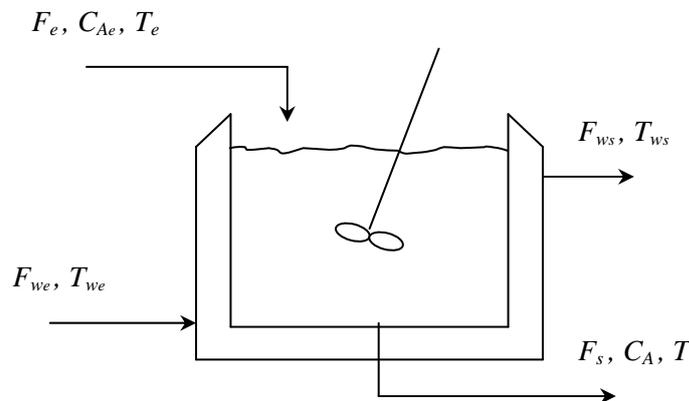


Capítulo 5

Sistemas de Equações Algébricas

Considerando novamente o problema de um reator contínuo de tanque agitado (CSTR) não-isotérmico, com propriedades físicas constantes (ρ , c_p):



Mas agora para o caso de uma reação de ordem n :

$$r_A = k C_A^n, \quad \text{onde } k(T) = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}}$$

temos as seguintes equações de balanço de massa e energia do modelo:

$$\frac{dV}{dt} = F_e - F_s$$

$$\frac{d(V C_A)}{dt} = F_e C_{Ae} - F_s C_A - k C_A^n V$$

$$\rho V c_p \frac{dT}{dt} = F_e \rho c_p (T_e - T) + (-\Delta H_r) k C_A^n V - U A_t (T - T_w)$$

onde F_e e F_s são as vazões volumétricas de entrada e saída, respectivamente, V é o volume do meio reacional, C_A é a concentração molar do reagente, T e T_w são as temperaturas do meio reacional e do fluido de refrigeração, respectivamente, ΔH_r é a entalpia de reação, U é o coeficiente global de transferência de calor e A_t é a área de troca térmica.

No estado estacionário:

$$F_e = F_s \equiv F$$

$$\frac{F}{V}(C_{Ae} - C_A) = k C_A^n$$

$$\frac{F}{V}(T - T_e) + \frac{U A_t}{\rho C_p V}(T - T_w) = \frac{(-\Delta H_r) k C_A^n}{\rho C_p}$$

Substituindo a equação de balanço de massa do componente A no balanço de energia:

$$\frac{F}{V}(T - T_e) + \frac{U A_t}{\rho C_p V}(T - T_w) = \frac{F(-\Delta H_r)}{\rho C_p V}(C_{Ae} - C_A)$$

e definindo as variáveis adimensionais:

$$x_1 \equiv \frac{C_A}{C_{Ae}} \quad \text{e} \quad x_2 \equiv \frac{T - T_e}{T_e}$$

temos:

$$(1 - x_1) = k \tau C_{Ae}^{n-1} x_1^n = D_a C_{Ae}^{n-1} x_1^n \exp\left(\gamma \frac{x_2}{1 + x_2}\right)$$

$$x_2 = \beta + \alpha (1 - x_1)$$

onde α , β , γ e D_a estão definidos no capítulo anterior. Ou seja, um sistema de equações algébricas:

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - x_1 - D_a C_{Ae}^{n-1} x_1^n \exp\left(\gamma \frac{x_2}{1 + x_2}\right) \\ x_2 - \beta - \alpha (1 - x_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Neste caso em particular, a segunda equação poderia ser substituída na primeira para eliminar a variável x_1 , resultando em uma equação algébrica a uma variável, mas, para efeitos de ilustração, vamos manter como um sistema de equações a duas variáveis.

Para o caso sem reação química ($\alpha = 0$ e $D_a = 0$), resulta no sistema linear:

$$F(x) = \begin{bmatrix} 1 - x_1 \\ x_2 - \beta \end{bmatrix} \Rightarrow F(x) = A x - b \Rightarrow x = A^{-1} b$$

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ -\beta \end{bmatrix}$$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \Rightarrow x = \begin{bmatrix} 1 \\ \beta \end{bmatrix}$$

Existe uma grande variedade de métodos para solução de sistemas lineares, sendo muitos deles dependentes da estrutura da matriz A (matriz densa, esparsa, simétrica, bloco-diagonal, etc.). Os métodos mais conhecidos para solução de sistemas lineares são:

métodos diretos:

- eliminação Gaussiana
- fatorações (LU , LL^T , LDL^T , QR , ...)
- método de Thomas

métodos iterativos:

- método de Jacobi
- método de Gauss-Seidel
- métodos SOR
- minimização

Para o caso não-linear, trataremos da solução do sistema de equações algébricas $F(x) = 0$ pelos métodos:

- Substituições sucessivas
- Newton-Raphson

Neste capítulo, o procedimento de adimensionamento das variáveis com o intuito de deixá-las com a mesma ordem de grandeza é crucial para o bom desempenho dos métodos numéricos. Por exemplo, ao usarmos a norma euclidiana como uma medida da distância entre pontos de uma seqüência convergente:

$$\|x - y\| = \left(\sum_{i=1}^N (x_i - y_i)^2 \right)^{1/2}$$

E se não adimensionarmos a concentração e a temperatura para o exemplo do reator CSTR; digamos que a concentração é aproximadamente $5,0 \cdot 10^{-3}$ kmol/m³ e a temperatura 500 K, então ao calcular a distância entre dois pontos de um método iterativo:

iteração	Concentração (kmol/m ³)	Temperatura (K)
k	$5,0 \cdot 10^{-3}$	500
$k+1$	$6,0 \cdot 10^{-3}$	501

$$EA_x = \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| = \left[(6,0 \cdot 10^{-3} - 5,0 \cdot 10^{-3})^2 + (501 - 500)^2 \right]^{1/2} = (10^{-6} + 1^2)^{1/2} \cong 1$$

$$ER_x = \frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{\|x^{(k)}\|} = \frac{EA_x}{\|x^{(k)}\|} = \frac{1}{\left[(5,0 \cdot 10^{-3})^2 + (500)^2 \right]^{1/2}} = \frac{1}{(25 \cdot 10^{-6} + 25 \cdot 10^4)^{1/2}} \cong \frac{1}{500} = 0,002$$

Ou seja, se um erro relativo de 0,2% fosse aceitável, o procedimento iterativo encerraria antes da convergência para a solução, pois haveria um erro de 20% na concentração (100 vezes maior que o desejado).

Supondo agora que $C_{Ae} = 50,0 \cdot 10^{-3}$ e $T_e = 400$ K e aplicando os adimensionamentos definidos para o CSTR, teríamos para estas mesmas iterações:

iteração	x_1	x_2
k	0,1000	0,2500
$k+1$	0,1200	0,2525

$$EA_x = \left[(0,1200 - 0,1000)^2 + (0,2525 - 0,2500)^2 \right]^{1/2} = (4 \cdot 10^{-4} + 6,25 \cdot 10^{-6})^{1/2} \cong 0,0202$$

$$ER_x = \frac{0,0202}{\left[(0,1000)^2 + (0,2500)^2 \right]^{1/2}} = \frac{0,0202}{0,2693} \cong 0,075 = 7,5\%$$

E, neste caso, o critério de convergência ainda não teria sido satisfeito.

