_{5,0} \cdot x_5 \\ x_0 \cdot x_2 - 2.6058 x_1 \cdot x_3 \\ \beta \cdot x_0 \cdot \left(x_3\right)^3 - x_T(x)^2 \cdot x_2 \cdot x_4 \end{bmatrix}$$

Montagem da Matriz Jacobiana

Elementos da última linha da matriz Jacobiana: $g_0(x) := \beta\cdot(x_3)^3 - 2\cdot x_T(x)\cdot x_2\cdot x_4$ $\quad g_1(x) := -2\cdot x_T(x)\cdot x_2\cdot x_4$

$g_2(x) := -x_T(x)\cdot x_4\cdot(2\cdot x_2 + x_T(x))$ $\quad g_3(x) := 3\cdot\beta\cdot x_0\cdot(x_3)^2 - 2\cdot x_T(x)\cdot x_2\cdot x_4$ $\quad g_4(x) := -x_T(x)\cdot x_2\cdot(2\cdot x_4 + x_T(x))$

$$J(x) := \begin{pmatrix} .5 & 1 & .5 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ H_{0,1} & H_{1,1} & H_{2,1} & H_{3,1} & H_{4,1} & -H_{5,0} \\ x_2 & -2.6058x_3 & x_0 & -2.6058x_1 & 0 & 0 \\ g_0(x) & g_1(x) & g_2(x) & g_3(x) & g_4(x) & 0 \end{pmatrix}$$

$I := \mathrm{identity}(6)$

$$J_{numerico}(x) := \left| \begin{array}{l} y \leftarrow f(x) \\ \text{for } j \in 0..5 \\ \quad \left| \begin{array}{l} v \leftarrow x + 10^{-4}\cdot I^{\langle j\rangle} \\ J^{\langle j\rangle} \leftarrow \dfrac{f(v) - f(x)}{10^{-4}} \end{array}\right. \\ J \end{array}\right.$$

Chute Inicial : considera apenas a primeira reação

$$X := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \\ .5 \end{pmatrix} \quad f(X) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.111 \\ 0 \\ 0.018 \end{pmatrix} \qquad |J(X)| = -0.306 \qquad |J_{numerico}(X)| = -0.306$$

$$\mathrm{Newton}(x) := \left| \begin{array}{l} y \leftarrow f(x) \\ k \leftarrow 0 \\ X^{\langle k\rangle} \leftarrow x \\ \text{while } |y| > 10^{-9} \\ \quad \left| \begin{array}{l} x \leftarrow X^{\langle k\rangle} - \mathrm{lsolve}(J(X^{\langle k\rangle}), y) \\ y \leftarrow f(x) \\ k \leftarrow k+1 \\ X^{\langle k\rangle} \leftarrow x \end{array}\right. \\ X \end{array}\right.
\qquad
\mathrm{Newton}_{nume}(x) := \left| \begin{array}{l} y \leftarrow f(x) \\ k \leftarrow 0 \\ X^{\langle k\rangle} \leftarrow x \\ \text{while } |y| > 10^{-9} \\ \quad \left| \begin{array}{l} x \leftarrow X^{\langle k\rangle} - \mathrm{lsolve}(J_{numerico}(X^{\langle k\rangle}), y) \\ y \leftarrow f(x) \\ k \leftarrow k+1 \\ X^{\langle k\rangle} \leftarrow x \end{array}\right. \\ X \end{array}\right.$$

$x := X$ $\quad M := \mathrm{Newton}(x)$ $\quad K := \mathrm{cols}(M)$ $\quad K = 6$

$M_1 := \mathrm{Newton}_{nume}(x)$ $\quad K_1 := \mathrm{cols}(M_1)$ $\quad K_1 = 6$

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0.783 & 1.013 & 0.964 & 0.961 & 0.961 \\ 0 & 0.028 & 0.027 & 0.027 & 0.027 & 0.027 \\ 0 & 0.145 & 0.135 & 0.137 & 0.137 & 0.137 \\ 2 & 1.478 & 1.945 & 1.846 & 1.841 & 1.841 \\ 0 & 0.189 & -0.04 & 8.521\times 10^{-3} & 0.011 & 0.011 \\ 0.5 & 0.492 & 0.601 & 0.578 & 0.577 & 0.577 \end{pmatrix}
\quad
M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0.783 & 1.013 & 0.964 & 0.961 & 0.961 \\ 0 & 0.028 & 0.027 & 0.027 & 0.027 & 0.027 \\ 0 & 0.145 & 0.135 & 0.137 & 0.137 & 0.137 \\ 2 & 1.478 & 1.945 & 1.846 & 1.841 & 1.841 \\ 0 & 0.189 & -0.04 & 8.521\times 10^{-3} & 0.011 & 0.011 \\ 0.5 & 0.492 & 0.601 & 0.578 & 0.577 & 0.577 \end{pmatrix}$$

