PQI - 5783 – ANÁLISE DE PROCESSOS DA INDÚSTRIA QUÍMICA

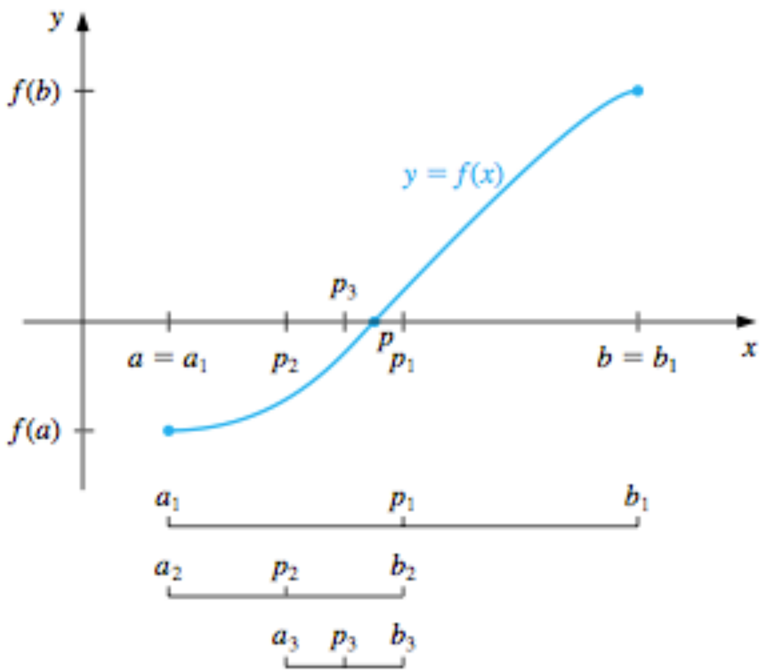
Aula Va – Sistemas de Equações Algébricas

Sistemas de Equações Algébricas não lineares

- Introdução
- Uma equação e uma única variável
  - Bissecção
  - Newton
  - Secante
- Sistemas Multivariáveis
  - Newton-Raphson
  - Pseudo-Newton
  - Broyden
  - Newton Modificado
- Matlab

Sistemas de Equações Algébricas não lineares

- Introdução
- **Uma equação e uma única variável**
  - **Bissecção**
  - Newton
  - Secante
- Sistemas Multivariáveis
  - Newton-Raphson
  - Pseudo-Newton
  - Broyden
  - Newton Modificado
- Matlab


y
f(b)
y = f(x)
p3
p
a = a1
p2
p1
b = b1
x
f(a)
a1
p1
b1
a2
p2
b2
a3
p3
b3

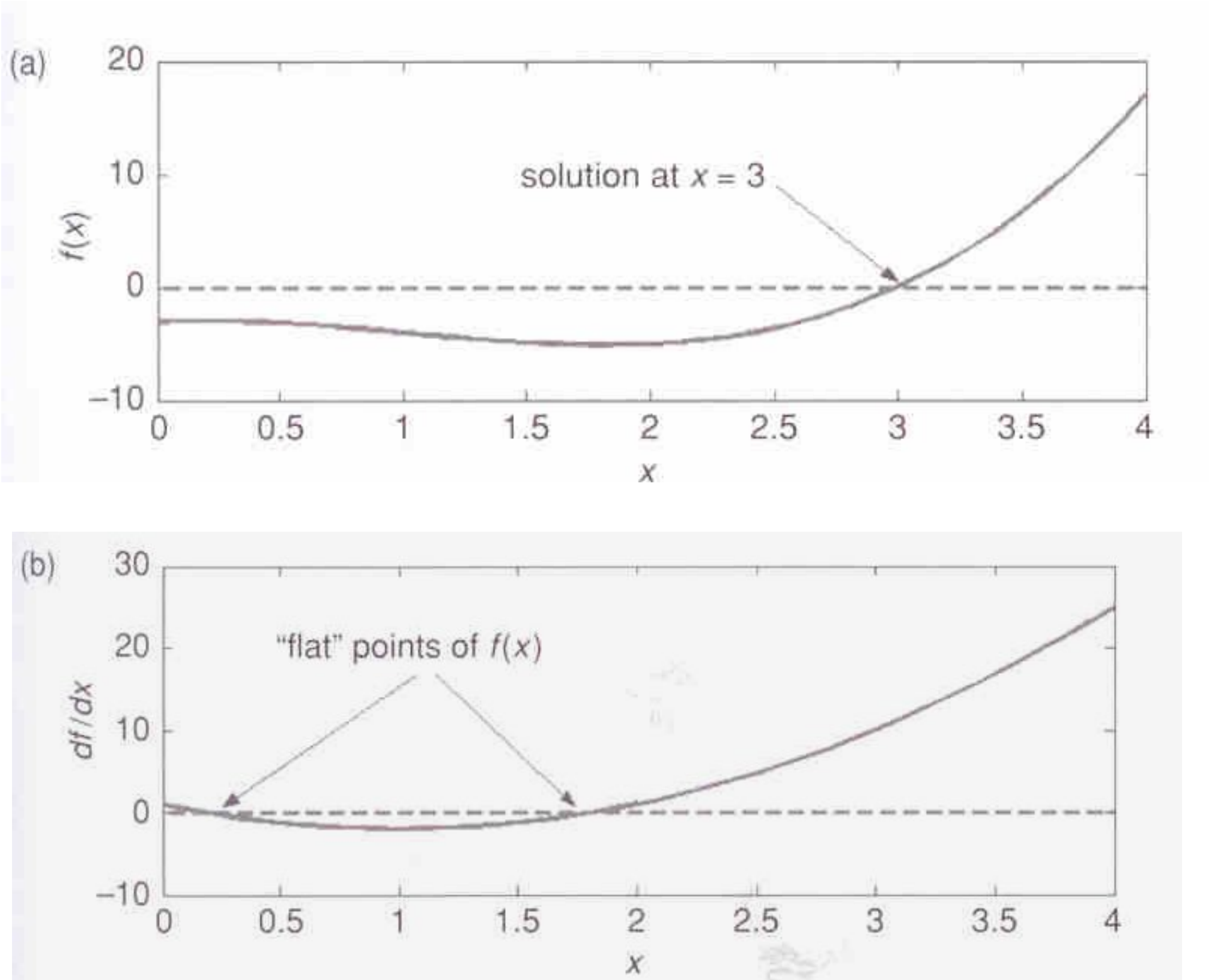
Sistemas de Equações Algébricas não lineares

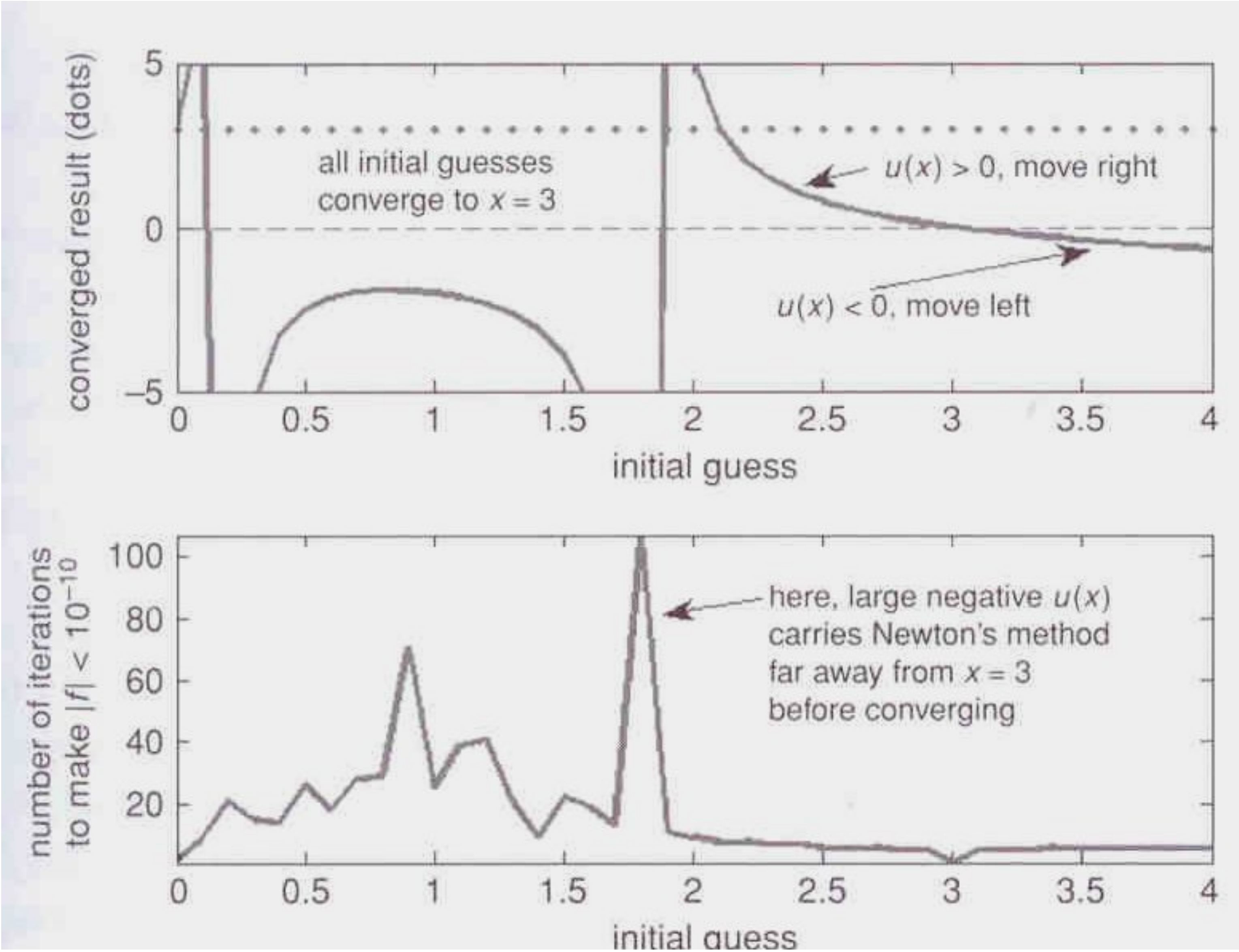
- Introdução
- **Uma equação e uma única variável**
  - Bissecção
  - **Newton**
  - Secante
- Sistemas Multivariáveis
  - Newton-Raphson
  - Pseudo-Newton
  - Broyden
  - Newton Modificado
- Matlab