5.1 Pivotamento e eliminação de Gauss

Eliminação Gaussiana: O propósito da eliminação Gaussiana é reduzir a matriz A a uma estrutura triangular (métodos de triangularização) ou diagonal (método de Gauss-Jordan) através de operações da álgebra elementar. Dentre os diversos algoritmos de eliminação Gaussiana temos os seguintes:

$$\begin{array}{l}
 k = 1, \dots, N \\
 j = k, \dots, N + 1 \\
 i = 1, \dots, N (\neq k)
 \end{array}
 \left\{ \begin{array}{l}
 a_{kj} \leftarrow \frac{a_{kj}}{a_{kk}} \\
 a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik} a_{kj}
 \end{array} \right.
 \quad \text{(Gauss-Jordan)}$$

$$\begin{array}{l}
 k = 1, \dots, N - 1 \\
 j = k + 1, \dots, N + 1 \\
 i = k + 1, \dots, N
 \end{array}
 \left\{ \begin{array}{l}
 a_{kj} \leftarrow \frac{a_{kj}}{a_{kk}} \\
 a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik} a_{kj}
 \end{array} \right.
 \quad \text{(triangularização SAXPY)}$$

onde a_{ij} são os elementos da matriz aumentada: $\tilde{A} = [A \ b]$. No caso do método de Gauss-Jordan, a solução é encontrada na $(N+1)$ -ésima coluna da matriz aumentada, após as operações de eliminação Gaussiana. Nos métodos de triangularização é necessário ainda realizar operações de substituição (para matriz triangular inferior) ou retro-substituição (para matriz triangular superior), isto é,

$$x_1 = \frac{a_{1,N+1}}{a_{1,1}}, \quad x_i = \frac{1}{a_{i,i}} \left(a_{i,N+1} - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j \right), \quad i = 2, \dots, N \quad \text{substituição}$$

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

De modo a evitar prováveis divisões por zero (dos elementos a_{kk}) e também garantir a estabilidade numérica do algoritmo (devido a problemas de arredondamento), faz-se necessário o uso de técnicas de **pivotamento**. Pivotamentos são operações de trocas de linhas e/ou colunas de modo a obter uma matriz tendo na diagonal elementos com maior valor absoluto. Quando são efetuadas somente trocas de linhas, diz-se um **pivotamento parcial**. No **pivotamento total** tem-se trocas de linhas e colunas. As operações de pivotamento podem ser representadas por matrizes de permutações P e Q :

$$P A x = P B \quad (\text{pivotamento parcial})$$

$$P A Q Q^{-1} x = P B \quad (\text{pivotamento total})$$

Exemplo: considere o sistema de equações algébricas lineares:

$$\begin{cases} 2 \cdot x_1 - 7 \cdot x_2 + 4 \cdot x_3 = 9 \\ x_1 + 9 \cdot x_2 - 6 \cdot x_3 = 1 \\ -3 \cdot x_1 + 8 \cdot x_2 + 5 \cdot x_3 = 6 \end{cases}$$

permitindo identificar: $A = \begin{bmatrix} 2 & -7 & 4 \\ 1 & 9 & -6 \\ -3 & 8 & 5 \end{bmatrix}$ e $b = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 6 \end{bmatrix}$, assim a *matriz aumentada* é:

2	-7	4	9
1	9	-6	1
-3	8	5	6

1) Método de Eliminação por Triangularização da Matriz Aumentada

1ª Etapa) Reposicionamento das linhas (pivotamento parcial) de modo que a primeira linha contenha o maior elemento (em módulo) da primeira coluna (**pivô**):

2	-7	4	9	←
1	9	-6	1	
-3	8	5	6	

-3	8	5	6
1	9	-6	1
2	-7	4	9

2ª Etapa) Normalização dos elementos da primeira linha, dividindo-os pelo 1º elemento da

mesma: $a_{kj} \leftarrow \frac{a_{kj}}{a_{kk}}$ ($k = 1$ e $j = k, \dots, N+1$)

1	-8/3	-5/3	-2
1	9	-6	1
2	-7	4	9

3ª Etapa) Eliminação dos elementos da primeira coluna da segunda e terceira linhas:

$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik} a_{kj}$ ($k = 1$, $j = k, \dots, N+1$ e $i = k+1, \dots, N$)

1	-8/3	-5/3	-2
0	35/3	-13/3	3
2	-7	4	9

1	-8/3	-5/3	-2
0	35/3	-13/3	3
0	-5/3	22/3	13

Repete-se o procedimento para próximas linhas até a triangularização da matriz aumentada:

4ª Etapa) Reposicionamento das linhas de modo que a segunda linha contenha o maior elemento (em módulo) da segunda coluna [sem levar em consideração a primeira linha]:

1	-8/3	-5/3	-2
0	35/3	-13/3	3
0	-5/3	22/3	13



Não há necessidade do reposicionamento, pois o maior elemento (em módulo) da segunda linha, desconsiderando-se a primeira linha, já se encontra na segunda linha (pivô).

5ª Etapa) Normalização dos elementos da segunda linha, dividindo-os pelo 2º elemento da mesma:

1	-8/3	-5/3	-2
0	1	-13/35	9/35
0	-5/3	22/3	13

6ª Etapa) Eliminação dos elementos da segunda coluna da terceira linha:

1	-8/3	-5/3	-2
0	1	-13/35	9/35
0	0	141/21	94/7

7ª Etapa) Normalização dos elementos da terceira linha, dividindo-os pelo 3º elemento da mesma:

1	-8/3	-5/3	-2
0	1	-13/35	9/35
0	0	1	2

8ª Etapa) Determinação recursiva de x_1 , x_2 e x_3 , iniciando com x_3 . Esta última forma da matriz aumentada traduz o sistema linear:

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

$$\begin{cases} x_1 - \frac{8}{3} \cdot x_2 - \frac{5}{3} \cdot x_3 = -2 \\ x_2 - \frac{13}{35} \cdot x_3 = \frac{9}{35} \\ x_3 = 2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_3 = 2 \\ x_2 = \frac{9}{35} + \frac{13}{35} \cdot x_3 \\ x_1 = -2 + \frac{8}{3} \cdot x_2 + \frac{5}{3} \cdot x_3 \end{cases}$$

assim:

$$\begin{cases} x_3 = 2 \\ x_2 = \frac{9}{35} + \frac{13}{35} \cdot 2 = \frac{35}{35} = 1 \\ x_1 = -2 + \frac{8}{3} \cdot 1 + \frac{5}{3} \cdot 2 = \frac{18}{3} - 2 = 6 - 2 = 4 \end{cases}$$

deste modo a solução é: $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$

Nota: no exemplo acima a diagonal da matriz também foi dividida pelos pivôs durante a etapa de eliminação Gaussiana e, por isso, na etapa de retro-substituição não houve a necessidade da divisão pelos elementos da diagonal da matriz, pois estes eram unitários. O algoritmo da triangularização SAXPY não realiza esta divisão, deixando-a para a etapa de retro-substituição.

2) Método de Eliminação por Diagonalização da Matriz Aumentada

1ª Etapa) Reposicionamento das linhas (pivotamento parcial) de modo que a primeira linha contenha o maior elemento (em módulo) da primeira coluna (pivô):

2	-7	4	9	←
1	9	-6	1	
-3	8	5	6	

-3	8	5	6
1	9	-6	1
2	-7	4	9

2ª Etapa) Normalização dos elementos da primeira linha, dividindo-os pelo 1º elemento da

linha: $a_{kj} \leftarrow \frac{a_{kj}}{a_{kk}}$ ($k = 1$ e $j = k, \dots, N+1$)

1	-8/3	-5/3	-2
1	9	-6	1
2	-7	4	9

3ª Etapa) Eliminação dos elementos da primeira coluna da segunda e terceira linhas:

$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik} a_{kj}$ ($k = 1$, $j = k, \dots, N+1$ e $i = 1, \dots, N$ com $i \neq k$)

1	-8/3	-5/3	-2
0	35/3	-13/3	3
2	-7	4	9

1	-8/3	-5/3	-2
0	35/3	-13/3	3
0	-5/3	22/3	13

4ª Etapa) Reposicionamento das linhas de modo que a segunda linha contenha o maior elemento (em módulo) da segunda coluna [sem levar em consideração a primeira linha]:

1	-8/3	-5/3	-2	
0	35/3	-13/3	3	←
0	-5/3	22/3	13	

Não há necessidade do reposicionamento, pois o maior elemento (em módulo) da segunda linha, desconsiderando-se a primeira linha, já se encontra na segunda linha.

5ª Etapa) Normalização dos elementos da segunda linha, dividindo-os pelo 2º elemento da mesma:

1	-8/3	-5/3	-2
0	1	-13/35	9/35
0	-5/3	22/3	13

6ª Etapa) Eliminação dos elementos da segunda coluna da primeira e da terceira linhas:

1	0	-279/105	-46/35
0	1	-13/35	9/35
0	0	141/21	94/7

7ª Etapa) Normalização dos elementos da terceira linha, dividindo-os pelo 3º elemento da mesma:

1	0	-279/105	-46/35
0	1	-13/35	9/35
0	0	1	2

8ª Etapa) Eliminação dos elementos da terceira coluna da primeira e da segunda linhas:

1	0	0	4
0	1	0	1
0	0	1	2

Esta última forma da matriz aumentada traduz o sistema linear:

$$\begin{cases} x_1 = 4 \\ x_2 = 1 \\ x_3 = 2 \end{cases}$$

deste modo a solução é: $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$

Exemplo: método de eliminação de Gauss para obtenção da matriz inversa. Seja a mesma matriz do exemplo ilustrativo do exemplo anterior:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -7 & 4 \\ 1 & 9 & -6 \\ -3 & 8 & 5 \end{bmatrix},$$

neste caso deseja-se determinar a matriz: $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$ tal que: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é a matriz identidade com as mesmas dimensões da matriz \mathbf{A} .