Valores Convergidos $\quad x_1 := M^{\langle K-1\rangle}$ $\quad x_1^T = (0.961465\ \ 0.027466\ \ 0.137033\ \ 1.840831\ \ 0.011068\ \ 0.576715)$

$f(x_1)^T = (0\ \ 0\ \ 0\ \ 0\ \ -0\ \ 0)$

Cálculo do número total de mols da mistura e das frações molares

$n_{total\_1} := x_T(x_1)$ $\quad n_{total\_1} = 2.978$ $\quad i := 0..4$ $\quad z_{1_i} := \dfrac{x_{1_i}}{n_{total\_1}}$

$z_1^T = (0.32287084\ 0.00922354\ 0.04601709\ 0.61817168\ 0.00371685)$

Verificação da possibilidade de existência de carvão sólido:

$K_{medio} := \dfrac{P\cdot(x_{1_0})^2}{x_{1_1}\cdot x_T(x_1)}$ $\quad K_{medio} = 226.042$

como esse valor é menor do que 1329.5(K_4) não há carbono sólido presente no reator!

9) Refaça o problema 3 considerando a possibilidade da primeira reação não ser completa, isto é, considere a possibilidade de haver oxigênio não reagido no produto.

Considerando:

x_6: número de mols do O_2 no equilíbrio /mol de CH_4 na alimentação;

x_7: número total de mols dos produtos /mol de CH_4 na alimentação.

x_8: número de mols do O_2 na alimentação /mol de CH_4 na alimentação;

Equilíbrio da primeira reação:

$$\frac{p_{CO}\cdot p_{H_2}^2}{p_{CH_4}\cdot p_{O_2}^{1/2}}=\frac{x_1\cdot x_4^2}{x_5\cdot\sqrt{x_6}}\cdot\left(\frac{P_{total}}{x_7}\right)^{3/2}=1,3\cdot 10^{11}\Rightarrow\left(P_{total}\right)^{3/2}\cdot x_1\cdot x_4^2=1,3\cdot 10^{11}\cdot x_5\cdot\sqrt{x_6}\cdot\left(x_7\right)^{3/2}$$

O equilíbrio da segunda reação indica: $P_{total}^2\cdot x_1\cdot x_4^3=1,7837\cdot 10^5\cdot x_3\cdot x_5\cdot x_7^2$

Dividindo a última equação pela anterior, resulta:

$\sqrt{P_{total}}\cdot x_4=\dfrac{1,7837\cdot 10^5\cdot x_3\cdot\sqrt{x_7}}{1,3\cdot 10^{11}\cdot\sqrt{x_6}}\Rightarrow\dfrac{1,3\cdot 10^{11}}{1,7837\cdot 10^5}\cdot\sqrt{P_{total}}\cdot x_4\cdot\sqrt{x_6}=x_3\cdot\sqrt{x_7}$, elevando ambos os membros ao quadrado: $\left(\dfrac{1,3\cdot 10^{11}}{1,7837\cdot 10^5}\cdot x_4\right)^2\cdot P_{total}\cdot x_6=\left(x_3\right)^2\cdot\sum_{i=1}^{6}x_i$, permitindo calcular:

$$x_6=\frac{\left(x_3\right)^2\cdot\sum_{i=1}^{5}x_i}{\left(\dfrac{1,3\cdot 10^{11}}{1,7837\cdot 10^5}\cdot x_4\right)^2\cdot P_{total}-\left(x_3\right)^2}\ \text{ e }\ x_7=\sum_{i=1}^{6}x_i$$

Resultando no sistema:

Balanço de oxigênio: $2\cdot x_8=x_1+2\cdot x_2+x_3+x_6$

Balanço de hidrogênio: $4=2\cdot x_3+2\cdot x_4+4\cdot x_5$

Balanço de carbono: $1=x_1+x_2+x_5$

Balanço global do produto: $x_8=x_1+x_2+x_3+x_4+x_5+x_6$

Equilíbrio da segunda reação: $P_{total}^2\cdot x_1\cdot x_4^3=1,7837\cdot 10^5\cdot x_3\cdot x_5\cdot x_7^2$

Equilíbrio da terceira reação: $x_1\cdot x_3=2,6058\cdot x_2\cdot x_4$

Balanço de energia:

$$-28837\cdot x_1-139009\cdot x_2-78213\cdot x_3+18927\cdot x_4+8427\cdot x_5+20831\cdot x_6=-13592+10690\cdot x_8$$

Nas equações acima as expressões $x_6=\dfrac{\left(x_3\right)^2\cdot\sum_{i=1}^{5}x_i}{\left(\dfrac{1,3\cdot 10^{11}}{1,7837\cdot 10^5}\cdot x_4\right)^2\cdot P_{total}-\left(x_3\right)^2}$ e $x_7=\sum_{i=1}^{6}x_i$

são substituídas!