$$p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)}{f'(p_n)}.$$

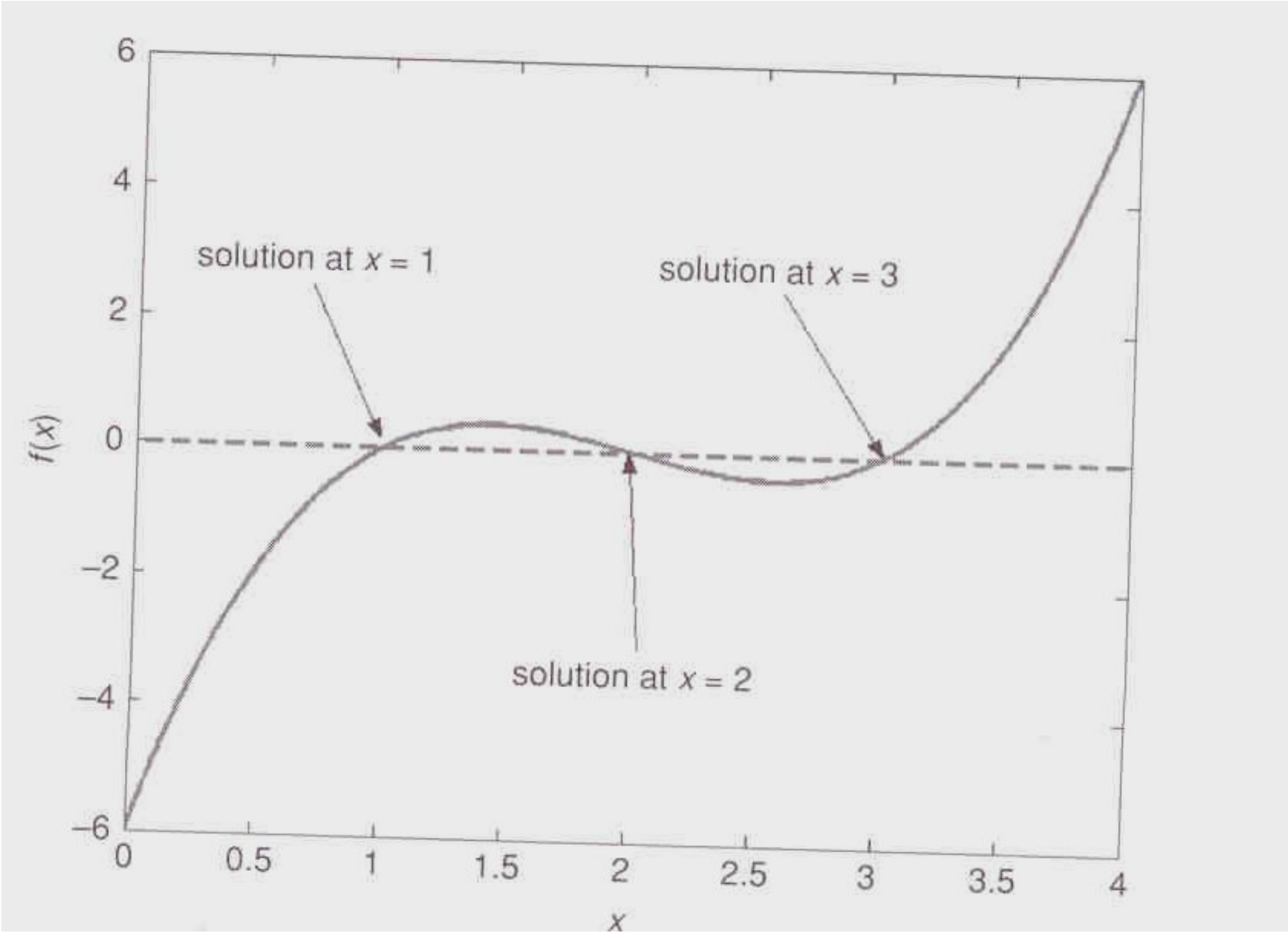
Table 2.1 Performance of Newton's method for $f(x) = (x-3)(x-i)(x+i)$

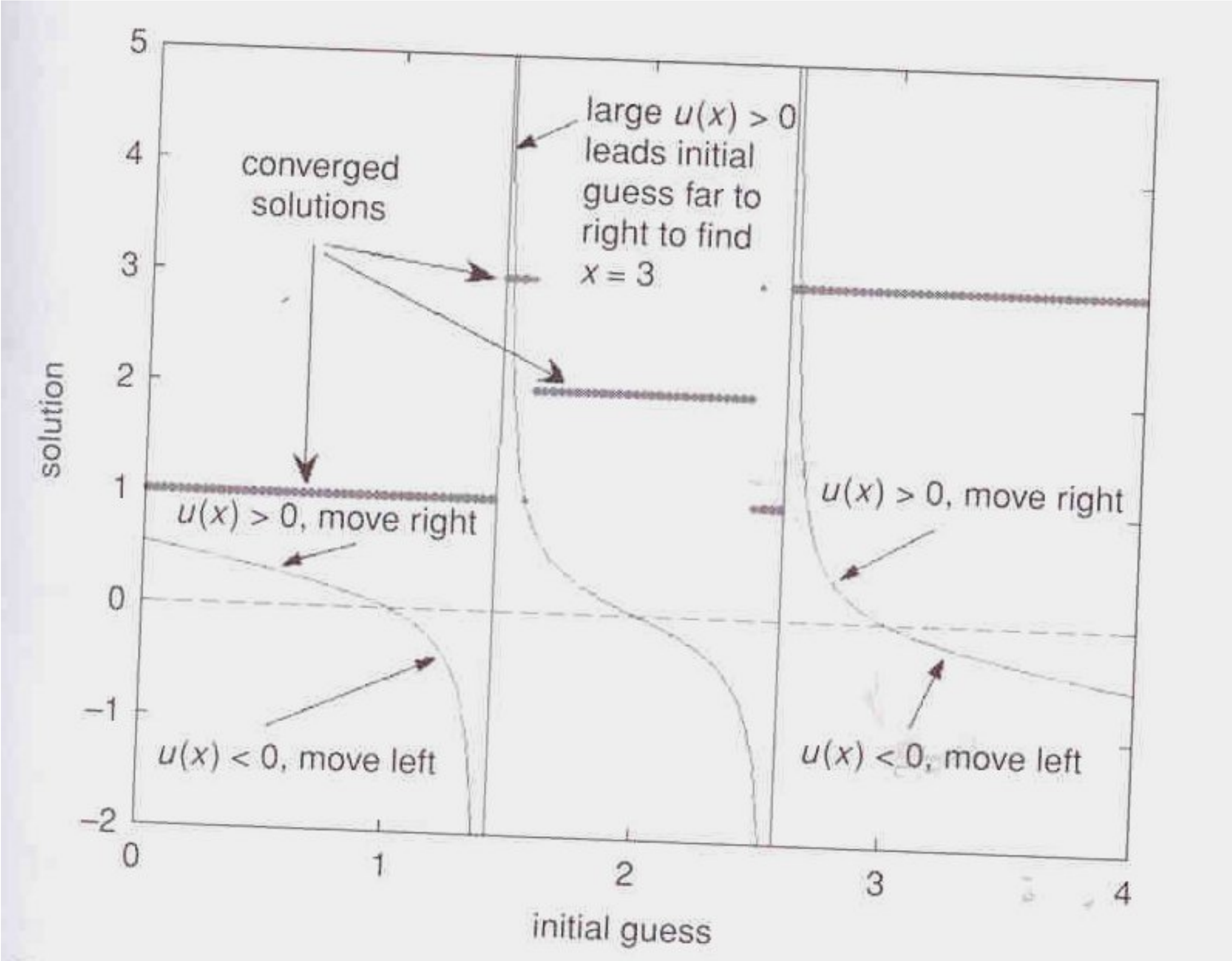
$x^{[0]}$	1	2	4	10
$x^{[1]}$	-1	7	3.3200	7.0064
$x^{[2]}$	-0.2	5.1132	3.0013	5.1558
$x^{[3]}$	1.2345	3.9367	3.0000	3.9621
$x^{[4]}$	-1.1938	3.2894	3.0000	3.3016
$x^{[5]}$	-0.3761	3.0401	3	3.0432
$x^{[6]}$	0.6707	3.0009		3.0011
$x^{[7]}$	-1.3458	3.0000		3.0000
$x^{[8]}$	-0.5037	3.0000		3.0000
$x^{[9]}$	0.4146	3.0000		3.0000
$x^{[10]}$	-2.7029	3		3