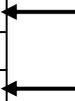
Neste caso a *matriz aumentada* é:

2	-7	4	1	0	0
1	9	-6	0	1	0
-3	8	5	0	0	1

Aplicando-se procedimento de eliminação análogo ao anterior (diagonalização), ou seja, o método de eliminação por diagonalização da matriz aumentada:

1ª Etapa) Reposicionamento das linhas de modo que a primeira linha contenha o maior elemento (em módulo) da primeira coluna:

2	-7	4	1	0	0
1	9	-6	0	1	0
-3	8	5	0	0	1



-3	8	5	0	0	1
1	9	-6	0	1	0
2	-7	4	1	0	0

2ª Etapa) Normalização dos elementos da primeira linha, dividindo-os pelo 1º elemento da linha:

1	-8/3	-5/3	0	0	-1/3
1	9	-6	0	1	0
2	-7	4	1	0	0

3ª Etapa) Eliminação dos elementos da primeira coluna da segunda e terceira linhas:

1	-8/3	-5/3	0	0	-1/3
0	35/3	-13/3	0	1	1/3
2	-7	4	1	0	0

1	-8/3	-5/3	0	0	-1/3
0	35/3	-13/3	0	1	1/3
0	-5/3	22/3	1	0	2/3

4ª Etapa) Reposicionamento das linhas de modo que a segunda linha contenha o maior elemento (em módulo) da segunda coluna [sem levar em consideração a primeira linha]:

1	-8/3	-5/3	0	0	-1/3
0	35/3	-13/3	0	1	1/3
0	-5/3	22/3	1	0	2/3



Não há necessidade do reposicionamento, pois o maior elemento (em módulo) da segunda linha, desconsiderando-se a primeira linha, já se encontra na segunda linha.

5ª Etapa) Normalização dos elementos da segunda linha, dividindo-os pelo 2º elemento da mesma:

1	-8/3	-5/3	0	0	-1/3
0	1	-13/35	0	3/35	1/35
0	-5/3	22/3	1	0	2/3

6ª Etapa) Eliminação dos elementos da segunda coluna da primeira e da terceira linhas:

1	0	-93/35	0	8/35	-9/35
0	1	-13/35	0	3/35	1/35
0	0	47/7	1	1/7	5/7

7ª Etapa) Normalização dos elementos da terceira linha, dividindo-os pelo 3º elemento da mesma:

1	0	-93/35	0	8/35	-9/35
0	1	-13/35	0	3/35	1/35
0	0	1	7/47	1/47	5/47

8ª Etapa) Eliminação dos elementos da terceira coluna da primeira e da segunda linhas:

1	0	0	93/235	67/235	6/235
0	1	0	13/235	22/235	16/235
0	0	1	7/47	1/47	5/47

As três últimas colunas desta última forma da matriz é a inversa da matriz original, isto é:

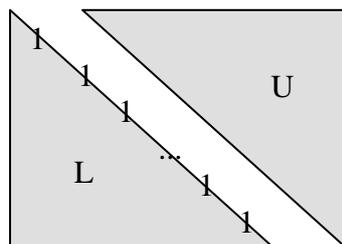
$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} 93/235 & 67/235 & 6/235 \\ 13/235 & 22/235 & 16/235 \\ 7/47 & 1/47 & 5/47 \end{bmatrix}$$

para verificar se o valor da inversa é correto deve-se calcular: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{I}$

Fatoração LU: O processo de fatoração LU decompõe a matriz A em uma matriz triangular inferior, L , e outra triangular superior, U , com elementos unitários na diagonal principal da matriz L (método de Doolittle) ou da matriz U (método de Crout):

$$A = L U$$

$$\begin{array}{l}
 k = 1, \dots, N-1 \\
 i = k+1, \dots, N \\
 j = k+1, \dots, N
 \end{array}
 \left\{ \begin{array}{l}
 a_{ik} \leftarrow \frac{a_{ik}}{a_{kk}} \\
 a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik} a_{kj}
 \end{array} \right. \quad (\text{Doolittle})$$



com uma posterior substituição: $Ly = b$

e uma retro-substituição: $Ux = y$

As principais vantagens da fatoração em relação à eliminação Gaussiana é a redução do número de operações de $\frac{2}{3}N^3 + O(N^2)$ para $\frac{1}{3}N^3 + O(N^2)$, e a manutenção das operações básicas na matriz fatorada (matriz L , na fatoração LU), que pode ser aplicada para diferentes vetores b .

3) Método de Fatoração LU da Matriz Original

1ª Etapa) Reposicionamento das linhas (pivotamento parcial) de modo que a primeira linha contenha o maior elemento (em módulo) da primeira coluna (pivô). Somente nas etapas de pivotamento adiciona-se a matriz de pivotamento (inicialmente a matriz identidade) para armazenar as operações de trocas de linhas:

2	-7	4	1	0	0
1	9	-6	0	1	0
-3	8	5	0	0	1

-3	8	5	0	0	1
1	9	-6	0	1	0
2	-7	4	1	0	0

2ª Etapa) Normalização dos elementos da primeira coluna após a primeira linha, dividindo-os

pele 1º elemento da linha: $a_{ik} \leftarrow \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$ ($k = 1$ e $i = k+1, \dots, N$)

-3	8	5
-1/3	9	-6
-2/3	-7	4

3ª Etapa) Fatoração dos elementos da segunda e terceira linhas após primeira coluna:

$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik} a_{kj}$ ($k = 1$, $i = k+1, \dots, N$ e $j = k+1, \dots, N$)

-3	8	5
-1/3	35/3	-13/3
-2/3	-7	4

-3	8	5
-1/3	35/3	-13/3
-2/3	-5/3	22/3

4ª Etapa) Reposicionamento das linhas de modo que a segunda linha contenha o maior elemento (em módulo) da segunda coluna [sem levar em consideração a primeira linha e a primeira coluna]:

-3	8	5	0	0	1
-1/3	35/3	-13/3	0	1	0
-2/3	-5/3	22/3	1	0	0

Não há necessidade do reposicionamento, pois o maior elemento (em módulo) da segunda linha, desconsiderando-se a primeira linha e primeira coluna, já se encontra na segunda linha.

5ª Etapa) Normalização dos elementos da segunda coluna após a segunda linha, dividindo-os pelo 2º elemento da mesma:

-3	8	5
-1/3	35/3	-13/3
-2/3	-1/7	22/3

6ª Etapa) Fatoração dos elementos da terceira linha após segunda coluna:

-3	8	5
-1/3	35/3	-13/3
-2/3	-1/7	47/7

7ª Etapa) Extraíndo as matrizes L e U :

Matriz L (dos multiplicadores do processo de eliminação Gaussiana) com 1 na diagonal:

1	0	0
-1/3	1	0
-2/3	-1/7	1

Matriz U :

-3	8	5
0	35/3	-13/3
0	0	47/7

Para verificar se a fatoração está correta, o produto $P \cdot L \cdot U$ deve ser igual à matriz A .

8ª Etapa) Troca das linhas do vetor b de acordo com a matriz de permutação, isto é: $P b$.