Entalpias dos Componentes

$$H := \begin{pmatrix} -38528 & -28837 \\ -154958 & -139009 \\ -90546 & -78213 \\ 10100 & 18927 \\ -13492 & 8427 \\ 10690 & 20831 \end{pmatrix}$$

$$P := 20$$

$$\alpha := \frac{1.3 \cdot 10^{11}}{P^{1.5}} \qquad \beta := \frac{P^2}{1.7837 \cdot 10^5} \qquad H := \frac{1}{\left|H_{1,0}\right|} \cdot H$$

$$\alpha = 1.453 \times 10^9$$

Número Total de Mols da Mistura $\quad x_T(x) := \sum_{i=0}^{5} x_i$

Montagem do vetor das funções

$$f(x) := \begin{bmatrix} \frac{x_0}{2} + x_1 + \frac{x_2}{2} + x_5 - x_6 \\ x_2 + x_3 + 2 \cdot x_4 - 2 \\ x_0 + x_1 + x_4 - 1 \\ \sum_{i=0}^{5} \left(H_{i,1} \cdot x_i\right) - H_{4,0} - H_{5,0} \cdot x_6 \\ x_0 \cdot x_2 - 2.6058 x_1 \cdot x_3 \\ \beta \cdot x_0 \cdot \left(x_3\right)^3 - x_T(x)^2 \cdot x_2 \cdot x_4 \\ x_0 \cdot \left(x_3\right)^2 - \alpha \cdot x_T(x)^{1.5} \cdot x_4 \cdot \sqrt{x_5} \end{bmatrix}$$

Montagem da Matriz Jacobiana

Elementos da última linha da matriz Jacobiana: $\quad g_0(x) := \beta \cdot \left(x_3\right)^3 - 2 \cdot x_T(x) \cdot x_2 \cdot x_4 \qquad g_1(x) := -2 \cdot x_T(x) \cdot x_2 \cdot x_4$

$$g_2(x) := -x_T(x) \cdot x_4 \cdot \left(2 \cdot x_2 + x_T(x)\right) \qquad g_3(x) := 3 \cdot \beta \cdot x_0 \cdot \left(x_3\right)^2 - 2 \cdot x_T(x) \cdot x_2 \cdot x_4 \qquad g_4(x) := -x_T(x) \cdot x_2 \cdot \left(2 \cdot x_4 + x_T(x)\right)$$

$$g5(x) := \left(x_3\right)^2 - 1.5 \cdot \alpha \cdot x_T(x)^{0.5} \cdot x_4 \cdot \sqrt{x_5} \qquad g6(x) := -1.5 \cdot \alpha \cdot x_T(x)^{0.5} \cdot x_4 \cdot \sqrt{x_5} \qquad g7(x) := 2 \cdot \alpha \cdot x_0 \cdot x_3 - 1.5 \cdot \alpha \cdot x_T(x)^{0.5} \cdot x_4 \cdot \sqrt{x_5}$$

$$g8(x) := -\alpha \sqrt{x_T(x) \cdot x_5} \cdot \left(x_T(x) + 1.5 \cdot x_4\right) \qquad g9(x) := -\alpha \sqrt{x_T(x)} \cdot x_4 \cdot \left(\frac{x_T(x)}{2 \cdot \sqrt{x_5}} + 1.5 \cdot \sqrt{x_5}\right)$$

$$J(x) := \begin{pmatrix} .5 & 1 & .5 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ H_{0,1} & H_{1,1} & H_{2,1} & H_{3,1} & H_{4,1} & H_{5,1} & -H_{5,0} \\ x_2 & -2.6058 x_3 & x_0 & -2.6058 x_1 & 0 & 0 & 0 \\ g_0(x) & g_1(x) & g_2(x) & g_3(x) & g_4(x) & 0 & 0 \\ g5(x) & g6(x) & g6(x) & g7(x) & g8(x) & g9(x) & 0 \end{pmatrix}$$

