Capítulo 5 - SOLUÇÃO DE PROBLEMAS COMPUTACIONAIS

5. 1 - Introdução

Este capítulo contém um conjunto de problemas cuja resolução deve ser feita através do desenvolvimento de um programa computacional. Alguns do problemas estão resolvidos, incluindo a listagem de programação comentada, o que pode servir como um valioso auxílio para a compreensão dos conceitos envolvidos.

Os exercícios apresentados incluem os conhecimentos teóricos relativos ao conteúdo do curso (especialmente balanço material em regime estacionário) e podem ser resolvidos através dos fundamentos de programação em Matlab.

Inicialmente, são apresentados um roteiro de etapas sugeridas para a solução de problemas através do computador e um conjunto de dicas úteis para a programação em Matlab.

5. 2 - Roteiro para Resolução de Problemas através do Computador

Para facilitar o processo de resolução de um problema de engenharia através de uma linguagem de programação, sugere-se o seguinte roteiro simplificado:

a) Leia atentamente o enunciado do problema (pode parecer óbvio mas muitos erros ocorrem apenas devido a uma leitura desatenta do texto);

b) Proponha um procedimento para a resolução do problema, selecionando um conjunto adequado de equações e/ou algoritmos que devem ser utilizados na solução;

c) Organize o conjunto de cálculos que o programa deverá executar, etapa por etapa para atingir a solução desejada (fluxograma);

d) Inicie a redação do programa, através da digitação dos comandos necessários em seqüência para executar cada etapa proposta. Note que só após o desenvolvimento da solução à parte, passamos para a implementação da solução no computador. Sentar em frente ao computador antes de analisar atentamente o problema pode dificultar bastante a solução;

e) Após escrever o programa, faça um teste inicial, e, uma vez que erros naturalmente devem ocorrer (Lei de Murphy), faça um procedimento de correção ("debugagem"), eliminando todos os erros, um após outro, até que todo programa seja executado sem erros;

f) Se todos os erros que impediam a execução do programa foram eliminados, isto não significa necessariamente que este esteja correto, ou seja, o programa pode fornecer respostas erradas. Para evitar que isto ocorra, após executar o programa de forma completa pela primeira vez, sempre verifique a coerência das respostas (por exemplo, frações molares de uma mesma corrente devem ter soma unitária; em regime estacionário, a soma das vazões mássicas na entrada de um equipamento deve ser igual a soma das vazões mássicas na saída, etc.)

5. 3 - Dicas

Seguem abaixo um conjunto de dicas úteis (algumas absurdamente simples) que devem ser observadas para evitar pequenos erros que muitas vezes passam desapercebidos mas podem impedir que o programa seja executado no Matlab:

– Cuidado ao digitar números e constantes, lembre-se que no programa o separador decimal de um número é o ponto e não a vírgula. Por exemplo, uma aproximação para o número π deve ser digitada como 3.14 (e não 3,14);

– Cuidado com os detalhes da notação científica: por exemplo, 2.2e3 é equivalente a $2{,}2 \cdot 10^{3}$ e 0.3e-3 é equivalente a $0{,}3 \cdot 10^{-3}$ (não confundir esta notação com a função exponencial: *exp(x)*, ou seja, e^{x} onde $e = 2{,}718\ldots$) ;

– Não confundir no Matlab, a função que calcula o logaritmo de base natural: *log(x)* e o logaritmo de base dez: *log10(x)*;

– Após qualquer alteração ou correção em um programa, este deve ser novamente gravado para que as alterações sejam realmente efetuadas (o Matlab acessa o seu programa da memória do computador, e não, obviamente, da tela, por isto grave sempre);

– Não esqueça de gravar o arquivo que contém a listagem do programa necessariamente com a extensão ".m" (por exemplo, prog.m);

– Arquivos de função devem ser gravados necessariamente com o nome da função que estes representam.;

– Nunca esqueça de antes de executar um programa pela primeira vez ao acionar o Matlab, determinar o caminho em que este se encontra (por exemplo, *cd c:\temp*);

– Certas versões mais antigas do Matlab (até 4.2) não permitem nomes de programas com mais de oito letras;

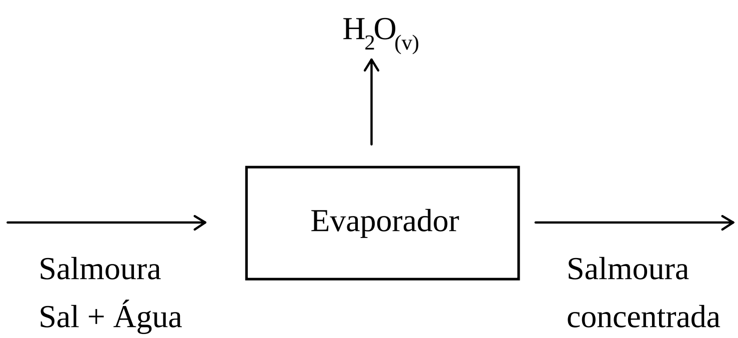
– Todos os comandos em Matlab devem ser digitados em letras minúsculas. Caso algum comando seja digitado com letras maiúsculas, o computador não reconhecerá o comando;

– Quando ocorre um erro durante a execução do programa, o Matlab informa na tela que erro ocorreu e onde este está localizado. A leitura atenta desta mensagem pode ser de grande ajuda na correção da listagem.