(a)
solution at x = 3
f(x)
x
(b)
"flat" points of f(x)
df/dx
x



converged result (dots)
all initial guesses
converge to $x = 3$
$u(x) > 0$, move right
$u(x) < 0$, move left
initial guess
number of iterations
to make $|f| < 10^{-10}$
here, large negative $u(x)$
carries Newton's method
far away from $x = 3$
before converging
initial guess

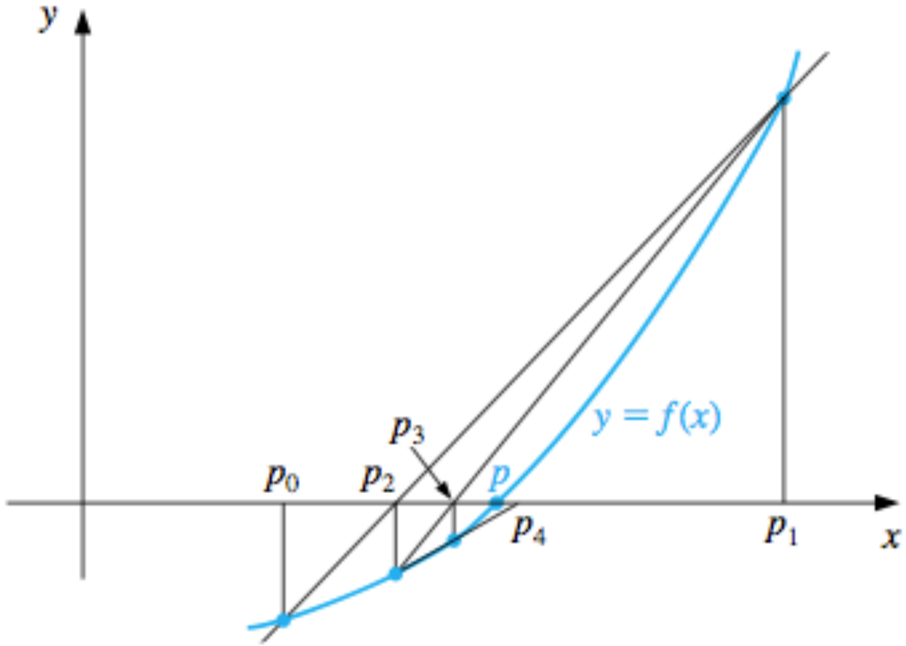

6
4
2
0
−2
−4
−6
f(x)
solution at x = 1
solution at x = 3
solution at x = 2
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
x



5
4
3
2
1
0
−1
−2
0
1
2
3
4
solution
initial guess
converged
solutions
large $u(x) > 0$
leads initial
guess far to
right to find
$x = 3$
$u(x) > 0$, move right
$u(x) < 0$, move left
$u(x) > 0$, move right
$u(x) < 0$, move left

Sistemas de Equações Algébricas não lineares

- Introdução
- **Uma equação e uma única variável**
  - Bissecção
  - Newton
  - **Secante**
- Sistemas Multivariáveis
  - Newton-Raphson
  - Pseudo-Newton
  - Broyden
  - Newton Modificado
- Matlab



y
x
p_0
p_2
p_3
p
p_4
p_1
$y = f(x)$

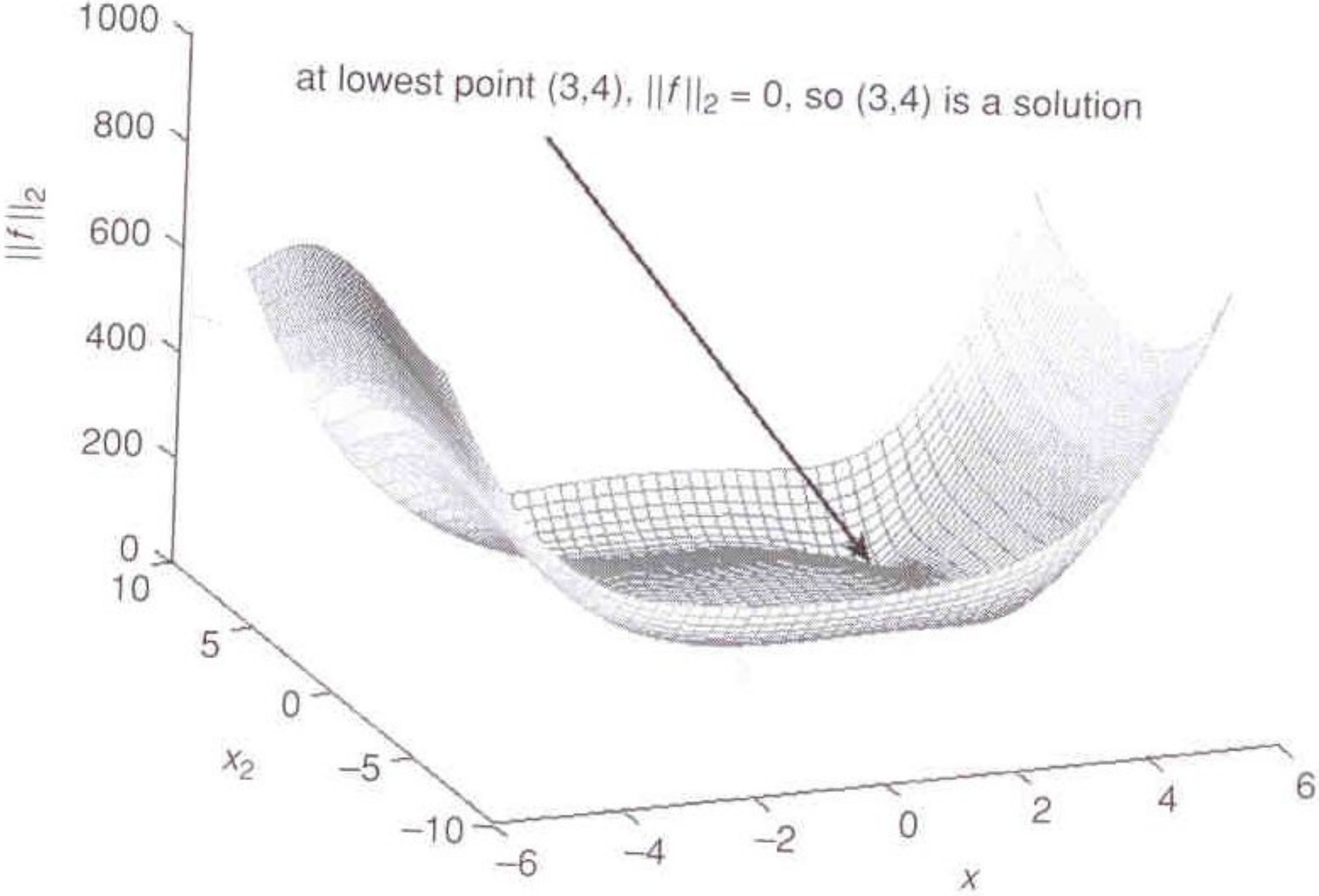
Sistemas de Equações Algébricas não lineares

- Introdução
- Uma equação e uma única variável
  - Bissecção
  - Newton
  - Secante
- **Sistemas Multivariáveis**
  - **Newton-Raphson**
  - Pseudo-Newton
  - Broyden
  - Newton Modificado
- Matlab

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0},$$

$$J(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{p}^{(k-1)} - [J(\mathbf{p}^{(k-1)})]^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{p}^{(k-1)})$$



at lowest point (3,4), $||f||_2 = 0$, so (3,4) is a solution
$||f||_2$
1000
800
600
400
200
0
10
5
0
x_2
−5
−10
−6
−4
−2
0
2
4
6
x