Chute Inicial : solução do problema 3o

$$X := \begin{pmatrix} 0.961465 \\ 0.027466 \\ 0.137033 \\ 1.840831 \\ 0.011068 \\ 10^{-16} \\ 0.576715 \end{pmatrix} \qquad f(X) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1\times 10^{-6} \\ 2.942\times 10^{-7} \\ 2.497\times 10^{-6} \\ 2.996\times 10^{-7} \\ 2.431 \end{pmatrix} \qquad |J(X)| = -2.1\times 10^{16}$$

$$x1^T = (0.961465\ \ 0.027466\ \ 0.137033\ \ 1.840831\ \ 0.011068\ \ 0.576715)$$

```
Newton(x) := | y ← f(x)
             | k ← 0
             | X<k> ← x
             | while |y| > 10^-6
             |   | x ← X<k> − lsolve(J(X<k>), y)
             |   | y ← f(x)
             |   | k ← k + 1
             |   | X<k> ← x
             | X
```

$x := X \qquad M := \text{Newton}(x) \qquad K := \text{cols}(M) \qquad K = 28$

M =

	25	26	27
0	0.961	0.961	0.961
1	0.027	0.027	0.027
2	0.137	0.137	0.137
3	1.841	1.841	1.841
4	0.011	0.011	0.011
5	$1.557\cdot10^{-15}$	$1.553\cdot10^{-15}$	$1.553\cdot10^{-15}$
6	0.577	0.577	...

Valores Convergidos $\quad x := M^{\langle K-1\rangle} \qquad x^T = \left(0.961465\ \ 0.027466\ \ 0.137033\ \ 1.840831\ \ 0.011068\ \ 1.553288\times 10^{-15}\ \ 0.576715\right)$

$f(x)^T = (0\ \ 0\ \ 0\ \ 0\ \ 0\ \ 0\ \ -0.000001-0i) \qquad x1^T = (0.961465\ \ 0.027466\ \ 0.137033\ \ 1.840831\ \ 0.011068\ \ 0.576715)$

Cálculo do número total de moles da mistura e das frações molares

$n_{total} := x_T(x) \qquad n_{total} = 2.978 \qquad i := 0..5 \qquad z_i := \dfrac{x_i}{n_{total}}$

$z^T = (0.32287084\ \ 0.00922354\ \ 0.04601709\ \ 0.61817168\ \ 0.00371685\ \ 0)$

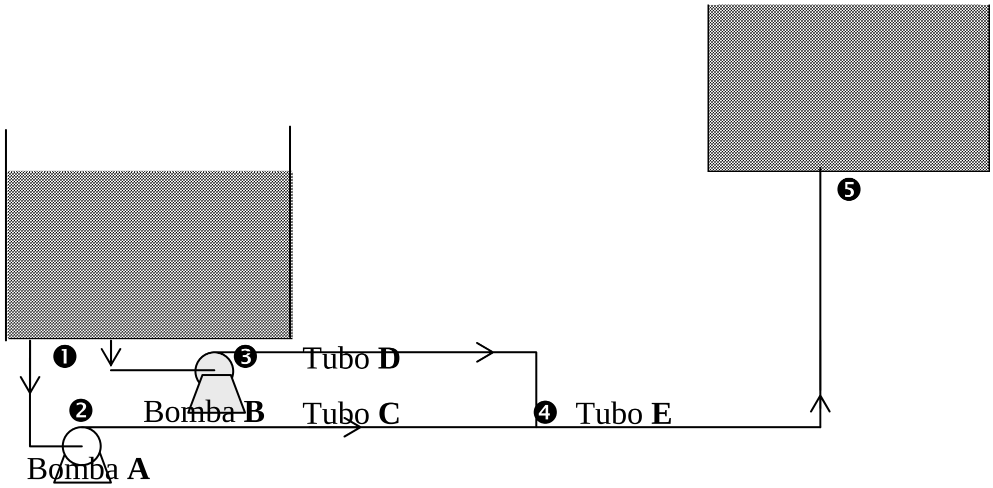
$z1^T = (0.32287084\ \ 0.00922354\ \ 0.04601709\ \ 0.61817168\ \ 0.00371685)$

Verificação da possibilidade de existência de carvão sólido:

$K_{medio} := \dfrac{P\cdot(x_0)^2}{x_1\cdot x_T(x)} \qquad K_{medio} = 226.042$

como esse valor é menor do que 1329.5(K_4) não há carbono sólido presente no reator!