5. 4 - Lista de Exercícios

Exercício 1:

Uma unidade de evaporação está instalada para concentrar uma corrente de salmoura (H_2O + NaCl) 10 % em massa:



Esquema do evaporador

Tarefas:

Preparar um programa que calcule a vazão de água evaporada (kg/h) a partir do valor da vazão da corrente de entrada de salmoura. Este valor deverá ser digitado pelo usuário cada vez que o programa seja acionado.

Resolução:

Desenvolvimento da solução:

De acordo com o enunciado, devemos deduzir uma expressão que relacione a vazão de água evaporada com a vazão de entrada de salmoura no equipamento.

Inicialmente, devemos selecionar um balanço material adequado que envolva as principais variáveis do problema, de forma a buscar a relação desejada. Uma vez que o enunciado fornece informações sobre as concentrações das correntes, vamos tentar escrever a equação de balanço material em relação ao transporte de sal através do equipamento. Lembrando que o processo opera em regime estacionário (não há acúmulo) e não ocorrem reações químicas (não há geração ou consumo), tem-se:

$$E_{sal} - S_{sal} = 0 \tag{1}$$

onde E_{sal} corresponde à vazão de entrada de sal no equipamento e S_{sal} é a vazão de saída de sal do equipamento.

A entrada e saída de sal podem ser relacionadas à vazão total e à concentração nas correntes de salmoura, lembrando que a corrente de água evaporada não contém sal:

$$E_{sal} = F^{E}_{salmoura}\omega^{E}_{sal} \tag{2}$$

$$S_{sal} = F^{S}_{salmoura}\omega^{S}_{sal} \tag{3}$$

onde $F^{E}_{salmoura}$ e $F^{S}_{salmoura}$ são as vazões das correntes de entrada e saída de salmoura; e, ω^{E}_{sal} e ω^{S}_{sal} são as frações mássicas correspondentes.

Substituindo-se os termos acima na equação (1), obtém-se:

$$F^{E}_{salmoura}\omega^{E}_{sal} - F^{S}_{salmoura}\omega^{S}_{sal} = 0 \tag{4}$$

Todos os termos da equação acima são conhecidos ($\omega^{E}_{sal} = 0{,}10$, $\omega^{S}_{sal} = 0{,}30$ e $F^{E}_{salmoura}$ deve ser digitado pelo usuário), com exceção da vazão de salmoura na saída ($F^{S}_{salmoura}$). Ou seja, a partir da equação (4) é possível calcular a vazão de salmoura na saída:

$$F^{S}_{salmoura} = \frac{F^{E}_{salmoura}\omega^{E}_{sal}}{\omega^{S}_{sal}} \tag{5}$$

No entanto, o objetivo do problema é calcular a vazão de água evaporada. Mas, uma vez que a vazão de salmoura na saída já foi calculada, a vazão de água pode ser determinada por uma outra equação independente de balanço material. Neste caso, será utilizada a equação de balanço material global:

$$F_{salmoura}^{E} - F_{agua}^{S} - F_{salmoura}^{S} = 0 \tag{6}$$

Como a vazão de entrada de salmoura é digitada pelo usuário e a vazão de salmoura na saída foi calculada em (5), podemos calcular a resposta desejada pelo problema:

$$F_{agua}^{S} = F_{salmoura}^{E} - F_{salmoura}^{S} = F_{salmoura}^{E} - \frac{F_{salmoura}^{E}\omega_{sal}^{E}}{\omega_{sal}^{S}} \tag{7}$$

<u>Planejamento dos passos do programa</u>:

A partir da solução desenvolvida, podemos planejar o programa que executará a tarefa formulada pelo problema.

(1) Inicialmente, o programa deve receber do usuário o valor da vazão de entrada de salmoura. A entrada de dados do problema deve ser complementada pela definição dos valores das concentrações de sal nas correntes de entrada e saída.

(2) A vazão de água evaporada deve ser calculada utilizando-se a expressão deduzida para este fim (equação 7).

(3) Finalmente, o valor da vazão calculada é apresentado na tela.

<u>Preparação do programa</u>:

Vamos agora apresentar os comandos do programa planejado:

Antes de qualquer programa, sugere-se introduzir um comentário indicando a natureza do programa e um conjunto de comandos de inicialização que deve preparar o Matlab:

% Problema de mistura

```
% Inicialização
clc, clear all
```

A vazão de entrada de salmoura é introduzida através de um comando *input* e as concentrações definidas diretamente através de comandos de atribuição, uma vez que são parâmetros constantes do problema:

```
% Entrada de dados
Fe_salmoura=input('Digitar o valor da vazão de entrada de salmoura (kg/h)');
we_sal=0.10;
ws_sal=0.30;
```

O processamento do problema refere-se ao cálculo da equação (7):

```
% Processamento
Fs_agua=Fe_salmoura - Fe_salmoura * we_sal / ws_sal;
```

Encerrando o programa, o valor da vazão de água evaporada é apresentado na tela:

```
% Saída dos resultados
disp('Vazão de água evaporada (kg/h)')
Fs_agua
```

Exercício 2:

Em um tanque de armazenamento, inicialmente são adicionados 100 kg de uma mistura com a seguinte composição:

Componente	Fração mássica
Benzeno	0,25
Tolueno	0,25
Xileno	0,50
Total	1,00

Há disponível na planta industrial uma corrente com a seguinte composição, pronta para ser adicionada ao tanque de armazenamento:

Componente	Fração mássica
Benzeno	0,20
Tolueno	0,80
Xileno	0,00
Total	1,00

Tarefas:

Traçar as seguintes curvas: fração mássica de benzeno, fração mássica de tolueno e fração mássica de xileno no tanque em relação à massa de solvente adicionada através da corrente. As três curvas devem estar representadas no mesmo gráfico. Não esquecer do título do gráfico, das identificações dos eixos e da legenda.