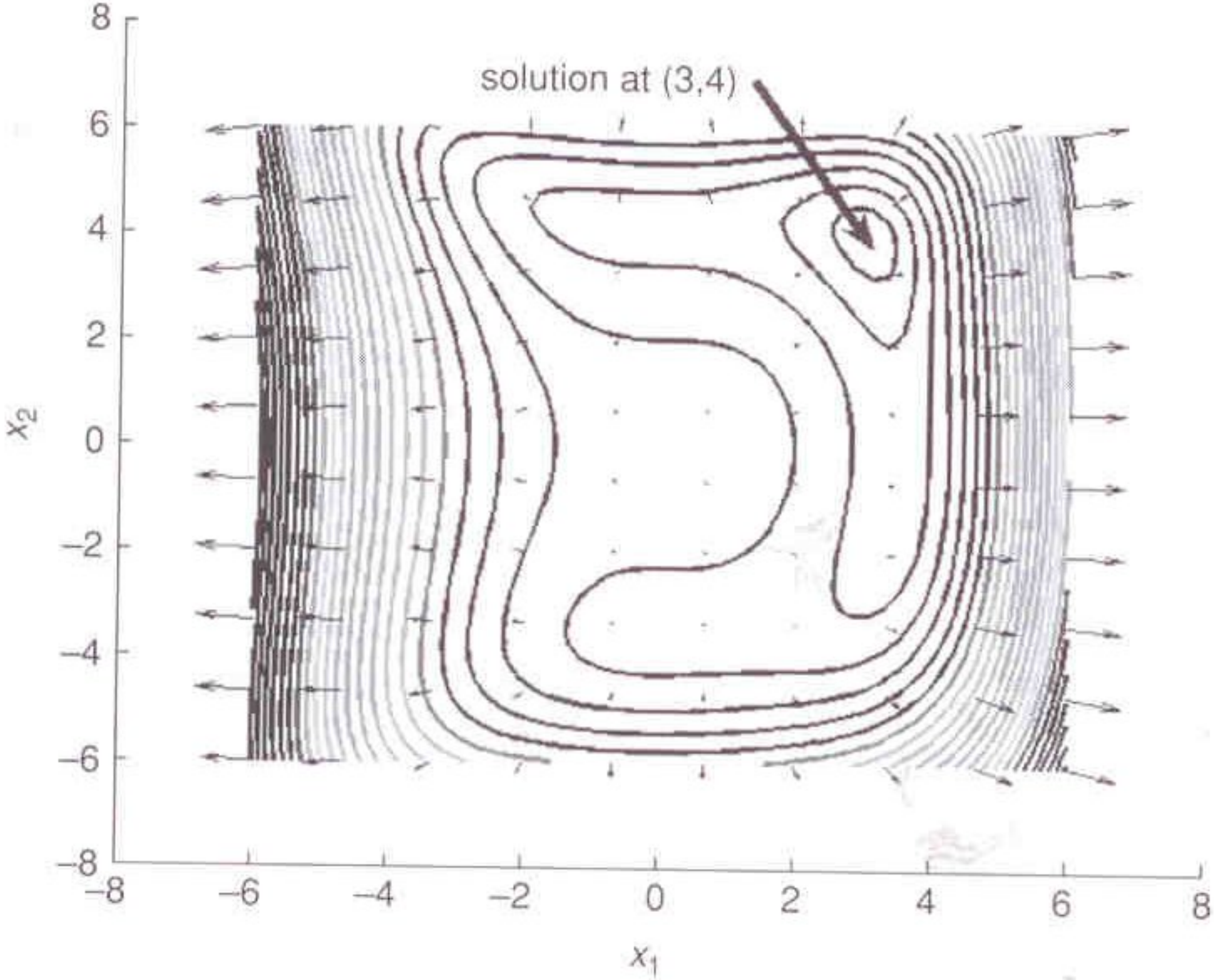
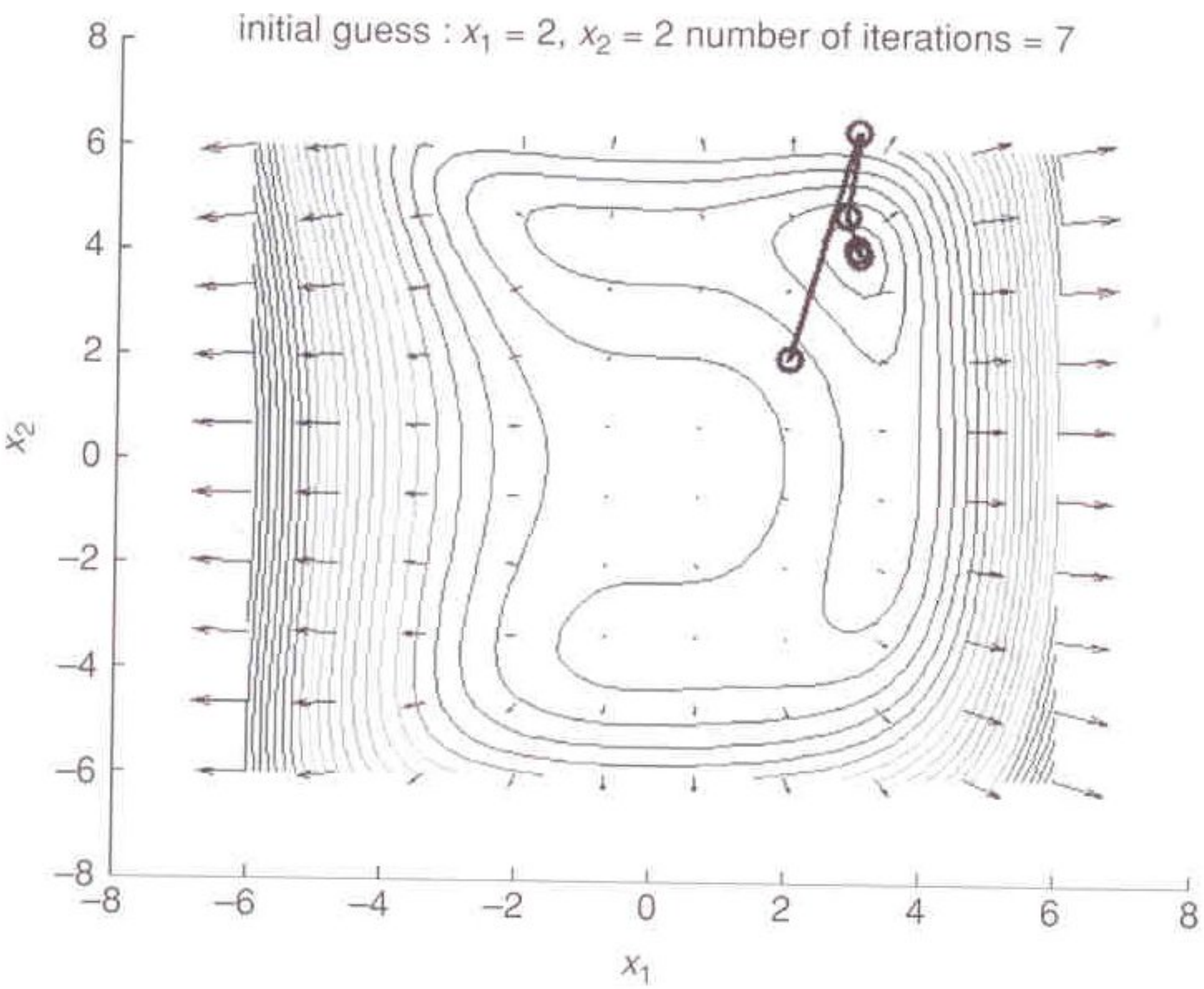
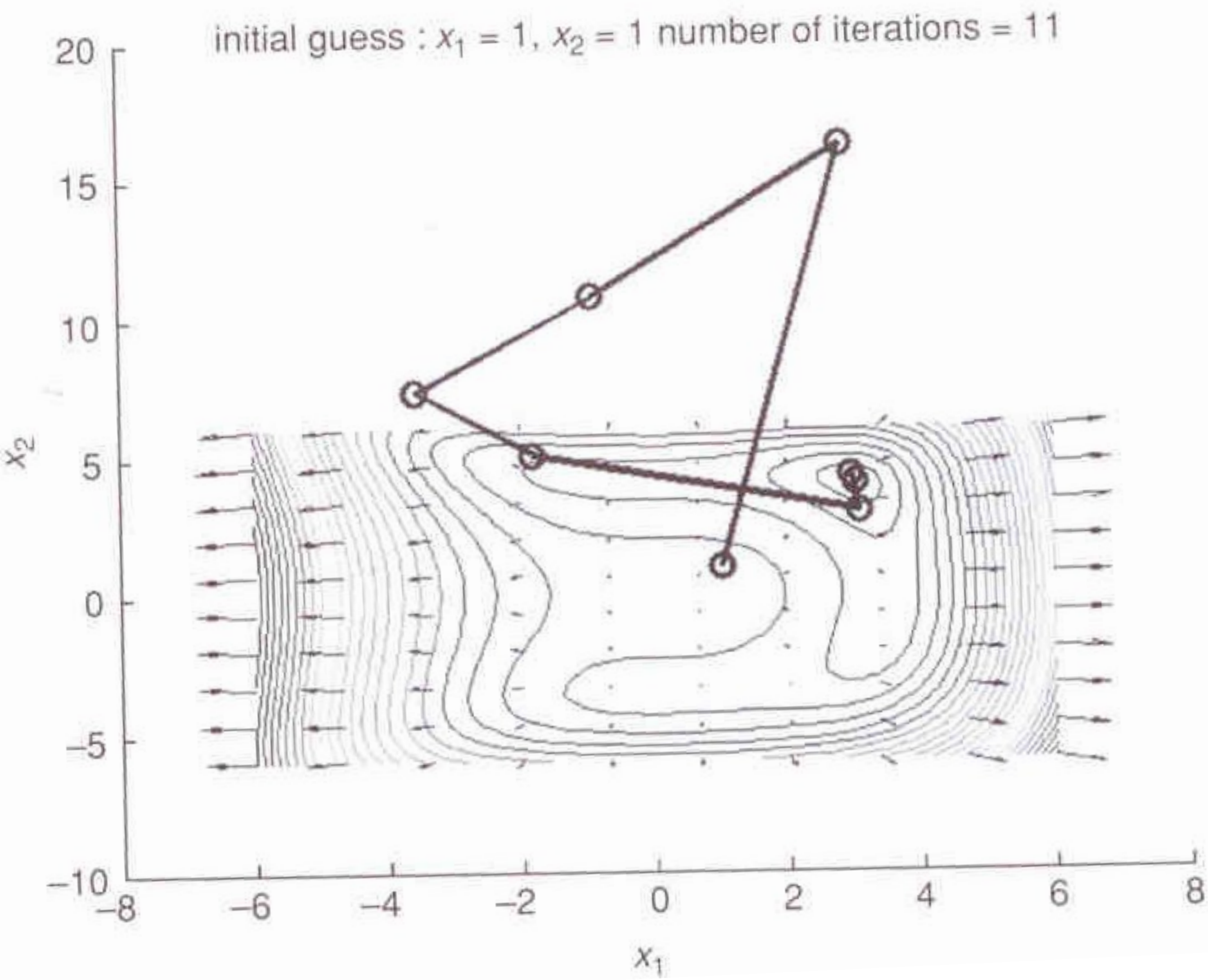
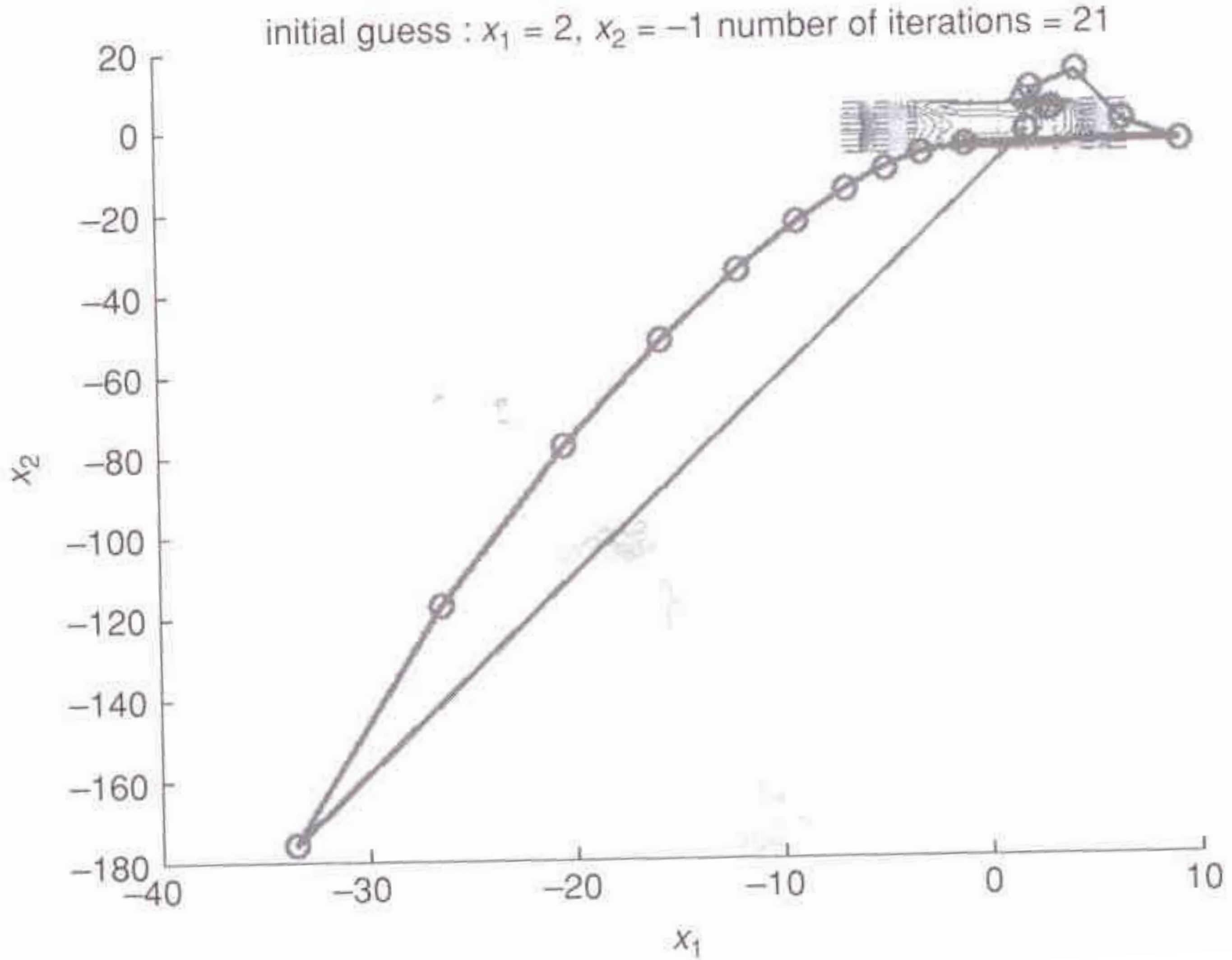