10) Considere o sistema hidráulico esquematizado abaixo:



As pressões p_1 e p_5 nos pontos ❶ e ❺ podem ser consideradas como iguais à pressão atmosférica. As equações que descrevem o escoamento em cada trecho do sistema são:

Ponto de junção ❹ : $Q_E = Q_D + Q_C$

Bomba A **:** $p_2 - p_1 = \alpha_A - \beta_A \cdot Q_C^2$ **; Bomba** B **:** $p_3 - p_1 = \alpha_B - \beta_B \cdot Q_D^2$

Perda de carga no tubo C: $p_2 - p_4 = 8 \cdot \dfrac{f_M \cdot \rho \cdot L_C \cdot Q_C^2}{\pi^2 \cdot D_c^5}$

Perda de carga no tubo D: $p_3 - p_4 = 8 \cdot \dfrac{f_M \cdot \rho \cdot L_D \cdot Q_D^2}{\pi^2 \cdot D_D^5}$

Perda de carga no tubo E: $p_4 - p_5 + \rho \cdot g \cdot (z_5 - z_4) = 8 \cdot \dfrac{f_M \cdot \rho \cdot L_E \cdot Q_E^2}{\pi^2 \cdot D_E^5}$

Onde $z_5 - z_4 = 70 \cdot ft$ (elevação da tubulação) , f_M = 0,02792, ρ = 62,43 lb_m/ft^3 (água), $p_1 = p_5$ = 1,00 *atm* e

Bomba	α_A (psia)	β_A psi/(gpm)^2
A	156,6	0,00752
B	117,1	0,00427

Tubo	D (inch)	L (feet)
C	1,278	125
D	2,067	125
E	2,469	145

Calcule p_2, p_3, p_4, Q_C, Q_D e Q_E.

$TOL := 10^{-9}$ $\quad \alpha_A := 156.6\,psi$ $\quad \beta_A := .00752\frac{psi}{gpm^2}$ $\quad \alpha_B := 117.1\,psi$ $\quad \beta_B := .00427\frac{psi}{gpm^2}$

$\Delta z := 70\cdot ft$ $\quad f_M := .02792$ $\quad \rho := 62.43\frac{lb}{ft^3}$ $\quad p_{ref} := 1\cdot atm$ $\quad g = 9.80665\frac{m}{s^2}$

$D_C := 1.278\,in$ $\quad L_C := 125\cdot ft$ $\quad D_D := 2.067\cdot in$ $\quad L_D := 125\cdot ft$ $\quad D_E := 2.469\,in$ $\quad L_E := 145\cdot ft$

$$Q_{ref\_2} := \frac{\alpha_A - p_{ref}}{\beta_A} \quad C_C := 8\cdot\frac{f_M\cdot\rho\cdot L_C\cdot Q_{ref\_2}}{\pi^2\cdot D_C^5\cdot p_{ref}} \quad C_D := 8\cdot\frac{f_M\cdot\rho\cdot L_D\cdot Q_{ref\_2}}{\pi^2\cdot D_D^5\cdot p_{ref}} \quad C_E := 8\cdot\frac{f_M\cdot\rho\cdot L_E\cdot Q_{ref\_2}}{\pi^2\cdot D_E^5\cdot p_{ref}} \quad \Delta p := \frac{\rho\cdot g\cdot\Delta z}{p_{ref}}$$

$$C_A := -1 - \frac{\alpha_A}{p_{ref}} \quad C_B := -1 - \frac{\alpha_B}{p_{ref}} \quad d_A := \frac{\alpha_A}{p_{ref}} - 1 \quad d_B := \frac{\beta_B\cdot Q_{ref\_2}}{p_{ref}}$$

$$f(x) := \begin{bmatrix} x_0 + d_A\cdot x_1 + C_A \\ x_2 + d_B\cdot x_3 + C_B \\ x_0 - x_4 - C_C\cdot x_1 \\ x_2 - x_4 - C_D\cdot x_3 \\ x_4 - 1 + \Delta p - C_E\cdot x_5 \\ x_5 - \left(x_1 + x_3 + 2\cdot\sqrt{x_1\cdot x_3}\right) \end{bmatrix} \qquad J(x) := \begin{bmatrix} 1 & d_A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & d_B & 0 & 0 \\ 1 & -C_C & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -C_D & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -C_E \\ 0 & -\left(1+\sqrt{\frac{x_3}{x_1}}\right) & 0 & -\left(1+\sqrt{\frac{x_1}{x_3}}\right) & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$x := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad f(x) = \begin{pmatrix} -1 \\ -2.485 \\ -17.734 \\ -1.602 \\ 1.301 \\ -3 \end{pmatrix} \quad J(x) = \begin{pmatrix} 1 & 9.656 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 5.483 & 0 & 0 \\ 1 & -17.734 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1.602 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -0.764 \\ 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$k := 0..3 \quad x^{\langle k+1\rangle} := x^{\langle k\rangle} - \text{lsolve}\left(J\left(x^{\langle k\rangle}\right), f\left(x^{\langle k\rangle}\right)\right) \quad k := 0..4 \quad \delta_k := \left|f\left(x^{\langle k\rangle}\right)\right|$$