<u>Resolução</u>:

<u>Desenvolvimento da solução</u>:

Para traçarmos o gráfico desejado no enunciado do problema, é necessário desenvolver uma expressão matemática que permita calcular as percentagens dos componentes no tanque, uma vez conhecida a massa de solvente adicionada.

Um balanço material em torno do tanque para o benzeno indica que:

$$E_{bz}^{1} + E_{bz}^{2} = Ac_{bz}^{final} \tag{1}$$

onde E_{bz}^{1} é a massa de benzeno que entrou inicialmente no tanque, E_{bz}^{2} é a massa de benzeno que entra com o solvente e Ac_{bz}^{final} é a massa de benzeno que se acumula no tanque.

A expressão da massa de benzeno que entra no tanque inicialmente pode ser calculada através da massa total inicial ($M_0 = 100$ kg) e da fração mássica de benzeno na mistura (ω_{bz}^{1}):

$$E_{bz}^{1} = M_0 \cdot \omega_{bz}^{1} \tag{2}$$

A massa de benzeno que entra através da corrente é calculada pela massa de solvente adicionada (MS) e pela fração mássica de benzeno correspondente (ω_{bz}^{2}):

$$E_{bz}^{2} = MS \cdot \omega_{bz}^{2} \tag{3}$$

O acúmulo de benzeno no tanque pode ser expresso através da massa total final no tanque e da fração mássica final de benzeno (ω_{bz}^{final}):

$$Ac_{bz}^{final} = M_f \cdot \omega_{bz}^{final} \tag{4}$$

Lembrando que a massa final total no tanque é igual à massa inicial mais a massa adicionada, temos:

$$M_f = M_0 + MS \tag{5}$$

Ou seja, voltando para a Equação (4):

$$Ac_{bz}^{final} = (M_0 + MS) \cdot \omega_{bz}^{final} \tag{6}$$

Finalmente, substituímos todos os termos presentes na Equação (1) pelas expressões desenvolvidas:

$$M_0 \cdot \omega_{bz}^{1} + MS \cdot \omega_{bz}^{2} = (M_0 + MS) \cdot \omega_{bz}^{final} \tag{7}$$

Isolando a fração de benzeno no final da operação, que é a variável que desejamos calcular, tem-se:

$$\omega_{bz}^{final} = \frac{M_0 \cdot \omega_{bz}^{1} + MS \cdot \omega_{bz}^{2}}{M_0 + MS} \tag{8}$$

Podemos repetir, os mesmos cálculos para os demais componentes:

$$\omega_{tol}^{final} = \frac{M_0 \cdot \omega_{tol}^1 + MS \cdot \omega_{tol}^2}{M_0 + MS} \qquad (9)$$

$$\omega_{xil}^{final} = \frac{M_0 \cdot \omega_{xil}^1 + MS \cdot \omega_{xil}^2}{M_0 + MS} \qquad (10)$$

Planejamento dos passos do programa:

A partir das equações desenvolvidas acima, podemos planejar o programa que executará a tarefa do problema.

(1) Inicialmente, o programa deve conter os parâmetros constantes do problema: massa da mistura inicial no tanque e os valores das percentagens mássicas na mistura e na corrente, não sendo necessário o usuário digitar estas grandezas.

(2) Um vetor de valores de massa adicionada deve ser definido para a construção do gráfico, estes valores corresponderão à abscissa do gráfico.

(3) A partir do vetor de valores de massa adicionada, o programa deve calcular as percentagens mássicas para cada um destes pontos que farão parte da ordenada do gráfico.

(4) Finalmente, de posse de todos os valores, o programa deve traçar os gráficos desejados.

Preparação do programa:

Vamos agora apresentar cada parte do programa, executando todas as etapas planejadas anteriormente.

Inicialmente, introduz-se um comentário indicando a natureza do programa e, logo após, a Seção de inicialização:

```
% Problema de mistura

% Inicialização
clc, clear all
```

Os dados de entrada são introduzidos através do conjunto de comandos apresentados a seguir (note que as frações mássicas de cada um dos componentes são representadas na forma de um vetor, 1 - benzeno, 2 - tolueno, 3 - xileno):

```
% Entrada de dados
M0=100;                          % Massa da mistura inicial
wci=[ 0,25 ; 0,25 ; 0,50 ];      % Composição da mistura inicial
wce=[ 0,20 ; 0,80 ; 0 ];         % Composição da corrente de entrada
```

Definição do vetor de valores para a massa adicionada no tanque:

```
% Processamento
MS=0:500;
```