Figure 2.8 Contour plot of $\|f\|_2$ for a system with a solution at (3,4).



initial guess : $x_1 = 2$, $x_2 = 2$ number of iterations = 7
x_2
x_1
8
6
4
2
0
−2
−4
−6
−8


initial guess : x_1 = 1, x_2 = 1 number of iterations = 11
20
15
10
5
0
−5
−10
−8
−6
−4
−2
0
2
4
6
8
x_1
x_2


initial guess : x_1 = 2, x_2 = −1 number of iterations = 21
20
0
−20
−40
−60
−80
−100
−120
−140
−160
−180
x_2
−40
−30
−20
−10
0
10
x_1

Sistemas de Equações Algébricas não lineares

- Introdução
- Uma equação e uma única variável
  - Bissecção
  - Newton
  - Secante
- **Sistemas Multivariáveis**
  - Newton-Raphson
  - **Pseudo-Newton**
  - Broyden
  - Newton Modificado
- Matlab

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_k}\left(\mathbf{x}^{(i)}\right) \approx \frac{f_j\left(\mathbf{x}^{(i)} + h\mathbf{e}_k\right) - f_j\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)}{h}$$

Sistemas de Equações Algébricas não lineares

- Introdução
- Uma equação e uma única variável
  - Bissecção
  - Newton
  - Secante
- **Sistemas Multivariáveis**
  - Newton-Raphson
  - Pseudo-Newton
  - **Broyden**
  - Newton Modificado
- Matlab

$$\mathbf{p}^{(i+1)} = \mathbf{p}^{(i)} - A_i^{-1}\mathbf{F}\left(\mathbf{p}^{(i)}\right)$$

Com:

$$A_i^{-1} \quad = \quad A_{i-1}^{-1} + \frac{\left(\mathbf{s}_i - A_{i-1}^{-1}\mathbf{y}_i\right)\mathbf{s}_i^t A_{i-1}^{-1}}{\mathbf{s}_i^t A_{i-1}^{-1}\mathbf{y}_i}$$

Onde:

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{p}^{(i)} - \mathbf{p}^{(i-1)}$$

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{F}(\mathbf{p}^{(i)}) - \mathbf{F}(\mathbf{p}^{(i-1)})$$