9	←
1	←
6	←

6
1
9

matriz P :

0	0	1
0	1	0
1	0	0

9ª Etapa) Determinação recursiva de y_1, y_2 e y_3 , iniciando com y_1 , do sistema $Ly = b$:

$$\begin{cases} y_1 = 6 \\ \frac{-1}{3} \cdot y_1 + y_2 = 1 \\ \frac{-2}{3} \cdot y_1 - \frac{5}{35} \cdot y_2 + y_3 = 9 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = 6 \\ y_2 = 1 + \frac{1}{3} \cdot y_1 \\ y_3 = 9 + \frac{2}{3} \cdot y_1 + \frac{5}{35} \cdot y_2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = 6 \\ y_2 = 3 \\ y_3 = \frac{94}{7} \end{cases}$$

10ª Etapa) Determinação recursiva de x_1, x_2 e x_3 , iniciando com x_3 , do sistema $Ux = y$:

$$\begin{cases} -3 \cdot x_1 + 8 \cdot x_2 + 5 \cdot x_3 = 6 \\ \frac{35}{3} \cdot x_2 - \frac{13}{3} \cdot x_3 = 3 \\ \frac{47}{7} \cdot x_3 = \frac{94}{7} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_3 = \frac{94}{47} \\ x_2 = \frac{3}{35} \cdot \left(3 + \frac{13}{3} \cdot x_3 \right) \\ x_3 = \frac{-1}{3} \cdot (6 - 5 \cdot x_3 - 8 \cdot x_2) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 4 \\ x_2 = 1 \\ x_3 = 2 \end{cases}$$

deste modo a solução é: $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$

Caso desejássemos resolver outro sistema somente modificando o vetor b , bastaria repetir os passos 8 a 10, pois a matriz A já está fatorada. Do mesmo modo, para obter a inversa da matriz A , basta repetir estes três passos para os três vetores coluna da matriz identidade.

ANÁLISE DA SOLUÇÃO DE SISTEMAS ALGÉBRICOS LINEARES

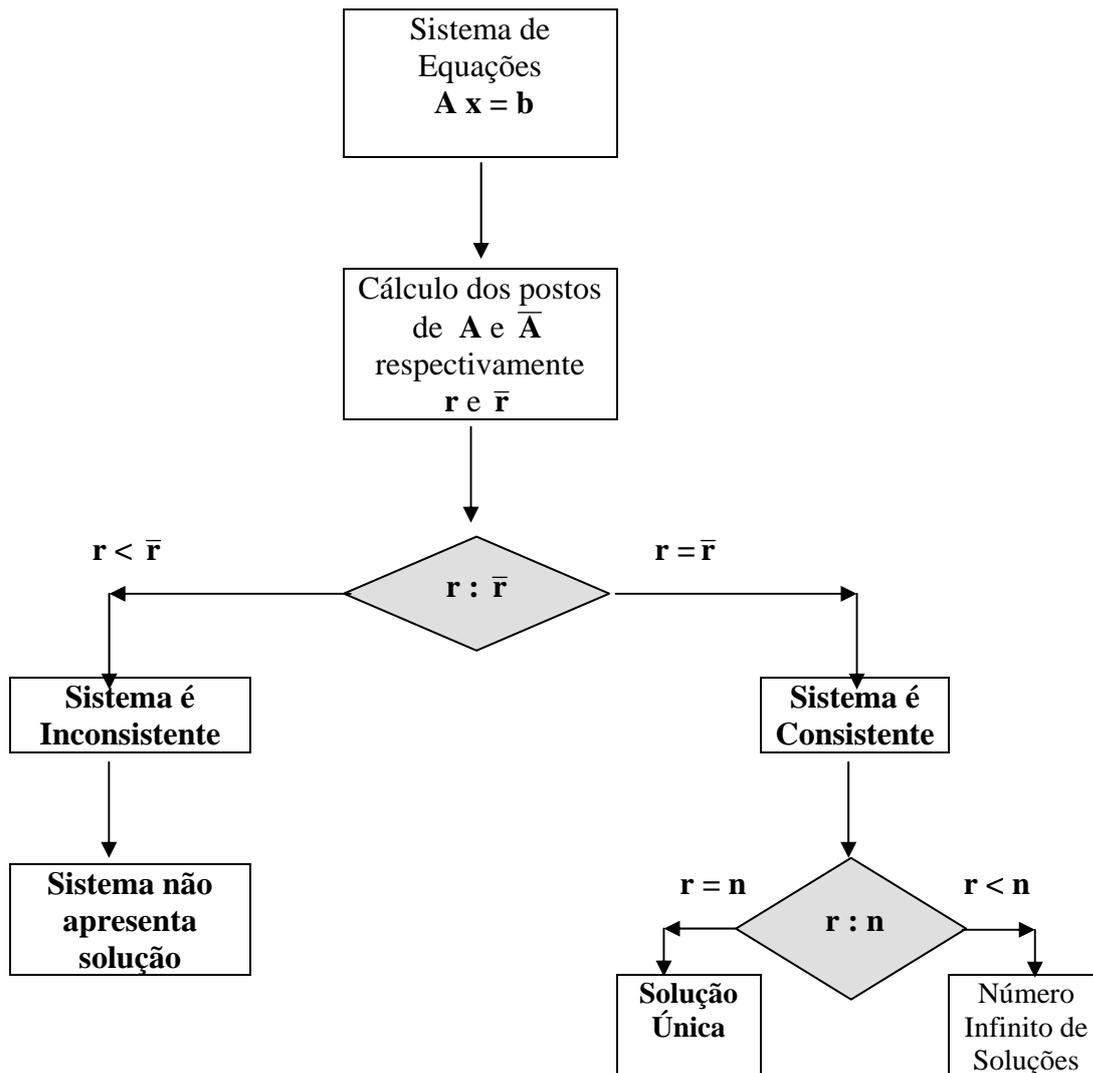
É o objetivo de esta seção fornecer os elementos para a análise de sistemas de equações algébricas lineares da forma: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$, onde \mathbf{A} é uma matriz quadrada (n,n) chamada de matriz dos coeficientes, $\mathbf{b} \in \mathfrak{R}^n$ chamado de vetor das constantes e $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$ chamado de vetor das incógnitas a solução deste sistema só existe se a matriz \mathbf{A} for regular e pode ser expressa na forma: $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}$. Este procedimento já se encontra implementado, com grande eficiência, em inúmeros pacotes computacionais (**MATCAD**, **MAPLE**, **MATLAB**, etc.) e dificilmente haverá a necessidade de reprogramá-lo. Entretanto dois aspectos de natureza qualitativa da estrutura do sistema devem ser analisados:

① Nem sempre o número de equações do sistema é igual ao número de incógnitas. Neste caso o sistema é descrito da mesma forma apresentada acima: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$, mas a matriz \mathbf{A} é retangular (m,n) o vetor $\mathbf{b} \in \mathfrak{R}^m$ e o vetor das incógnitas $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$, isto é m é o número de equações e n o número de incógnitas. O sistema de equações pode também ser rescrito na forma:

$$\mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = (\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{a}_n) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x_1 \mathbf{a}_1 + x_2 \mathbf{a}_2 + \cdots + x_n \mathbf{a}_n, \text{ onde } \mathbf{a}_k \in \mathfrak{R}^m \text{ para } k = 1, 2, \dots, n$$

são os vetores colunas da matriz \mathbf{A} , desta forma os n elementos do vetor \mathbf{x} podem ser interpretados como os componentes do vetor \mathbf{b} na base formada pelos n vetores $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$ sendo assim obrigatoriamente linearmente dependente do conjunto. Sendo r o número de vetores linearmente independentes no conjunto de n vetores [$r \leq n$] $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$, este deve ser igual ao número de vetores linearmente independentes do conjunto de $n+1$ vetores $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n, \mathbf{b}$. Isto é o posto, r , da matriz $\mathbf{A} = (\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{a}_n)$ deve ser igual ao posto, \bar{r} , da matriz [chamada de matriz aumentada] $\bar{\mathbf{A}} = (\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{a}_n \quad \mathbf{b})$.