Os comandos abaixo calculam os valores das frações mássicas correspondentes (observe a utilização da operação elemento a elemento):

```
wb=(M0*wci(1)+MS*wce(1))./(MS+M0);   % Fração de benzeno
wt=(M0*wci(2)+MS*wce(2))./(MS+M0);   % Fração de tolueno
wx=(M0*wci(3)+MS*wce(3))./(MS+M0);   % Fração de xileno
```

O objetivo do programa, isto é, a apresentação dos gráficos, é realizado através dos comandos finais que se seguem (note a presença do título e das identificações dos eixos no gráfico):

```
% Saída dos resultados
plot(MS,wb,MS,wt,MS,wx)
title('Mistura no tanque')
xlabel('Massa adicionada (kg)') , ylabel(Fração mássica')
legend('Fração de benzeno','Fração de tolueno','Fração de xileno')
```

Exercício 3:

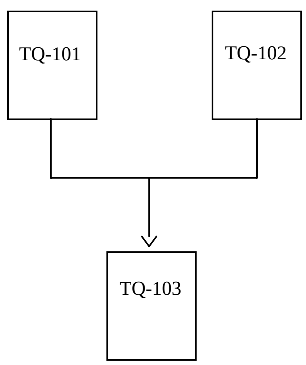
Complemente o programa anterior de forma que este apresente em uma janela um gráfico das frações mássicas em relação à massa adicionada e em outra janela um gráfico das frações molares em relação à massa adicionada.

Exercício 4:

O dióxido de titânio (TiO_2) é um pigmento branco muito utilizado na indústria de tintas. Em uma planta há dois tanques contendo dióxido de titânio misturado com resina. Estes tanques possuem diferentes concentrações de pigmento:

Identificação do tanque	TQ-101	TQ-102
Concentração (% peso/peso)	15	5

Uma certa quantidade das misturas contidas em cada um destes tanques, será adicionada em um terceiro tanque (TQ-103) para a produção de tintas:



Tarefas:

Para auxiliar o departamento de produção deve ser preparado um gráfico que relacione a concentração de pigmento (% p/p) no tanque TQ-103 com a razão entre a quantidade de massa adicionada proveniente do tanque TQ-101 e a quantidade de massa adicionada proveniente do tanque TQ-102. Traçar o gráfico entre as razões 0 e 10.

Exercício 5:

Em um laboratório de pesquisa deseja-se estudar a possível produção do éster acetato de n-amila (responsável pelo odor de banana) através da reação entre ácido acético e álcool pentílico:

$$CH_3COOH + CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2OH \rightarrow CH_3COOCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3 + H_2O$$

Tarefas:

Desenvolver um programa que receba do usuário as seguintes informações: quantidade de ácido acético introduzida no reator (g), quantidade de álcool pentílico introduzida no reator (g) e a conversão do processo (%). A partir das informações fornecidas, o programa deve indicar se há reagente em excesso e, se houver, identificar a espécie em excesso. O programa deve informar também a massa de éster produzida (g).

Resolução:

Desenvolvimento da solução:

A solução do problema envolve dois objetivos: a identificação do reagente em excesso e a determinação da quantidade de éster produzida.

A identificação do reagente em excesso depende do número de moles de cada reagente presente no sistema e dos coeficientes estequiométricos da reação. Os números de moles de cada reagente (n) podem ser facilmente calculados através das massas dos componentes (m) e dos seus respectivos pesos moleculares (PM):

$$n_{acido} = \frac{m_{acido}}{PM_{acido}} \tag{1}$$

$$n_{alcool} = \frac{m_{alcool}}{PM_{alcool}} \tag{2}$$

Uma vez conhecidos os números de moles, temos três situações possíveis: não há reagente em excesso, há excesso de ácido ou há excesso de álcool.

Se não houver reagente em excesso, então a seguinte igualdade deve ser verdadeira (c é o coeficiente estequiométrico do componente na reação):

$$\frac{n_{acido}}{c_{acido}} = \frac{n_{alcool}}{c_{alcool}} \tag{3}$$

Em uma reação onde todos os reagentes são consumidos, a relação entre os números de moles produzidos acompanha a relação entre os coeficientes estequiométricos, desta forma, tomando-se o ácido como base, por exemplo:

$$\frac{n_{acido}}{c_{acido}} = \frac{n_{ester}}{c_{ester}} \tag{4}$$

Resolvendo-se a equação em relação ao número de moles de éster:

$$n_{ester} = \frac{c_{ester}}{c_{acido}} n_{acido} \tag{5}$$

Mas devemos lembrar que o enunciado indica que a reação não é completa, ou seja, devemos levar em conta a conversão (X):

$$n_{ester} = \frac{c_{ester}}{c_{acido}} n_{acido} \left(\frac{X}{100} \right) \tag{6}$$

Em outro caso, se houver excesso de ácido, então tem-se:

$$\frac{n_{acido}}{c_{acido}} > \frac{n_{alcool}}{c_{alcool}} \qquad (4)$$

Para calcular a quantidade de éster produzida, pode-se empregar o mesmo procedimento apresentado no caso sem excesso, mas deve-se lembrar, é claro, de aplicá-lo necessariamente envolvendo o reagente limitante, isto é, o álcool:

$$n_{ester} = \frac{c_{ester}}{c_{alcool}} n_{alcool} \left(\frac{X}{100} \right) \qquad (6)$$