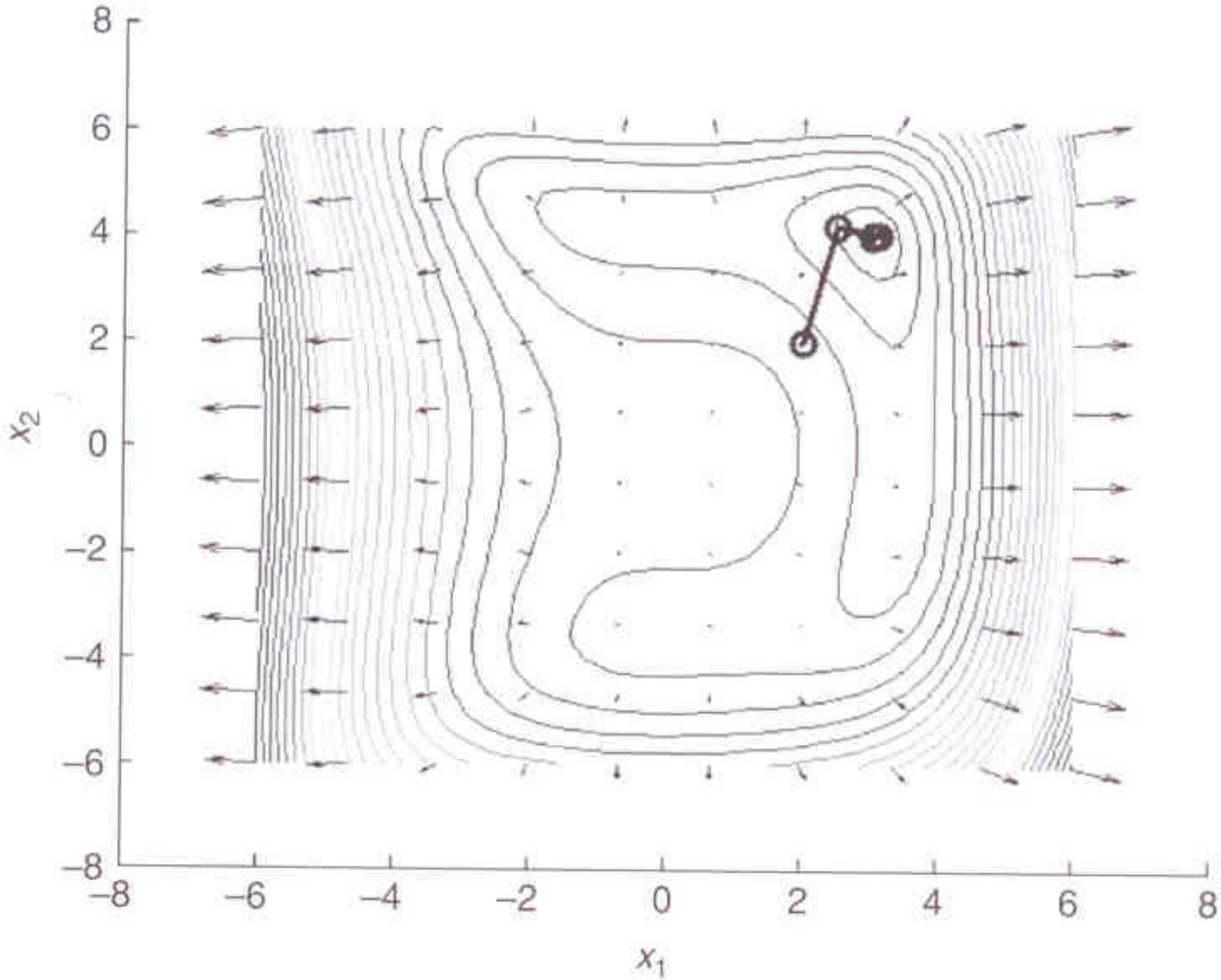
Sistemas de Equações Algébricas não lineares

- Introdução
- Uma equação e uma única variável
  - Bissecção
  - Newton
  - Secante
- **Sistemas Multivariáveis**
  - Newton-Raphson
  - Pseudo-Newton
  - Broyden
  - **Newton Modificado**
- Matlab

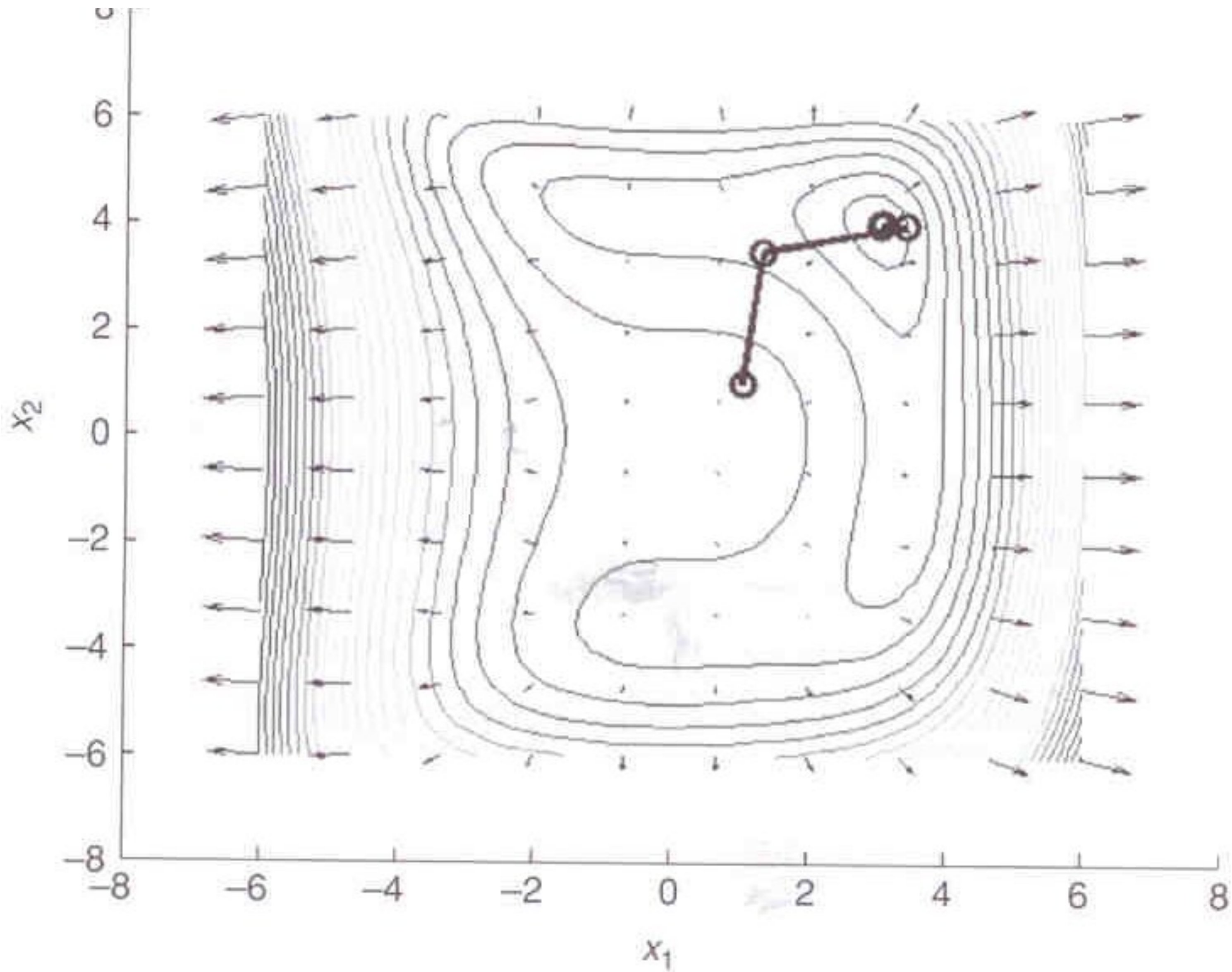
$$\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{p}^{(k-1)} - \alpha \; [J(\mathbf{p}^{(k-1)})]^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{p}^{(k-1)})$$

Tal que

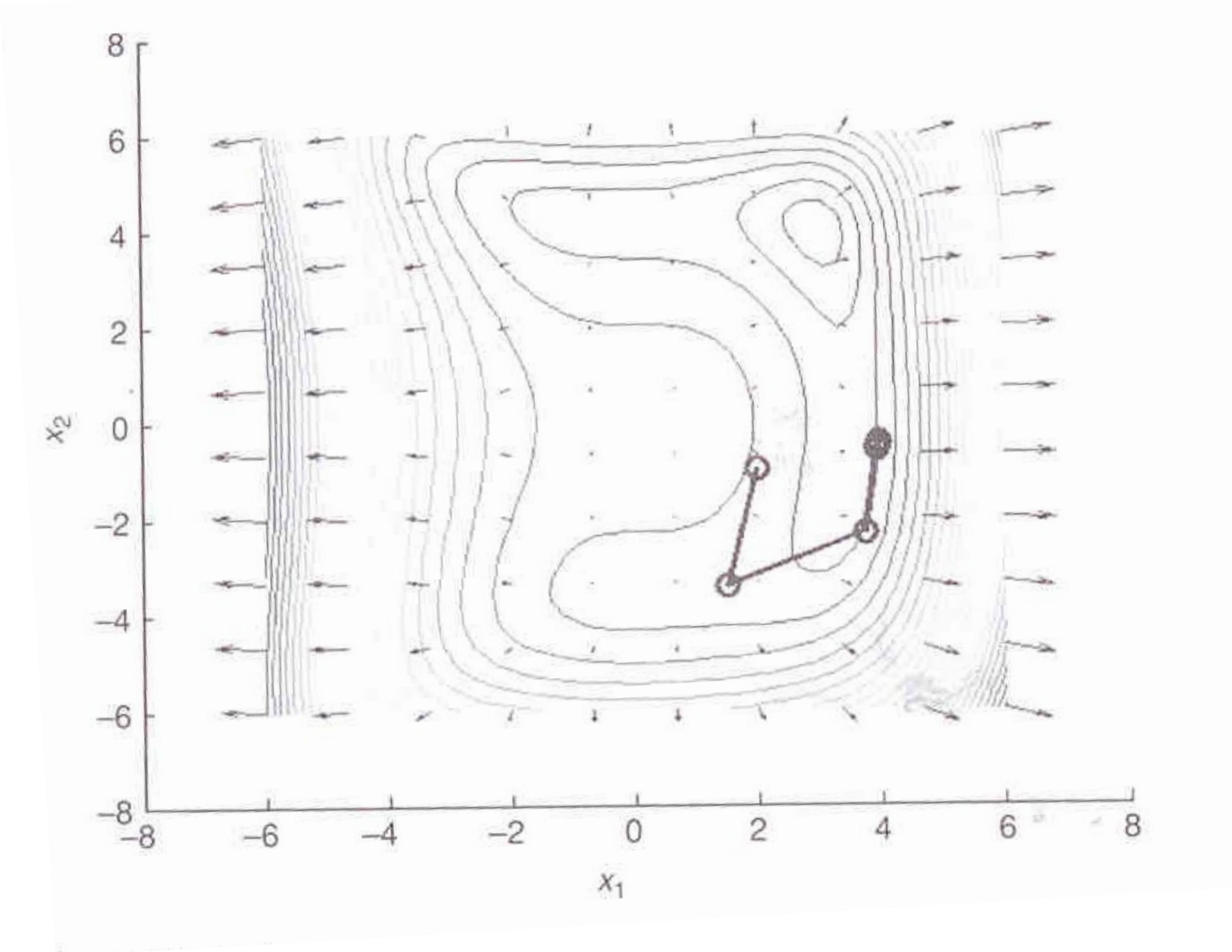
$$\left\| F\left(p^{(k)}\right) \right\| \prec \left\| F\left(p^{(k-1)}\right) \right\|$$