Quando $r = \text{posto}(\mathbf{A}) = \bar{r} = \text{posto}(\bar{\mathbf{A}})$ o sistema é dito consistente e admite solução, entretanto só admite solução única de $r = \text{posto}(\mathbf{A}) = n$. Se $m \geq n$ (número de equações \geq número de incógnitas) o $\text{posto}(\mathbf{A})$ é no máximo n , enquanto que se $m < n$ (número de equações $<$ número de incógnitas) o $\text{posto}(\mathbf{A})$ é no máximo $m < n$, portanto só há possibilidade do sistema apresentar solução única se $m \geq n$ (número de equações \geq número de incógnitas). Caso $\mathbf{b} \equiv \mathbf{0}$ o sistema é dito homogêneo e como neste caso $r = \text{posto}(\mathbf{A})$ será sempre igual a $\bar{r} = \text{posto}(\bar{\mathbf{A}})$ o sistema será sempre consistente e caso $r = n$ admite como solução única a solução trivial $\mathbf{x} \equiv \mathbf{0}$, deste modo para o sistema homogêneo de n equações e n incógnitas $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{0}$ onde: $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ e $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$, só apresenta solução não trivial se $r = \text{posto}(\mathbf{A}) < n$, isto é a matriz \mathbf{A} deve ser singular. O esquema de caracterização da consistência e da existência de solução de sistemas algébricos lineares é mostrado no diagrama abaixo:



Exemplos Ilustrativos:

(a) Analise a consistência do sistema linear de equações algébricas:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 3 \\ 2x_1 + 2x_2 = 0 \\ x_1 - x_2 = -1 \end{cases} \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad r=2 \quad \text{e a matriz aumentada: } \bar{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 2 & 2 & 0 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad \bar{r} = 3,$$

sistema inconsistente. Haveria duas possibilidades de *corrigir* este sistema: (i) substituindo no lado direito da segunda equação 0 por 6, e neste caso a solução seria: $x_1 = 1$ e $x_2 = 2$; (ii) substituindo no lado direito da primeira equação 3 por 0, neste caso a solução seria $x_1 = -0,5$ e $x_2 = +0,5$.

(b) Analise a consistência e as possíveis soluções do sistema linear de equações algébricas:

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 = 0 \\ x_1 + x_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad r=2 \quad \text{e a matriz aumentada: } \bar{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \bar{r} = 2,$$

assim o sistema é consistente e como $r = n = 2$ apresenta solução única que é a solução trivial $x_1 = x_2 = 0$ pois o sistema é homogêneo. [Este exemplo ilustra a observação feita anteriormente relativa a sistemas homogêneos].

(c) Analise a consistência e as possíveis soluções do sistema linear de equações algébricas:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 4 \\ 3x_1 + 6x_2 - x_3 = 8 \end{cases} \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 3 & 6 & -1 \end{pmatrix} \quad r=2 \quad \text{e a matriz aumentada: } \overline{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 4 \\ 3 & 6 & -1 & 8 \end{pmatrix}$$

apresenta o posto $\bar{r} = 2$, assim o sistema é consistente (aliás se $m < n$ e se $r=m$ o sistema será sempre consistente, indicando que m vetores coluna de \mathbf{A} constituem uma base de \mathfrak{R}^m desta forma o vetor \mathbf{b} necessariamente será linearmente dependente destes vetores e, em consequência, a matriz $\overline{\mathbf{A}}$ apresenta sempre posto igual ao de \mathbf{A} , além disto como $r = m < n$ o sistema, neste caso, apresentará sempre um número infinito de soluções). Como $r = 2 < 3$ o sistema apresenta um número infinito de soluções, entretanto note que o sistema pode ser

reescrito na forma:
$$\begin{cases} (x_1 + 2x_2) + x_3 = 4 \\ 3(x_1 + 2x_2) - x_3 = 8 \end{cases} \Rightarrow \text{definindo: } z_1 = x_1 + 2x_2, \text{ tem-se:}$$

$$\begin{cases} z_1 + x_3 = 4 \\ 3z_1 - x_3 = 8 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} z_1 = (x_1 + 2x_2) = 3 \\ x_3 = 1 \end{cases}.$$

Este exemplo ilustra que em sistemas consistentes com menos equações do que incógnitas não se pode arbitrar indiscriminadamente $(n-m)$ variáveis calculando as m restantes em função destas, neste processo de escolha de $(m-n)$ entre as n incógnitas deve ser feita de modo que a matriz do sistema após esta escolha tenha posto $= n$. Assim se no exemplo o valor arbitrado de x_3 fosse diferente de $\underline{1}$ o sistema resultante seria inconsistente, pois com $x_3=2$, por exemplo,

tem-se:
$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 = 2 \\ 3x_1 + 6x_2 = 10 \end{cases} \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} \quad r=1 \quad \text{e a matriz aumentada:}$$

$$\overline{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 3 & 6 & 10 \end{pmatrix} \quad \text{tem o posto } \bar{r} = 2, \text{ sendo assim o sistema inconsistente. Entretanto se a}$$

variável x_1 , por exemplo, tivesse um valor arbitrado α qualquer, ter-se-ia:

$$\begin{cases} 2x_2 + x_3 = 4 - \alpha \\ 6x_2 - x_3 = 8 - 3\alpha \end{cases} \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 6 & -1 \end{pmatrix} \quad r=2 \quad \text{e a matriz aumentada: } \overline{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 2 & 6 & 4 - \alpha \\ 6 & -1 & 8 - 3\alpha \end{pmatrix} \quad \text{tem o}$$

posto $\bar{r} = 2$ independente do valor de α , então neste caso o sistema é sempre consistente.

② Mesmo no caso em que $m=n$ e em que \mathbf{A} é regular a solução do sistema posta na forma: $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}$ não assegura que a solução seja exata [uma prática recomendada é após o programa fornecer o vetor \mathbf{x} calcular $\delta = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b}$ que é o chamado *resíduo* da solução. Quanto mais próximo δ estiver do vetor $\mathbf{0}$, ou seja: $\|\delta\| \cong 0$, maior é a precisão do resultado] nem tão pouco que a obtenção da inversa da matriz \mathbf{A} seja *fácil* [isto é especialmente verdadeiro se os elementos de \mathbf{A} apresentarem ordens de grandeza muito distintas, neste caso a matriz é dita *mal condicionada*]. Estes dois fatos geralmente ocorrem devido ao *mau condicionamento* da matriz \mathbf{A} que é medido pelos chamados *números de condicionamento*, valores elevados dos números de condicionamento é um forte indicativo de dificuldades numéricas na resolução do sistema e na inversão da matriz \mathbf{A} . Os quatro números abaixo são usualmente considerados:

- ❶ $M = n \cdot M(\mathbf{A}) \cdot M(\mathbf{A}^{-1})$, onde $M(\mathbf{A}) = \max_{i,j} |a_{ij}|$ isto é, é o valor do módulo do elemento da matriz \mathbf{A} que apresenta o maior valor absoluto;
- ❷ $N = N(\mathbf{A}) \cdot N(\mathbf{A}^{-1})$, onde $N(\mathbf{A})$ é a norma euclidiana de \mathbf{A} definida por:

$$N(\mathbf{A}) = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^T)};$$

- ❸ $P = \frac{|\lambda|}{|\mu|}$ onde $|\lambda|$ e $|\mu|$ são, respectivamente, os valores absolutos do maior e do menor valor característico de \mathbf{A} em módulo (ou da parte real dos mesmos).
- ❹ $\kappa = \frac{\sigma_{\max}(\mathbf{A})}{\sigma_{\min}(\mathbf{A})}$, onde $\sigma(\mathbf{A})$ são os valores singulares de \mathbf{A} ou a raiz quadrada dos valores característicos de $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^T$.

Exemplo: o sistema linear é o chamado problema de T. S. Wilson:

$$\begin{cases} 10x + 7y + 8z + 7w = 32 \\ 7x + 5y + 6z + 5w = 23 \\ 8x + 6y + 10z + 9w = 33 \\ 7x + 5y + 9z + 10w = 31 \end{cases}$$

a solução exata deste sistema é $x = y = z = w = 1$, entretanto adotando-se $x = 6$; $y = -7,2$; $z = 2,9$ e $w = -0,1$ os resultados de cada uma das equações são 32,1; 22,9; 32,9 e 31,1; e adotando $x = 1,5$; $y = 0,18$; $z = 1,19$ e $w = 0,89$ os correspondentes resultados são 32,01; 22,99; 32,99 e 31,01.