Finalmente, no caso de excesso de álcool:

$$\frac{n_{acido}}{c_{acido}} < \frac{n_{alcool}}{c_{alcool}} \tag{7}$$

A quantidade de éster produzida é:

$$n_{ester} = \frac{c_{ester}}{c_{acido}} n_{acido} \left(\frac{X}{100} \right) \tag{8}$$

Uma vez que devemos sempre estar atentos ao enunciado do problema, verificamos que este deseja, na verdade, a massa de éster. Como o número de moles já foi calculado, a massa de éster é obtida diretamente:

$$m_{ester} = n_{ester} PM_{ester} \tag{9}$$

<u>Planejamento dos passos do programa</u>:

Com o processo de cálculo já determinado, é possível apresentar uma seqüência de passos para o programa:

(1) Inicialmente, devem ser definidos um conjunto de comandos que permitam ao usuário digitar as massas de ácido e álcool no reator, assim como a conversão da reação. Complementando os dados de entrada, devem ser definidos os pesos moleculares das substâncias envolvidas e os coeficientes estequiométricos da reação.

(2) Através das massas e dos pesos moleculares devem ser determinados o número de moles de cada reagente.

(3) Neste etapa, o programa deve definir um caminho de acordo com as três situações possíveis em relação às massas adicionadas: sem excesso, com excesso de ácido ou com excesso de álcool.

(4) Selecionado o caminho, o programa deve calcular a massa de produto formado.

(5) Finalmente, o programa deve apresentar na tela os resultados.

<u>Preparação do programa</u>:

Seguem abaixo a listagem comentada do programa, de acordo com o planejamento proposto:

Primeiro, tem-se a inclusão do comentário com o título e da seção de inicialização:

% Análise da estequiometria do processo de esterificação

% Inicialização
clc , clear all

A seção de entrada de dados permite ao usuário definir as massas e a conversão:

```
% Entrada de dados
mAc=input('Digite a massa de ácido (g)');
mAl=input('Digite a massa de álcool (g)');
conv=input('Digite a conversão da reação (%)');
```

Os dados de entrada são complementados com os pesos moleculares e os coeficientes estequiométricos:

```
pmAc=60; , pmAl=88; , pmEs=130          % Pesos moleculares
cAc=1; , cAl=1; , cEs=1;                % Coeficientes estquiométricos
```

Os números de moles dos reagentes são calculados por:

```
% Processamento
nAc=mAc/pmAc; , nAl=mAl/pmAl;           % Cálculo dos números de moles
```

Com os números de moles conhecidos, são utilizados um conjunto de comandos condicionais (*if-else-end*) para determinar qual cálculo deverá ser feito em função da relação entre as quantidades de cada reagente adicionado (sem excesso, excesso de ácido ou excesso de álcool):

```
if (nAc/cAc)==(nAl/cAl)
   disp('Não há excesso')               % Mensagem indicando sem excesso
   nEs=(cEs/cAc)*nAc*(X/100);           % Cálculo do número de moles do éster
else
    if (nAc/cAc)>(nAl/cAl)
       disp('Excesso de ácido')         % Mensagem indicando excesso de ácido
       nEs=(cEs/cAl)*nAl*(X/100);       % Cálculo do número de moles do éster
    else
       disp('Excesso de álcool')        % Mensagem indicando excesso de álcool
```

```
        nEs=(cEs/cAc)*nAc*(X/100);   % Cálculo do número de moles do éster
      end
end
mEs=nEs*pmEs;                        % Cálculo final da massa de éster
```

O programa se encerra com a apresentação dos resultados:

```
% Saída dos resultados
disp('Massa de éster produzida (g)') , mEs
```

Exercício 6:

Completar o programa acima de forma que seja apresentado na tela a composição final da massa reacional através das frações mássicas de cada componente.

Exercício 7:

O óxido de etileno é um importante intermediário utilizado na indústria de processos químicos (participa da produção de fluidos anti-congelantes, fibras e filmes de poliéster, etc.).

Em um laboratório de pesquisas, está sendo estudada a obtenção direta de óxido de etileno à partir de etileno e oxigênio:

$$2\ CH_2{=}CH_2 + O_2 \rightarrow 2\ \underset{\ }{CH_2{-}CH_2}\ (\overset{O}{\frown})$$

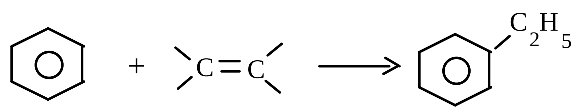
Tarefas:

Desenvolver um programa onde o usuário indique a massa de etileno e oxigênio (g) presente inicialmente no reator e a conversão do processo; a partir destes dados, o programa deve fornecer as percentagens mássicas e molares dos componentes antes e depois da reação.

Exercício 8:

A indústria de pneus utiliza como matéria-prima a borracha sintética (SBR). Este polímero é produzido a partir da reação de polimerização entre butadieno e estireno. O estireno é obtido a partir do etil-benzeno.

Em uma pequena planta piloto operando em batelada para a produção de etil-benzeno, é realizada a seguinte reação, desenvolvida com excesso de etileno:



Tarefas:

Criar um programa para auxiliar o desenvolvimento do processo. O programa deve receber a massa de benzeno em cada batelada (kg), o excesso desejado para o etileno (%) e a conversão prevista para o processo (%). A partir dos dados fornecidos, o programa deve calcular a massa de etileno para a preparação da batelada (kg) e a massa de etil-benzeno produzida (kg).