$$x = \begin{pmatrix} 1 & 7.968 & 7.929 & 7.929 & 7.929 \\ 1 & 0.382 & 0.386 & 0.386 & 0.386 \\ 1 & 2.954 & 2.866 & 2.866 & 2.866 \\ 1 & 1.097 & 1.113 & 1.113 & 1.113 \\ 1 & 1.196 & 1.083 & 1.083 & 1.083 \\ 1 & 2.958 & 2.81 & 2.81 & 2.81 \end{pmatrix} \qquad \delta^T = \begin{pmatrix} 18.301 & 0.184 & 2.232\times 10^{-6} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$p_1 := x_{0,3}\cdot p_{ref}$ $\quad p_1 = 7.929\,atm$ $\quad Q_A := \sqrt{Q_{ref\_2}\cdot x_{1,3}}$ $\quad Q_A = 85.349\,gpm$

$p_2 := x_{2,3}\cdot p_{ref}$ $\quad p_2 = 2.866\,atm$ $\quad Q_B := \sqrt{Q_{ref\_2}\cdot x_{3,3}}$ $\quad Q_B = 144.919\,gpm$

$p_4 := x_{4,3}\cdot p_{ref}$ $\quad p_4 = 1.083\,atm$ $\quad Q_E := \sqrt{Q_{ref\_2}\cdot x_{5,3}}$ $\quad Q_E = 230.267\,gpm$

VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO:

$$p_1 - p_{ref} - \left(\alpha_A - \beta_A\cdot Q_A^2\right) = 0\cdot atm \qquad p_1 - p_4 - 8\cdot\frac{f_M\cdot\rho\cdot L_C\cdot Q_A^2}{\pi^2\cdot D_C^5} = 0\cdot atm$$

$$p_2 - p_{ref} - \left(\alpha_B - \beta_B\cdot Q_B^2\right) = -1.149\times 10^{-15}\cdot atm \qquad p_2 - p_4 - 8\cdot\frac{f_M\cdot\rho\cdot L_D\cdot Q_B^2}{\pi^2\cdot D_D^5} = 0\cdot atm$$

$$p_4 - p_{ref} + \rho\cdot g\cdot\Delta z - 8\cdot\frac{f_M\cdot\rho\cdot L_E\cdot Q_E^2}{\pi^2\cdot D_E^5} = 0\cdot atm$$

11) Resolva o sistema linear abaixo:

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & -6 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & -6 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 0 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Thomas}(n, a, b, c, d) := \left| \begin{array}{l} \beta_0 \leftarrow b_0 \\ \gamma_0 \leftarrow \dfrac{d_0}{\beta_0} \\ \text{for } i \in 1..n-1 \\ \quad \left| \begin{array}{l} \beta_i \leftarrow b_i - \dfrac{a_i \cdot c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \\ \gamma_i \leftarrow \dfrac{d_i - a_i \cdot \gamma_{i-1}}{\beta_i} \end{array} \right. \\ x_{n-1} \leftarrow \gamma_{n-1} \\ \text{for } i \in n-2..0 \\ \quad x_i \leftarrow \gamma_i - \dfrac{c_i}{\beta_i} \cdot x_{i+1} \\ x \end{array} \right.$$

$$a := \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 1 \\ 4 \\ 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} \quad b := -\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 2 \\ 6 \\ 6 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix} \quad c := \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \\ 4 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad d := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 0 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad x := \text{Thomas}(7, a, b, c, d)$$

$$x^T = (-4.583 \;\; -6.375 \;\; -9.75 \;\; -10.125 \;\; -10.875 \;\; -10.5 \;\; -8.125)$$

12) Resolva a equação de diferenças:

$u_{i+2} + 4 \cdot i \cdot u_{i+1} + u_i = i$ para $i = 1, \; 2, \; 3, \ldots, n$ com $u_1 = 0$ e $u_{n+2} = 1$.

Resolva para n = 4, 5 e 6.