A matriz característica deste sistema é: $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 10 & 7 & 8 & 7 \\ 7 & 5 & 6 & 5 \\ 8 & 6 & 10 & 9 \\ 7 & 5 & 9 & 10 \end{pmatrix}$ cuja inversa é:

$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 25 & -41 & 10 & -6 \\ -41 & 68 & -17 & 10 \\ 10 & -17 & 5 & -3 \\ -6 & 10 & -3 & 2 \end{pmatrix}$ e os valores característicos desta matriz são: 0,01015;

0,843107; 3,858057 e 30,288685, assim as duas normas destas matrizes são: $M(\mathbf{A}) = 10$; $M(\mathbf{A}^{-1}) = 68$, $N(\mathbf{A}) = 30,5451$ e $N(\mathbf{A}^{-1}) = 98,5292$, então os números de condicionamento são:

❶ $M = n \cdot M(\mathbf{A}) \cdot M(\mathbf{A}^{-1}) = 4 \cdot 10 \cdot 68 = 2720$;

❷ $N = N(\mathbf{A}) \cdot N(\mathbf{A}^{-1}) = 30,5451 \cdot 98,5292 = 3009,58$

❸ $P = \frac{|\lambda|}{|\mu|} = \frac{30,2887}{0,0102} = 2984,09$

❹ $\kappa = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}} = \frac{30,2887}{0,0102} = 2984,09$ (igual ao caso 3, pois a matriz \mathbf{A} é simétrica)

5.2 Métodos iterativos para sistemas lineares

Da mesma forma que os métodos diretos, existe uma grande variedade de métodos iterativos para solução de sistemas lineares, dentre estes:

- iterações de Jacobi
- iterações de Gauss-Seidel
- iterações SOR
- Minimização
- iterações ADI
- iterações de Richardson
- iterações de Chebyshev
- Gradiente Conjugado (CG)
- Gradiente Conjugado Quadrático (CGS)
- Gradiente BiConjugado (BiCG)
- Gradiente BiConjugado Estabilizado (BiCGSTAB)
- Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES)

Abordaremos aqui somente os quatro primeiros.

Jacobi

É um método iterativo para a solução de sistemas lineares expresso, na forma matricial, por:

$$x^{k+1} = M x^k + c \quad , \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

onde $M = D^{-1} B$, $c = D^{-1} b$, $B = D - A$. Sendo D a diagonal da matriz A . O método escrito para cada elemento do vetor x apresenta a seguinte forma:

$$x_i^{k+1} = \frac{b_i - \sum_{j=1(\neq i)}^N a_{ij} x_j^k}{a_{ii}} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad \text{e} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Gauss-Seidel

Este método é uma modificação do método de Jacobi, cujo princípio é de usar os novos valores de x tão logo eles estejam disponíveis. Neste caso a matriz $M = (D - L)^{-1} U$ e o vetor $c = (D - L)^{-1} b$, onde D , L e U são as matrizes diagonal, triangular inferior e triangular superior, respectivamente, extraídas da matriz $A = D - L - U$. O método escrito para cada elemento do vetor x apresenta a seguinte forma:

$$x_i^{k+1} = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^k}{a_{ii}}, \quad i = 1, \dots, N \quad \text{e} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

SOR

O método das sobre-relaxações sucessivas (SOR - *successive overrelaxation*) é uma variação do método de Gauss-Seidel pela introdução de um fator de relaxação (ω):

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \omega (\hat{x}_i^{k+1} - x_i^k)$$

onde \hat{x}_i^{k+1} é proveniente do método de Gauss-Seidel. Tanto o método SOR, quanto o método de Gauss-Seidel, ao contrário do método de Jacobi, dependem da ordem em que as equações são resolvidas.

A convergência destes métodos iterativos é caracterizada pela matriz de iteração, M :

$$x^{k+1} = M x^k + c, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

sendo convergentes se, e somente se, todos os valores característicos de M possuírem valor absoluto menor que 1. Uma condição suficiente para convergência é:

$$\|M\|_l < 1$$

onde

$$\|M\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^N |m_{ij}| \quad \text{norma 1} \quad \|M\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N m_{ij}^2} = \sqrt{\text{tr}(M \cdot M^T)} \quad \text{norma Frobenius}$$

$$\|M\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^N |m_{ij}| \quad \text{norma } \infty$$

Minimização

A solução de sistemas lineares também pode ser obtida por técnicas de otimização, através da transformação do problema $A x = b$ em:

$$S(x) = (Ax - b)^T (Ax - b)$$

ou $S(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ no caso de A ser simétrica e positiva definida,

onde deseja-se encontrar x tal que $S(x)$ é mínimo.

5.3 Sistemas tri-diagonais

Método de Thomas: Um caso particular, muito comum, de sistemas lineares, é o sistema tri-diagonal, que pode ser representado da forma:

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

onde a é a sub-diagonal, b é a diagonal e c é a super-diagonal da matriz A , com $x_0 = 0$ e $x_{n+1} = 0$ como condições de contorno. A solução deste sistema pelo método de Thomas tem a forma:

$$x_n = \gamma_n$$

$$x_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} x_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 2, 1$$

onde

$$\beta_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \quad \text{e} \quad \gamma_i = \frac{d_i - a_i \gamma_{i-1}}{\beta_i}, \quad i = 2, 3, \dots, n.$$

com $\beta_1 = b_1$ e $\gamma_1 = \frac{d_1}{\beta_1}$.

Para entendermos este procedimento, temos:

Primeira equação: $b_1 x_1 + c_1 x_2 = d_1$

Última equação: $a_n x_{n-1} + b_n x_n = d_n$

Fazendo: $x_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} x_{i+1} \quad i = 1, \dots, n \quad x_n = \gamma_n$

Pela primeira equação: $x_1 = \frac{d_1}{b_1} - \frac{c_1}{b_1} x_2 \quad x_1 = \gamma_1 - \frac{c_1}{\beta_1} x_2$

Logo, $\beta_1 = b_1$ e $\gamma_1 = \frac{d_1}{\beta_1}$

Equação i : $x_{i-1} = \gamma_{i-1} - \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} x_i; \quad a_i x_{i-1} + b_i x_i = d_i - c_i x_{i+1}$

$$a_i \left(\gamma_{i-1} - \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} x_i \right) + b_i x_i = d_i - c_i x_{i+1}$$

$$\left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right) x_i = (d_i - a_i \gamma_{i-1}) - c_i x_{i+1} \quad x_i = \frac{(d_i - a_i \gamma_{i-1})}{\left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} - \frac{c_i}{\left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} x_{i+1}$$

$$x_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} x_{i+1}$$

$$\boxed{\beta_i = \left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \beta_1 = b_1$$

$$\boxed{\gamma_i = \frac{d_i - a_i \gamma_{i-1}}{\beta_i}} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \gamma_1 = \frac{d_1}{\beta_1}$$

$$\boxed{x_n = \gamma_n} \quad \boxed{x_i = \gamma_i - \frac{c_i}{\beta_i} x_{i+1}} \quad \text{para } i = n-1, n-2, \dots, 1$$

Quando x_0 e/ou x_{n+1} não são nulos, isto é $X_0 = A$ e $X_{n+1} = B$, a solução do sistema $a_i X_{i-1} + b_i X_i + c_i X_{i+1} = d_i$, usando o princípio da superposição, é expressa na forma: $X_i = x_i + A \cdot y_i + B \cdot z_i$ sendo x_i a solução do sistema apresentada acima (com $x_0 = x_{n+1} = 0$, mas $a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i$) os termos y_i e z_i são soluções das equações homogêneas com condições de contorno não-homogêneas:

(i) $a_i y_{i-1} + b_i y_i + c_i y_{i+1} = 0$ com $y_0 = 1$ e $y_{n+1} = 0$, assim a primeira equação seria:

$$a_1 \cdot 1 + b_1 y_1 + c_1 y_2 = 0 \Rightarrow y_1 = -\frac{a_1}{b_1} - \frac{c_1}{b_1} y_2, \text{ buscando uma forma recursiva da mesma forma}$$

que na resolução anterior: $y_i = \delta_i - \frac{c_i}{\beta_i} y_{i+1}$ como $y_{n+1} = 0$, tem-se: $y_n = \delta_n$ e, em vista de:

$$y_1 = -\frac{a_1}{b_1} - \frac{c_1}{b_1} y_2: \beta_1 = b_1 \text{ e } \delta_1 = -\frac{a_1}{b_1} = -\frac{a_1}{\beta_1}.$$

$$y_{i-1} = \delta_{i-1} - \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} y_i, \text{ assim: } a_i y_{i-1} + b_i y_i = \left(b_i - a_i \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right) y_i + a_i \delta_{i-1}, \text{ mas:}$$

$$a_i y_{i-1} + b_i y_i + c_i y_{i+1} = 0 \text{ e identificando: } \beta_i = b_i - a_i \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \Rightarrow \beta_i y_i = -a_i \delta_{i-1} - c_i y_{i+1}, \text{ obtendo-}$$

se a mesma forma recursiva de determinação de β_i e $\delta_i = -\frac{a_i \delta_{i-1}}{\beta_i}$. Deste modo:

$$\boxed{\beta_i = \left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \beta_1 = b_1$$

$$\boxed{\delta_i = -\frac{a_i \delta_{i-1}}{\beta_i}} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \delta_1 = -\frac{a_1}{\beta_1}$$

$$\boxed{y_n = \delta_n} \text{ e } \boxed{y_i = \delta_i - \frac{c_i}{\beta_i} y_{i+1}} \quad \text{para } i = n-1, n-2, \dots, 1$$