Exercício 9:

A determinação da solução de uma equação algébrica é um problema muito comum nos cálculos de engenharia. Muitas vezes a solução pode ser obtida através de técnicas simples de manipulação matemática, no entanto, em certas equações, este procedimento não pode ser aplicado, ou seja, não é possível "isolar" a incógnita do problema.

Para resolver este problema, foram desenvolvidos métodos numéricos que permitem determinar a raiz de uma equação a partir de um algoritmo adequado. O Método da Bisseção é um dos representantes mais simples desta classe de métodos. Este método se baseia na definição inicial de um intervalo de busca da raiz e, à medida que o método se desenvolve, este intervalo é seqüencialmente reduzido até atingir a tolerância desejada.

Descrição do Método da Bisseção:

O problema original é determinar a solução da equação, isto é, determinar x_0 para

$$f(x_0) = 0 \tag{1}$$

O Método da Bisseção se inicia com a determinação de um intervalo [*a*,*b*] onde a raiz desejada esteja situada. Para que o método funcione adequadamente, deve existir apenas uma raiz no intervalo [*a*,*b*] e a função *f*(*x*) deve ser contínua no intervalo.

Sejam *xi* e *xs* respectivamente o limite inferior e superior do intervalo de busca inicial. Então:

$$xi \leftarrow a \tag{2}$$

$$xs \leftarrow b \tag{3}$$

O primeiro passo do algoritmo é determinar o ponto médio do intervalo de busca [*xi*,*xs*] :

$$xm = \frac{xi + xs}{2} \tag{4}$$

São formados então dois intervalos [*xi*,*xm*] e [*xm*,*xs*]. No próximo passo deve-se comparar os sinais dos valores da função nos extremos destes intervalos. Esta comparação permitirá indicar em qual dos intervalos está a raiz desejada.

Em função do resultado desta comparação, o algoritmo pode seguir duas alternativas possíveis:

Alternativa 1:

f(*xi*) e f(*xm*) possuem o mesmo sinal e *f*(*xm*) e *f*(*xs*) possuem sinais contrários.

Isto significa que a raiz está no intervalo [*xm*,*xs*]. O intervalo de busca é então estreitado da seguinte forma,

$$xi \leftarrow xm \tag{5}$$

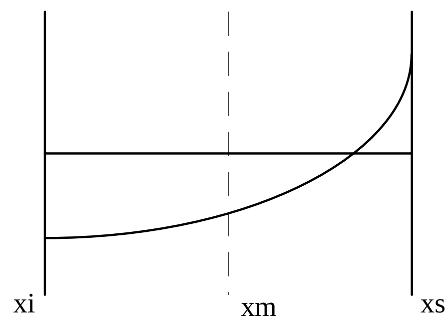
Alternativa 2:

f(*xi*) e *f*(*xm*) possuem sinais contrários e *f*(*xm*) e *f*(*xs*) possuem o mesmo sinal.

Isto significa que a raiz está no intervalo [*xi*,*xm*]. O intervalo de busca é então estreitado da seguinte forma,

$$xs \leftarrow xm \tag{6}$$

A motivação dos procedimentos associados às duas alternativas pode ser melhor compreendida através da visualização do gráfico da próxima figura:



Procedimento de eliminação de intervalo

Observando o gráfico, torna-se óbvio que a raiz está no intervalo [*xm*,*xs*]. Neste intervalo, a função corta o eixo $y = 0$, ou seja, neste intervalo a função muda de sinal e, conseqüentemente, $f(xm)$ e $f(xs)$ apresentam sinais contrários. O procedimento deve então seguir a alternativa 1, com a eliminação do intervalo [*xi*,*xm*], onde já se sabe, a raiz não está presente.

Após a eliminação do intervalo, segundo a alternativa 1 ou 2, o algoritmo deve recalcular o ponto médio e repetir a seqüência de procedimentos. É importante notar que à medida que o processo avança, o intervalo de busca vai se fechando em torno da raiz. Quando este intervalo torna-se menor que a tolerância desejada, o processo é interrompido e a solução é o ponto médio do último intervalo.

Observação: É claro que se durante o algoritmo $f(xm) = 0$, o procedimento é imediatamente interrompido pois a raiz é o próprio valor de *xm*.

Tarefas:

a) Criar uma rotina computacional para a aplicação do método.

b) Um trocador de calor é um equipamento destinado a permitir a transferência de calor entre dois fluidos. Em um determinado modelo de trocador de calor, água deve ser aquecida utilizando-se para isto uma corrente de óleo. A equação abaixo relaciona a carga térmica (taxa de transferência de calor entre os fluidos) com as temperaturas de entrada e saída do óleo e da água no equipamento:

$$Q - UA\,\frac{(Toleo_1 - Tagua_1) - (Toleo_2 - Tagua_2)}{\ln\left(\dfrac{Toleo_1 - Tagua_1}{Toleo_2 - Tagua_2}\right)} = 0$$

onde

Q - Carga térmica do trocador, 160.10^3 W

U - Coeficiente global de transferência de calor, 320 W/m^2K

A - Área do trocador de calor, 16 m^2

$Toleo_1$ - Temperatura de entrada do óleo no trocador, 110 °C

$Toleo_2$ - Temperatura de saída do óleo no trocador, 80 °C

$Tagua_1$ - Temperatura de entrada da água no trocador, 35 °C

$Tagua_2$ - Temperatura de saída da água no trocador

Determinar a temperatura de saída da água do equipamento ($Tagua_2$), utilizando como região de busca inicial o intervalo 35,1 °C até 79,9 °C e tolerância de 0,1 °C.