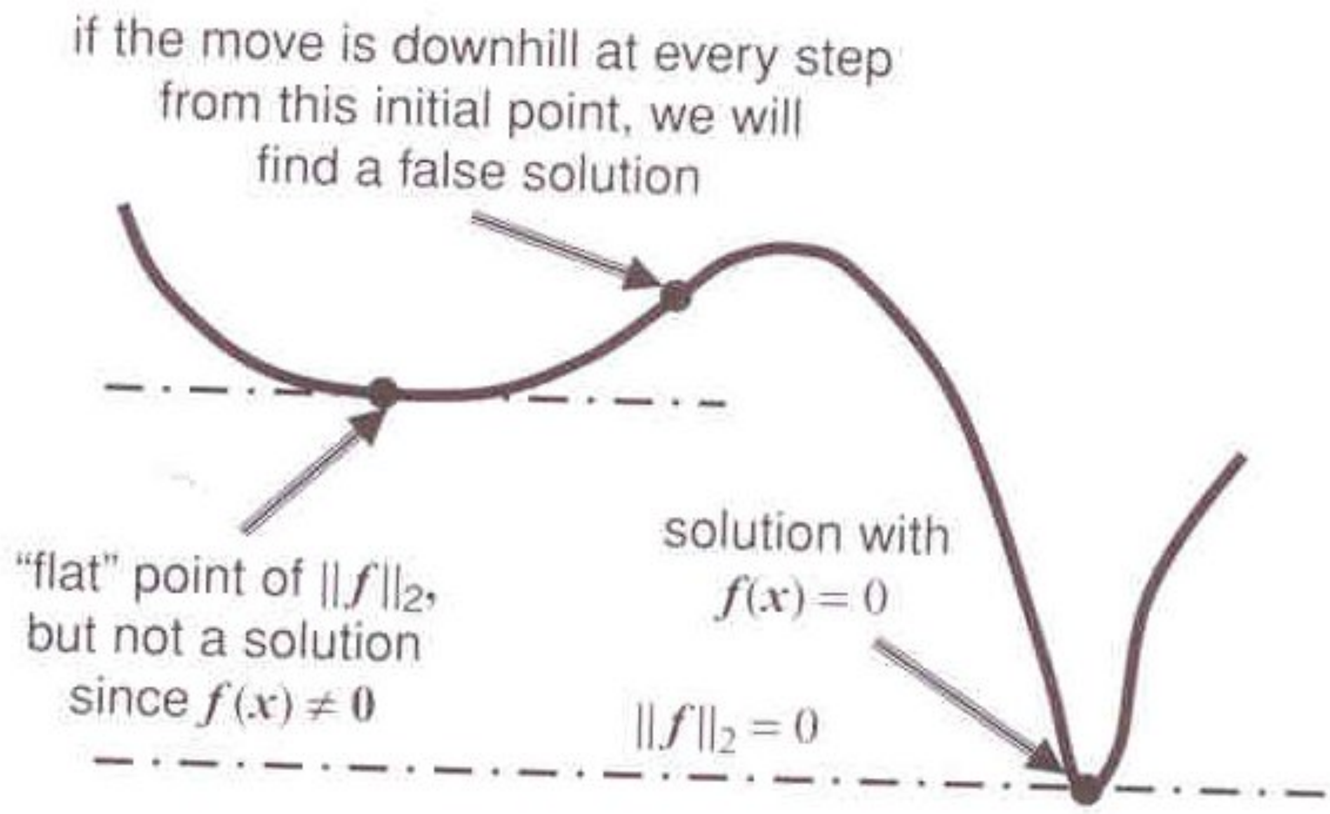
8
6
4
2
0
−2
−4
−6
−8
−8
−6
−4
−2
0
2
4
6
8
x_2
x_1



x_2
x_1
6
4
2
0
−2
−4
−6
−8
−8
−6
−4
−2
0
2
4
6
8



8
6
4
2
0
−2
−4
−6
−8
x_2
−8
−6
−4
−2
0
2
4
6
8
x_1


if the move is downhill at every step
from this initial point, we will
find a false solution
"flat" point of $||f||_2$,
but not a solution
since $f(x) \neq 0$
solution with
$f(x) = 0$
$||f||_2 = 0$

Por fim

- Algoritmos mais sofisticados, trata-se o problema como de otimização:
  - Levemberg-Marquardt;

Sistemas de Equações Algébricas não lineares

- Introdução
- Uma equação e uma única variável
  - Bissecção
  - Newton
  - Secante
- Sistemas Multivariáveis
  - Newton-Raphson
  - Pseudo-Newton
  - Broyden
  - Newton Modificado
- **Matlab**

fzero

Find root of continuous function of one variable

Syntax

```
x = fzero(fun,x0)
x = fzero(fun,x0,options)
[x,fval] = fzero(...)
[x,fval,exitflag] = fzero(...)
[x,fval,exitflag,output] = fzero(...)
```

fsolve

Solve system of nonlinear equations

Equation

Solves a problem specified by

$$F(x) = 0$$

for x, where x is a vector and $F(x)$ is a function that returns a vector value.

Syntax

```
x = fsolve(fun,x0)
x = fsolve(fun,x0,options)
x = fsolve(problem)
[x,fval] = fsolve(fun,x0)
[x,fval,exitflag] = fsolve(...)
[x,fval,exitflag,output] = fsolve(...)
[x,fval,exitflag,output,jacobian] = fsolve(...)
```

optimset

Create or edit optimization options structure

Syntax

```
options = optimset('param1',value1,'param2',value2,...)
optimset
options = optimset
options = optimset(optimfun)
options = optimset(oldopts,'param1',value1,...)
options = optimset(oldopts,newopts)
```

Parâmetros importantes

- Display: [off | iter | iter-detailed | notify | notify-detailed | final | final-detailed]
- MaxFunEvals: [positive scalar]
- MaxIter: [positive scalar]
- TolFun: [positive scalar]
- TolX: [positive scalar]
- DerivativeCheck: [on | {off}]
- DiffMaxChange: [positive scalar | {Inf}]
- DiffMinChange: [positive scalar | {0}]
- Jacobian: [on | {off}]

PQI - 5783 – ANÁLISE DE PROCESSOS DA INDÚSTRIA QUÍMICA

Aula Vb – Dicas para a modelagem de um sistema

Cuidado na definição das variáveis

- Variáveis diferentes podem expressar a mesma coisa
  - Por exemplo, frações molares, concentrações, frações mássicas se referem a composição, todas elas caracterizam a composição de uma corrente

Cuidado no uso de equações

- Se duplicar variáveis (por exemplo, decidir usar frações mássicas e concentrações) deve-se incluir as equações que as conectam no modelo para evitar erros de contabilidade de grau de liberdade;
- Errar os graus de liberdade, ao esquecer uma equação, ao usar equações linearmente dependentes, invalidam a resolução de um modelo;

Mantenha tudo o mais simples possível

- Este é o princípio de Ockham ou princípio da parsimônia
- Se puder usar somente um tipo de variável para uma determinada propriedade, use;
- Se puder uma correlação mais simples, use

As equações

Fundamentais:

- Balanços de massa
- Balanços de energia
- Relações de equilíbrio

Termodinâmicas

- Equações de estado
- Coeficientes de atividade / fugacidade
- Propriedades físico-químicas (densidade de líquido, Cp ..)
- Propriedades de transferência (difusividade, condutividade térmica, viscosidade ...)