(ii) $a_i z_{i-1} + b_i z_i + c_i z_{i+1} = 0$ com $z_0 = 0$ e $z_{n+1} = 1$, assim a primeira equação seria:

$b_1 z_1 + c_1 z_2 = 0 \Rightarrow z_1 = -\frac{c_1}{b_1} z_2$, buscando uma forma recursiva da mesma forma que nas

resoluções anteriores: $z_i = \lambda_i - \frac{c_i}{\beta_i} z_{i+1}$ como $z_{n+1} = 1$, tem-se: $z_n = \lambda_n - \frac{c_n}{\beta_n}$ e, em vista de:

$$z_1 = -\frac{c_1}{b_1} z_2: \beta_1 = b_1 \text{ e } \lambda_1 = 0.$$

$$z_{i-1} = \lambda_{i-1} - \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} z_i, \text{ assim: } a_i z_{i-1} + b_i z_i = \left(b_i - a_i \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right) z_i + a_i \lambda_{i-1}, \text{ mas:}$$

$$a_i z_{i-1} + b_i z_i + c_i z_{i+1} = 0 \text{ e identificando: } \beta_i = b_i - a_i \frac{c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \Rightarrow \beta_i z_i = -a_i \lambda_{i-1} - c_i z_{i+1}, \text{ obtendo-}$$

se a mesma forma recursiva de determinação de β_i e $\lambda_i = -\frac{a_i \lambda_{i-1}}{\beta_i}$. Deste modo:

$$\boxed{\beta_i = \left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \right)} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \text{ com } \beta_1 = b_1$$

$$\lambda_i = -\frac{a_i \lambda_{i-1}}{\beta_i} \text{ para } i = 2, \dots, n \text{ com } \lambda_1 = 0 \Rightarrow \lambda_i = 0 \text{ para } i = 1, \dots, n$$

$$\boxed{z_{n+1} = 1} \text{ e } \boxed{z_i = -\frac{c_i}{\beta_i} z_{i+1}} \text{ para } i = n, n-1, \dots, 1$$

Observe que as soluções dos itens (i) e (ii) acima também podem ser obtidas diretamente pelas relações recursivas do sistema original bastando fazer:

- (i) $d_1 = -a_1 y_0$ e $d_i = 0, i = 2, 3, \dots, n$
- (ii) $d_n = -c_n z_{n+1}$ e $d_i = 0, i = 1, 2, \dots, n-1$

e considerar ambas as condições de contorno nulas ($x_0 = 0$ e $x_{n+1} = 0$), pois elas já foram embutidas em d_1 e d_n , respectivamente. Ao final deve-se lembrar que y_0 e z_{n+1} são dados.

5.4 Método das substituições sucessivas para sistemas não-lineares

Similarmente ao caso monovariável, o método das substituições sucessivas aplicado a sistemas de equações algébricas tem a forma:

$$x^{k+1} = G(x^k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

com critério de convergência também similar:

$$\|G(x^k) - G(x^*)\| \leq \rho \|x^k - x^*\|, \quad 0 < \rho < 1.$$

Exemplo:

$$\begin{cases} x_1 = 1 - D_a C_{Ae}^{n-1} x_1^n \exp\left(\gamma \frac{x_2}{1+x_2}\right) = g_1(x_1, x_2) \\ x_2 = \beta - \alpha(1 - x_1) = g_2(x_1, x_2) \end{cases}$$

5.5 Generalização do método de Newton-Raphson

A extensão do método de Newton ao caso multivariável implica na substituição da derivada da função $f(x)$ pela matriz das derivadas parciais de $F(x)$ com respeito a x , denominada de matriz Jacobiana, $J(x)$. Assim, o método de Newton-Raphson apresenta a seguinte forma:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [J(x^{(k)})]^{-1} F(x^{(k)}) \quad , \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

onde $J_{ij}(x^{(k)}) = \frac{\partial F_i(x^{(k)})}{\partial x_j}$. A solução do sistema linear resultante pode ser resolvido tanto por métodos diretos como por métodos iterativos.

Uma modificação no método de Newton-Raphson é manter a matriz Jacobiana fixa por um determinado número de iterações:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha [J(x^{(m)})]^{-1} F(x^{(k)}) \quad , \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

onde $m \leq k$ e $0 < \alpha \leq 1$. O parâmetro α , que depende da iteração, é usado para compensar o fato da matriz Jacobiana ser mantida fixa por algumas iterações. Obviamente, $\alpha = 1$ quando $m = k$.

Caso não se tenha disponível a expressão analítica da matriz Jacobiana, esta pode ser obtida numericamente por perturbações em $F(x)$:

$$J_{ij}(x^{(k)}) \cong \frac{F_i(x^{(k)} + \delta_j e_j) - F_i(x^{(k)})}{\delta_j}$$

onde e_j é o j -ésimo vetor unitário (vetor com valor 1 na posição j e zero nas demais) e δ_j é a perturbação na variável $x_j^{(k)}$, por exemplo, $\delta_j = \varepsilon_{abs}$ ou $\delta_j = \sqrt{\varepsilon} \cdot \max(|x_j^{(k)}|, \varepsilon_{abs}, 100\sqrt{\varepsilon})$, onde ε_{abs} é a tolerância absoluta para x e ε é a precisão da máquina. A maneira usual de construir esta matriz é o preenchimento coluna a coluna, ou seja, ao perturbar a variável j , calcula-se o vetor das funções $F(x^{(k)} + \delta_j e_j)$ e monta-se a coluna j da matriz. Por outro lado, existem vários softwares disponíveis para obtenção analítica da matriz, tanto por diferenciação simbólica (MAPLE, MATHCAD, MAXIMA, etc.) quanto por diferenciação automática que aplica a regra da cadeia (ADIFOR, ADOL-C, etc.).

A extensão do método da continuação para sistemas de equações algébricas segue o mesmo caminho do método de Newton-Raphson.

Lista de exercícios

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:

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

L : vazão molar da fase líquida;

V : vazão molar da fase gás;

H : número de moles 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: $y_i = \frac{m \cdot x_i}{1 + \alpha \cdot x_i}$.

Utilizando os seguintes valores das variáveis e de parâmetros: $L = 40 \text{ kmol/h}$; $V = 60 \text{ kmol/h}$; $H = 20 \text{ kmol}$; $k = \frac{1}{2} \text{ h}^{-1}$, $m = 0,75$, $\alpha = 0,05$, $N = 6$; $y_0 = 0,254237$ e $x_7 = 0$, as equações do modelo transformam-se em:

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

$$\text{onde } y_0 = 0,25 \text{ ; } x_7 = 0 \text{ e } y_i = \frac{0,75 \cdot x_i}{1 + 0,05 \cdot x_i} \text{ para } i = 1, 2, 3, 4, 5, 6.$$

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

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

$$\text{onde } y_0^{(0)} = 0,254327 \text{ ; } x_7^{(0)} = 0 \text{ e } y_i^{(0)} = 0,75 \cdot x_i^{(0)} \text{ para } i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

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;

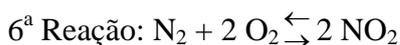
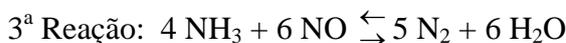
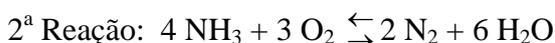
1b) Para resolver o problema aplicou-se o método de Newton-Raphson ao sistema original, indique abaixo como seria este procedimento indicando claramente a matriz Jacobiana correspondente;

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

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:



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 3 reações do esquema apresentado que sejam independentes entre si, justificando sua escolha pelo cálculo do posto da matriz estequiométrica das reações escolhidas.

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 $i = 1, 2, \dots, n$ na forma:

$$x_k^{(r+1)} = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{k-1} a_{ij} \cdot x_j^{(r)} - \sum_{j=k+1}^n a_{ij} \cdot x_j^{(r)}}{a_{ik}} \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n. \text{ Sendo } x_j^{(r)} \text{ é o valor da variável } x_j \text{ na}$$

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 $i = 1, 2, \dots, n$.