<u>Resolução</u>:

<u>Desenvolvimento da solução</u>:

O desenvolvimento da solução, representado pelo conjunto de cálculos que deve ser feito etapa por etapa, já está descrito no próprio enunciado da solução, isto é, a própria descrição do Método da Bisseção

<u>Planejamento dos passos do programa</u>:

De acordo com o procedimento apresentado na solução, teremos:

(1) Definir inicialmente o intervalo inicial [*a*,*b*] onde será buscada a solução e a tolerância para interrupção do processo *tol*.

(2) Fazer *xi* igual a *a* e *xs* igual a *b* e calcular o valor numérico da equação nos pontos de *xi* e *xs*.

(3) Iniciar um laço (*loop*) que só será interrompido quando $(xs\text{-}xi) \leq tol$.

(4) Calcular o ponto médio do intervalo $xm=(xi+xs)/2$ e o valor numérico da equação neste ponto.

(5) Verificar qual intervalo deve ser eliminado:

Se *f(xi)* e *f(xm)* possuem sinais contrários e *f(xm)* e *f(xs)* possuem sinais iguais então fazer *xs* igual a *xm* e calcular o novo valor numérico da equação em *xs*.

Se *f(xi)* e *f(xm)* possuem sinais iguais e *f(xm)* e *f(xs)* possuem sinais contrários então fazer *xi* igual a *xm* e calcular o novo valor numérico da equação em *xi*.

(6) Fim do laço.

(7) Calcular o ponto médio do último intervalo.

(8) Apresentar a solução.

<u>Preparação do programa</u>:

O programa será formado por dois arquivos, um arquivo de função que calcula o valor numérico da equação e outro arquivo que conterá o programa propriamente dito. O arquivo de programa vai utilizar o arquivo de função como uma “ferramenta”. O programa pode ser utilizado para resolver qualquer equação desde que seja representada no arquivo de função. Neste caso em particular, vamos aplicá-lo para o problema de transferência de calor proposto.

Arquivo de função:

```
function f=funcao(x)

Q=160e3;
U=320;
```

```
A=16;
Toleo1=110;
Toleo2=80;
Tagua1=35;
f=Q-U*A*((Toleo1-Tagua1)-(Toleo2-x))/log((Toleo1-Tagua1)/(Toleo2-x));
```

Arquivo de programa:

Inicialização do programa

```
% Resolução de equações através do Método da Bisseção

% Inicialização
clc , clear all
```

Determinação dos parâmetros do método:

```
% Intervalo de busca e tolerância
a=35.1; , b=79.9; , tol=.1;
```

Preparação do intervalo inicial:

```
% Algoritmo
xi=a; , xs=b; , fxi=funcao(xi); , fxs=funcao(xs);
```

Início do laço:

```
while (xs-xi)>tol
```

Cálculo do ponto médio e do valor da equação:

```
xm=(xs+xi)/2;
fxm=funcao(xm);
```

Eliminação de uma das metades do intervalo de busca:

```
if fxi*fxm<0
  xs=xm; , fxs=funcao(xs);
else
  xi=xm; , fxi=funcao(xi);
end
```

Linha de programa para interromper o laço caso o ponto médio calculado eseteja exatamente por sobre a raiz (no entanto, tal fato é computacionalmente pouco provável):

```
if fxm==0 , xs=xi; , end
```

Fim do laço:

```
end
```

Cálculo do ponto médio do último intervalo:

```
xm=(xs+xi)/2;
```

Apresentação dos resultados:

```
% Saída dos resultados
disp('Raiz') , xm
```

Exercício 10:

Nos cálculos de engenharia, muitas vezes é necessário obter a solução de uma equação algébrica. No entanto, nem sempre é possível estabelecer a solução da equação através de técnicas de manipulação algébrica, ou seja, a incógnita da equação, às vezes, não pode ser isolada. Tente, por exemplo, obter o valor da variável x na equação abaixo:

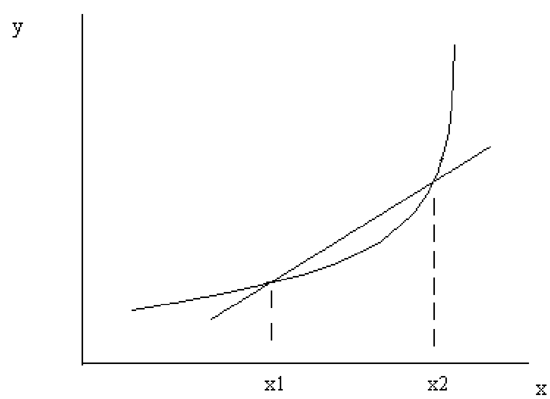
$$x + \ln(x) = 0 \tag{1}$$

Nestes casos, são utilizados métodos numéricos que possibilitam determinar a raiz da equação, dentro de uma tolerância pré-estabelecida. Para esta tarefa, são disponíveis vários métodos na literatura: Método da Bisseção, Newton-Raphson, "Regula-Falsi", etc.