$n := 4$

$i := 0..n-1 \quad a_i := 1 \quad b_i := 4\cdot(i+1) \quad c_i := 1 \quad d_i := i+1 \quad d_{n-1} := d_{n-1} - 1$

$x := \text{Thomas}(n, a, b, c, d) \quad x_n := 1$

$x^T = (0.201 \;\; 0.198 \;\; 0.219 \;\; 0.174 \;\; 1)$

$r_0 := 4\cdot x_0 + x_1 - 1 \quad i := 1..n-1 \quad r_i := x_{i-1} + 4(i+1)\cdot x_i + x_{i+1} - (i+1) \quad |r| = 0$

$n := 5$

$i := 0..n-1 \quad a_i := 1 \quad b_i := 4\cdot(i+1) \quad c_i := 1 \quad d_i := i+1 \quad d_{n-1} := d_{n-1} - 1$

$x := \text{Thomas}(n, a, b, c, d) \quad x_n := 1$

$x^T = (0.2 \;\; 0.198 \;\; 0.215 \;\; 0.225 \;\; 0.189 \;\; 1)$

$r_0 := 4\cdot x_0 + x_1 - 1 \quad i := 1..n-1 \quad r_i := x_{i-1} + 4(i+1)\cdot x_i + x_{i+1} - (i+1) \quad |r| = 0$

$n := 6$

$i := 0..n-1 \quad a_i := 1 \quad b_i := 4\cdot(i+1) \quad c_i := 1 \quad d_i := i+1 \quad d_{n-1} := d_{n-1} - 1$

$x := \text{Thomas}(n, a, b, c, d) \quad x_n := 1$

$x^T = (0.2 \;\; 0.198 \;\; 0.215 \;\; 0.222 \;\; 0.229 \;\; 0.199 \;\; 1)$

$r_0 := 4\cdot x_0 + x_1 - 1 \quad i := 1..n-1 \quad r_i := x_{i-1} + 4(i+1)\cdot x_i + x_{i+1} - (i+1) \quad |r| = 0$

13) O modelo estacionário do estágio *i* de uma coluna de absorção de prato é descrito pela equação de balanço de massa:

$L \cdot x_{i+1} + V \cdot y_{i-1} = L \cdot x_i + V \cdot y_i$ para $i = 1, 2, \ldots, N$ (*N*: número total de pratos)

L: vazão molar da fase líquida;

V: vazão molar da fase gás;

x_i : fração molar na fase líquida;

y_i : fração molar na fase gás.

Sabendo-se que a relação de equilíbrio entre as fase é linear e dada pela expressão:

$y_i = m \,.\, x_i$, sugira um procedimento iterativo para resolver este sistema conhecendo-se: *L*, *V*, *m* , y_0 e x_{N+1} > Para ilustrar seu procedimento adote: $L = 40$; $V = 65$; $m = 0{,}72$; $N = 6$; $y_0 = 0{,}25$ e $x_7 = 0$.

Avalie o que ocorre com as composições de saída [x_1 e y_N] quando *N* tende a infinito.

Com $y_i = m\ .\ x_i$ e considerando: $R = \frac{L}{V}$, tem-se:

$$R \cdot x_{i+1} - (R+m) \cdot x_i + m \cdot x_{i-1} = 0 \;\text{ para } i = 1,\ 2,\ \ldots, N \;\text{ com }\; x_0 = \frac{y_0}{m} \;\text{ e }\; x_{N+1} = 0$$

Buscando uma solução da forma: $x_i = \gamma_i + \frac{R}{\beta_i} \cdot x_{i+1}$ como $x_{N+1} = 0 \Rightarrow x_N = \gamma_N$

Com i = 1 tem-se:

$$R \cdot x_2 - (R+m) \cdot x_1 + m \cdot x_0 = R \cdot x_2 - (R+m) \cdot x_1 + y_0 = 0 \Rightarrow x_1 = \frac{y_0}{R+m} + \frac{R}{R+m} \cdot x_2$$

permitindo identificar: $\beta_1 = (R+m)$ e $\gamma_1 = \frac{y_0}{\beta_1}$

Com i = 2, 3, ...$(R+m) \cdot x_i - m \cdot x_{i-1} = R \cdot x_{i+1}$ mas: $x_{i-1} = \gamma_{i-1} + \frac{R}{\beta_{i-1}} \cdot x_i$, então:

$$\left(R + m - \frac{m \cdot R}{\beta_{i-1}}\right) \cdot x_i - m \cdot \gamma_{i-1} = R \cdot x_{i+1} \Rightarrow \left(R + m - \frac{m \cdot R}{\beta_{i-1}}\right) \cdot x_i = m \cdot \gamma_{i-1} + R \cdot x_{i+1}$$

$\beta_i = (R+m) - \frac{m \cdot R}{\beta_{i-1}}$ e $\gamma_i = \frac{m \cdot \gamma_{i-1}}{\beta_i}$ para i = 2, 3, ...N; com: $\beta_1 = (R+m)$ e $\gamma_1 = \frac{y_0}{\beta_1}$.