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

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

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:

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

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

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

onde $\alpha = K \cdot \frac{G}{L}$; $X_i = \frac{y_i}{y_N}$, 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:

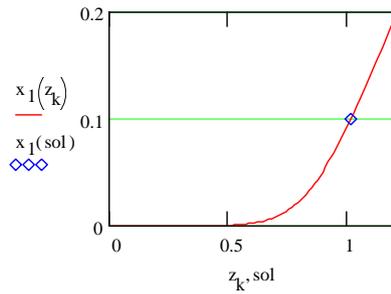
$$X_i = \alpha^{N+1-i} \cdot \left(\frac{\alpha^i - 1}{\alpha^{N+1} - 1} \right) \quad \text{para } i = 1, \dots, N. \text{ Como removeria a aparente singularidade desta}$$

expressão para $\alpha = 1$?

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 se apresenta o gráfico de X_1 versus α

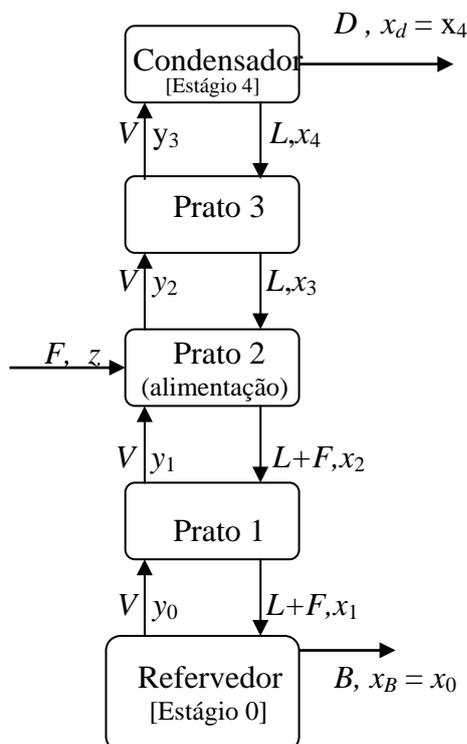


Aplicou-se a esta equação o método de Newton-Raphson obtendo-se os resultados:

<i>chute inicial = 0,8</i>		<i>chute inicial = 1,5</i>		<i>chute inicial = 0,4</i>	
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	$-4,0824 \cdot 10^3$
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:



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

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

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

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

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

Prato 2 (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; $V = (1+R) \cdot D$: 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:

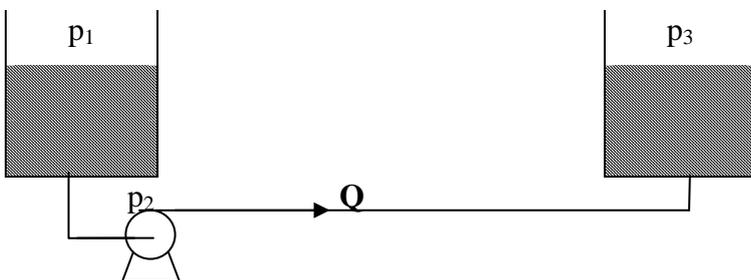
Problema a: $B = 20$ kmol/h; $L = 400$ kmol/h e $V = 480$ kmol/h

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: $p_2 - p_3 = 8 \cdot \frac{f_M \cdot \rho \cdot L \cdot Q^2}{\pi^2 \cdot D^5}$

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: $\rho = 62,4 \text{ lb}_m/\text{ft}^3$; (b) querosene: $\rho = 51,4 \text{ lb}_m/\text{ft}^3$.

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

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

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

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

onde ε : rugosidade interna do tubo;

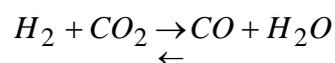
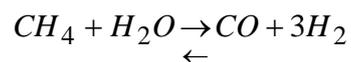
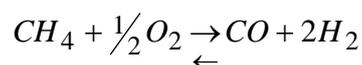
D : diâmetro interno do tubo.

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

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

Refaça todas as situações do problema 1 com essas novas considerações.

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



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 2200°F. A pressão de operação do reator é igual a 20 atm e a temperatura de entrada dos reagentes é igual a 1000°F.

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

$$\text{Reação 1: } K_1 = \frac{P_{CO} \cdot P_{H_2}^2}{P_{CH_4} \cdot P_{O_2}^{1/2}} \cong 1,3 \cdot 10^{11} \quad \text{Reação 2: } K_2 = \frac{P_{CO} \cdot P_{H_2}^3}{P_{CH_4} \cdot P_{H_2O}} \cong 1,7837 \cdot 10^5$$

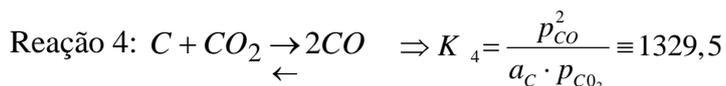
$$\text{Reação 3: } K_3 = \frac{P_{CO} \cdot P_{H_2O}}{P_{CO_2} \cdot P_{H_2}} \cong 2,6058$$

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 2200°F estão listadas abaixo:

Componente	$H^{1000^\circ F}$ (BTU/lbmol)	$H^{2200^\circ F}$ (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:



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 moles do CO no equilíbrio/mol de CH_4 na alimentação;

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

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

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

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

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

x_7 : número de moles total 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:

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

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

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

Balanco 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: $x_1 \cdot x_3 = 2,6058 \cdot x_2 \cdot x_4$

Balanco de energia:

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

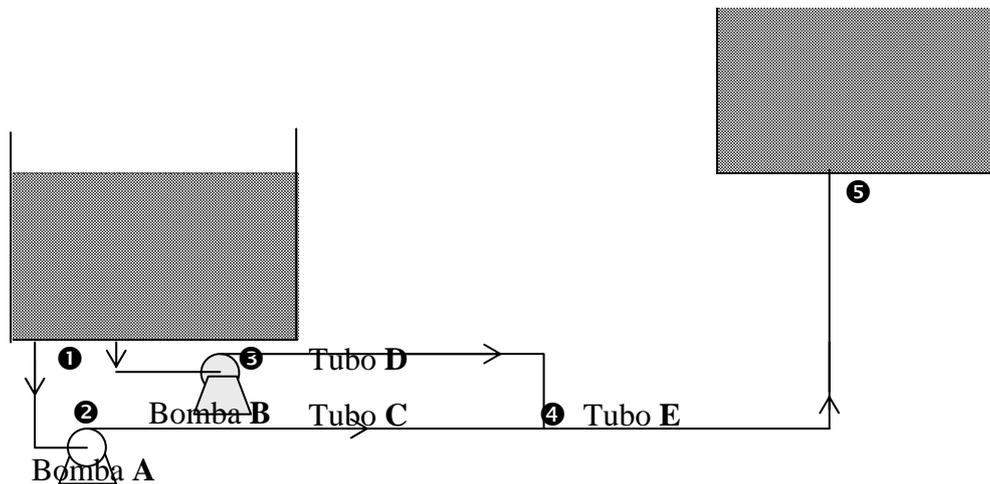
Resolva este sistema de equações algébricas.

Após resolver o sistema calcule: $\bar{K} = \frac{P_{CO}^2}{a_C \cdot P_{CO_2}} \cong \frac{P_{total} \cdot x_1^2}{x_2 \cdot x_7}$ 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!

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.

10) Considere o sistema hidráulico esquematizado abaixo:



As pressões p_1 e p_5 nos pontos 1 e 5 podem ser consideradas como iguais à pressão atmosférica. As equações que descrevem o escoamento em cada trecho do sistema são:

Ponto de junção 4 : $Q_E = Q_D + Q_C$

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

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

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

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

Onde $z_5 - z_4 = 70 \cdot \text{ft}$ (elevação da tubulação), $f_M = 0,02792$, $\rho = 62,43 \text{ lb}_m/\text{ft}^3$ (água),

$p_1 = p_5 = 1,00 \text{ atm}$ 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 .

11) Resolva o sistema linear abaixo:

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

12) Resolva a equação de diferenças:

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

Resolva para $n = 4, 5$ e 6 .

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

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

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:

$y_i = m \cdot x_i$, 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.