Método da Secante

O Método da Secante determina a solução da equação através de um conjunto de aproximações lineares secantes à curva da equação.

Uma reta secante a uma curva pode servir como aproximação a esta curva, ou seja, a reta descreve aproximadamente o comportamento da curva. A figura abaixo apresenta uma curva genérica e uma reta secante nos pontos x_1 e x_2;



Curva e reta secante

Seja $y = f(x)$ a função que descreve a curva, então a expressão da reta secante para os pontos x_1 e x_2 é:

$$y_{ap} = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x - x_1) \tag{2}$$

A raiz de y é desconhecida, mas a raiz da aproximação linear via reta secante pode ser obtida diretamente, ou seja, podemos resolver a aproximação (2) em relação a variável x:

$$y_{ap} = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x - x_1) = 0 \tag{3}$$

$$x_{ap} = x_1 - \frac{f(x_1)}{\left[\dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}\right]} \tag{4}$$

Se a reta secante (y_{ap}) aproxima a curva (y), logo a raiz da aproximação secante (x_{ap}) é uma aproximação da raiz da equação original. Repetindo-se o processo, agora utilizando x_{ap} e x_2 como pontos para a geração da reta secante (ou seja, eliminando x_1), a tendência é uma aproximação ainda melhor da raiz da solução de $f(x)$. Finalmente, repetindo-se este processo sucessivamente, sempre utilizando os dois pontos mais recentes obtidos para a determinação da secante, pode-se esperar que o método alcance a solução da equação $f(x) = 0$.

Este procedimento de resoluções sucessivas das aproximações lineares propostas constitui o Método da Secante para resolução de equações de uma variável.

Observações:

- Para que o algoritmo se inicie é necessário dois pontos iniciais (x_1 e x_2) . Estes pontos constituem as *estimativas iniciais* e, em geral, quanto mais próximas da raiz, mais rápido o algoritmo atingirá a solução.

- O algoritmo determina a raiz da equação $f(x) = 0$ através de aproximações sucessivas, de maneira que cada vez mais o ponto x_{ap} se aproxima da raiz desejada. Cada aproximação realizada é denominada *iteração*. Na verdade para que o algoritmo atinja <u>exatamente</u> a solução, seriam necessárias infinitas iterações. No entanto, é possível obter-se um valor numérico tão próximo da raiz quanto for necessário. Por exemplo, pode-se determinar que o método se desenvolva até que que $\left|f(xap)\right| < 10^{-4}$, note que neste caso $f(x_{ap})$ não será igual a zero, mas estará muito próximo, o que para as finalidades dos cálculos de engenharia torna-se aceitável. Este critério que indica quando as iterações sucessivas devem ser interrompidas é chamado *critério de parada*.

Tarefas:

a) Implementar o Método da Secante na forma de um programa no Matlab;

b) O transporte de fluidos através de tubulações é uma atividade fundamental na indústria de processos químicos. A equação que descreve o escoamento de um fluido através de um trecho de tubulação pode ser representada pela seguinte expressão:

$$P_1 - P_2 - 10^{-5}\, fKq^2 - 10^{-5}\rho g(z_2 - z_1) = 0 \qquad \text{onde} \qquad K = \frac{8\rho L}{\pi^2 D^5}$$

O fator de atrito de Darcy, presente na equação acima, é representado pela seguinte expressão:

$$f = 8\left[\left(\frac{8}{\mathrm{Re}}\right)^{12} + \frac{1}{(A+B)^{3/2}}\right]^{1/12}$$

onde

$$A = \left[2{,}457 \ln \frac{1}{\left(\frac{7}{\mathrm{Re}}\right)^{0{,}9} + 0{,}27\left(\frac{\varepsilon}{D}\right)}\right]^{16} \qquad \text{e} \qquad B = \left(\frac{37530}{\mathrm{Re}}\right)^{16}$$

O número de Reynolds é um grupo adimensional que pode ser descrito como:

$$\mathrm{Re} = \frac{4\rho q}{\pi \mu D}$$

A partir da equação apresentada, deseja-se analisar o escoamento de uma corrente de água entre dois pontos de uma planta industrial. Os dados do problema são:

- Pressões no início e no fim do trecho de tubulação: $P_1 = 5$ bar e $P_2 = 3{,}63$ bar;
- Elevações no início e no fim do trecho de tubulação: $z_1 = z_2 = 0$ m
- Densidade e viscosidade da água: $\rho = 1000$ kg/m^3 e $\mu = 0{,}001$ Ns/m^2;

- Diâmetro e comprimento da tubulação: $D = 0{,}10$ m e $L = 10$ m;
- Rugosidade absoluta do trecho de tubulação: $\varepsilon = 46 \cdot 10^{-6}$ m;
- Aceleração da gravidade: $g = 9{,}81$ m/s^2.

Determinar a vazão volumétrica de água (q, em m^3/s) que atravessa o trecho de tubulação considerado. Ou seja, resolver a equação de escoamento em relação a q. Utilizar uma tolerância de 10^{-4} e pontos da estimativa inicial 0,7 m^3/s e 0,8 m^3/s;