Após determinar $\beta_1,\ \gamma_1,\ \beta_2,\ \gamma_2,\ \cdots \beta_N,\ \gamma_N$, tem-se: $x_N = \gamma_N$ determinando-se a seguir:

$$x_i = \gamma_i + \frac{R}{\beta_i} \cdot x_{i+1} \;\text{ para }\; i = (N-1),\ (N-2),\ \cdots,\ 2,\ 1$$

Exemplo numérico: L = 40; V = 65; m = 0,72; N = 6; y_0 = 0,25 e x_7 =0. Logo: $R = \frac{40}{65} = 0,615$

Obtém-se:

i	1	2	3	4	5	6
β_i	1,335	1,004	0,894	0,840	0,808	0,787
γ_i	0,187	0,134	0,108	0,093	0,083	0,076

E a seguir:

i	6	5	4	3	2	1
β_i	0,076	0,140	0,196	0,243	0,283	0,318

Quando N é muito elevado, a corrente líquida que saí do primeiro estágio tende a estar em equilíbrio com y_0, isto é: $x_1 \cong \frac{y_0}{m} = \frac{0,25}{0,72} = 0,347$.

Como: $R \cdot x_{N+1} - R \cdot x_1 - m \cdot x_N + y_0 = 0 \Rightarrow x_N = \left(1 - \frac{R}{m}\right) \cdot \frac{y_0}{m} = 0,05$

O mesmo resultado poderia ser obtido considerando que a solução de:

$R \cdot x_{i+1} - (R+m) \cdot x_i + m \cdot x_{i-1} = 0$ para $i = 1,\ 2,\ \ldots, N$ com $x_0 = \dfrac{y_0}{m}$ e $x_{N+1} = 0$

é da forma: $x_i = A \cdot p^i \Rightarrow x_i = p \cdot x_{i-1}$ e $x_{i+1} = p \cdot x_i = p^2 \cdot x_{i-1}$, isto é:

$R \cdot x_{i+1} - (R+m) \cdot x_i + m \cdot x_{i-1} = \left[R \cdot p^2 - (R+m) \cdot p + m\right] \cdot x_{i-1} = 0$

Implicando em $R \cdot p^2 - (R+m) \cdot p + m = (p-1) \cdot (R \cdot p - m) = 0$ que apresenta duas raízes:

$p_1 = 1$ e $p_2 = \dfrac{m}{R}$. A solução geral do problema é então:

$x_i = A + B \cdot \left(\dfrac{m}{R}\right)^i$. Como $x_0 = \dfrac{y_0}{m} = A + B \Rightarrow B = \dfrac{y_0}{m} - A$, logo: $x_i = A \cdot \left[1 - \left(\dfrac{m}{R}\right)^i\right] + \dfrac{y_0}{m} \cdot \left(\dfrac{m}{R}\right)^i$.

Como: $x_{N+1} = 0 \quad \Rightarrow 0 = A \cdot \left[1 - \left(\dfrac{m}{R}\right)^{N+1}\right] + \dfrac{y_0}{m} \cdot \left(\dfrac{m}{R}\right)^{N+1} \Rightarrow A = \dfrac{y_0}{m} \cdot \dfrac{1}{1 - \left(m/R\right)^{-N-1}}$. Resultando em: $x_i = \dfrac{y_0}{m} \cdot \left\{\dfrac{1 - \left(\dfrac{m}{R}\right)^{i-N-1}}{1 - \left(\dfrac{m}{R}\right)^{-N-1}}\right\}$. Para N elevado tem-se: $\left(\dfrac{m}{R}\right)^{-N-1} \cong 0$, assim:

$x_1 \cong \dfrac{y_0}{m} \cdot \left\{1 - \left(\dfrac{m}{R}\right)^{-N}\right\} \cong \dfrac{y_0}{m} = 0,347$ e $x_N \cong \dfrac{y_0}{m} \cdot \left[1 - \left(\dfrac{m}{R}\right)^{-1}\right] = \dfrac{y_0}{m} \cdot \left(1 - \dfrac{R}{m}\right) = 0,05$.

Resultados idênticos aos encontrados anteriormente.