As equações

Auxiliares, ditas constitutivas:

- Balanços de energia mecânica
- Perda de carga
- Global de transferência de energia e massa
- Local de transferência de energia/massa/quantidade de movimento

Dicas sobre as equações

- Os balanços de massa globais são L.D. com os balanços de massa parciais
  - No entanto, eles podem ser utilizados todos em conjunto se se utilizarem frações para representar a composição e a somatória delas igual a 1 for omitida
- As relações de equilíbrio são expressas pela igualdade da temperatura e da pressão das fases, e pela igualdade do potencial químico de cada um dos componentes em cada fase
  - A igualdade do potencial químico pode ser expressa de várias formas (fugacidade, coeficiente de atividades, lei de Raoult, correlações empíricas (K))

Dicas sobre as equações

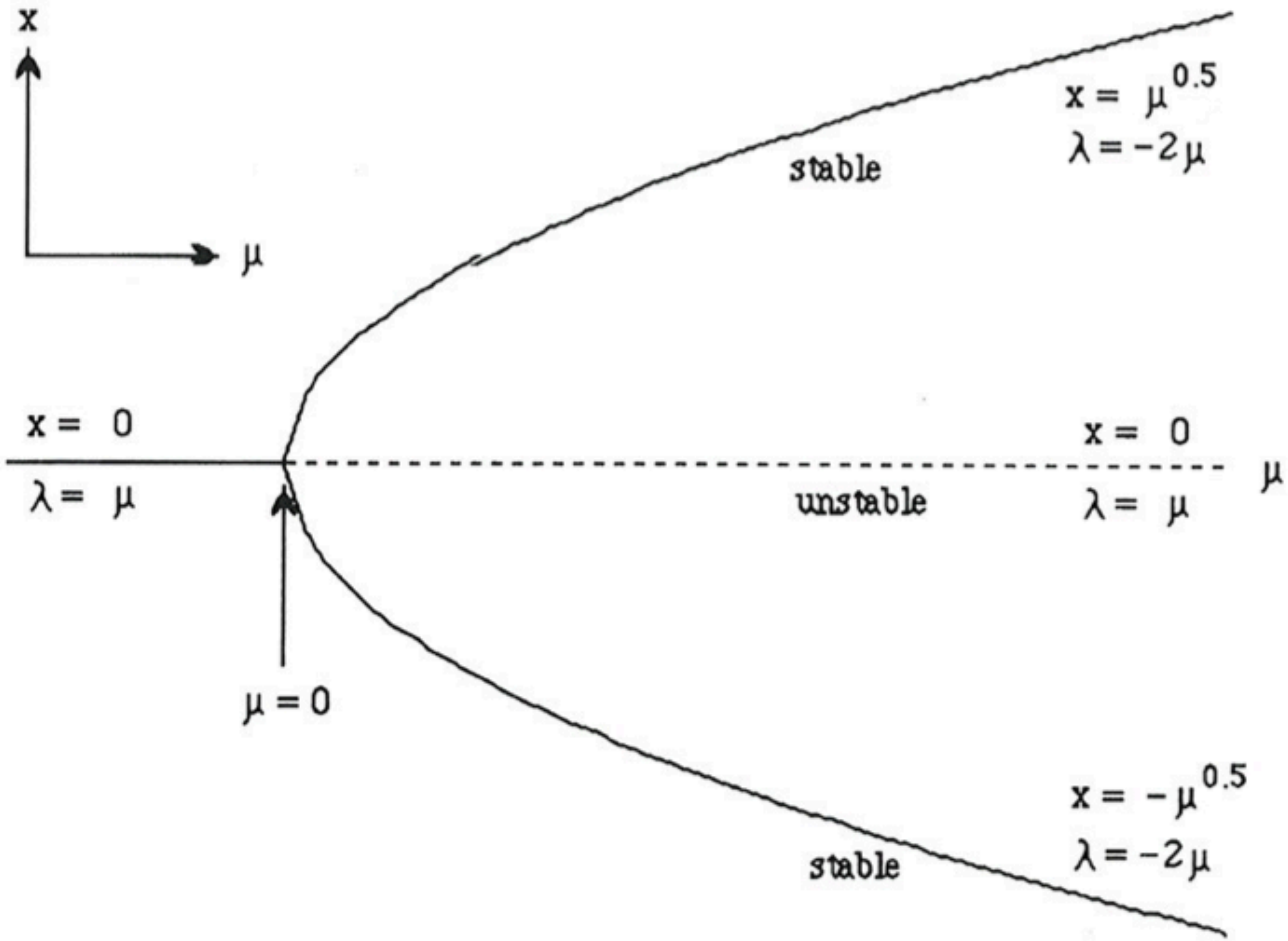
- No balanço de energia com reação não existe termo de geração. Existe uma mudança de composição que acarreta uma variação de entalpia:
  - Se é usada uma referência para a entalpia que leva em conta a entalpia padrão de formação, então não é necessário levar uma fonte
  - Se não não é usada a referência de entalpia de formação então vai aparecer um termo similar a uma fonte de energia.
  - O que entra no termo de acúmulo é a energia interna e não a entalpia: $H = U + P V$
  - Por outro lado, para substâncias incompressíveis, $Cp = Cv$

Equações Diferenciais Ordinárias - PVI

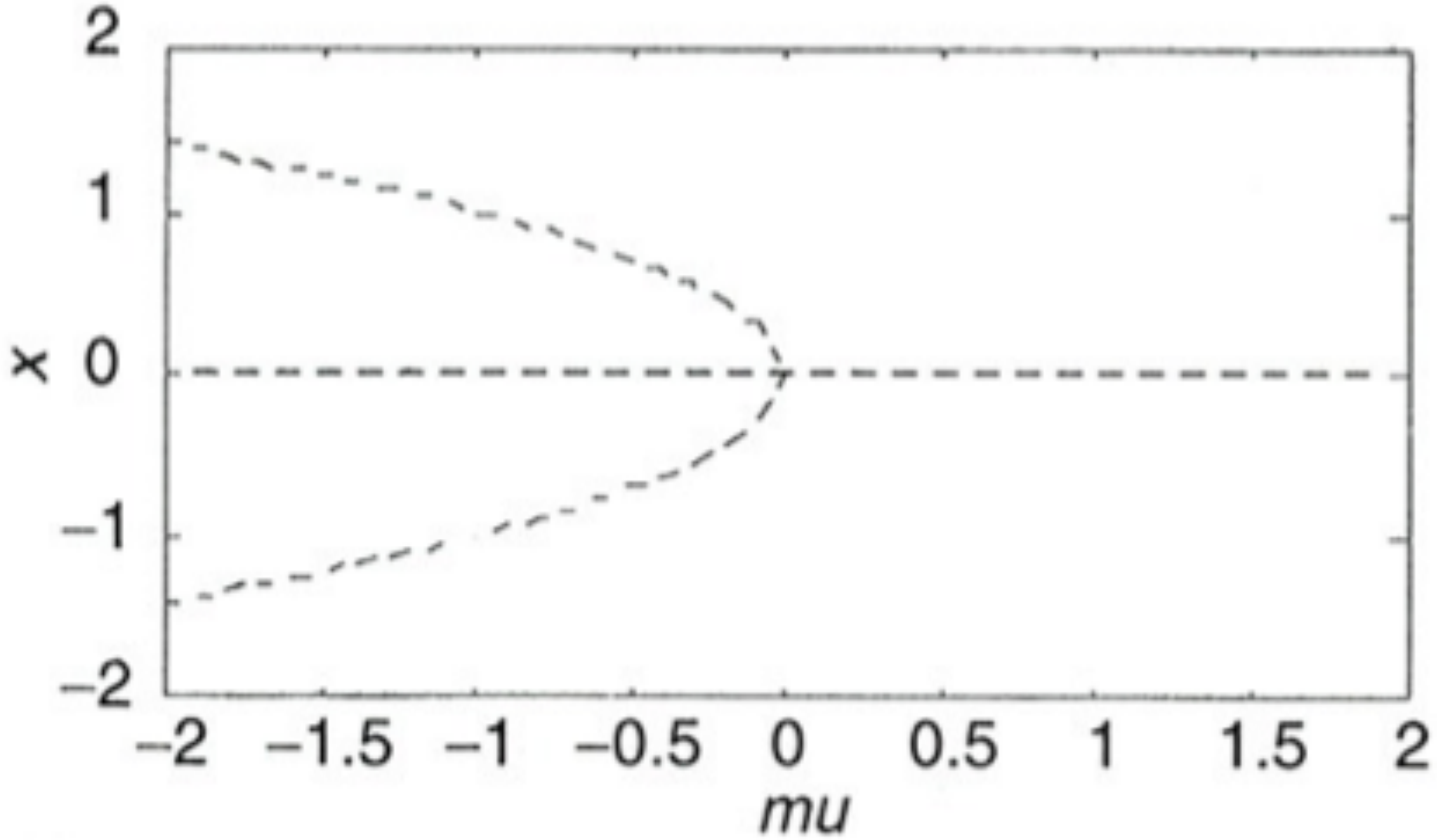
- Sistemas de EDOs não lineares
  - Exemplo 1 – diagrama de fases
  - Exemplo 2 – diagrama de fases
- **Diagramas de bifurcação**
  - Bifurcação de Hopf

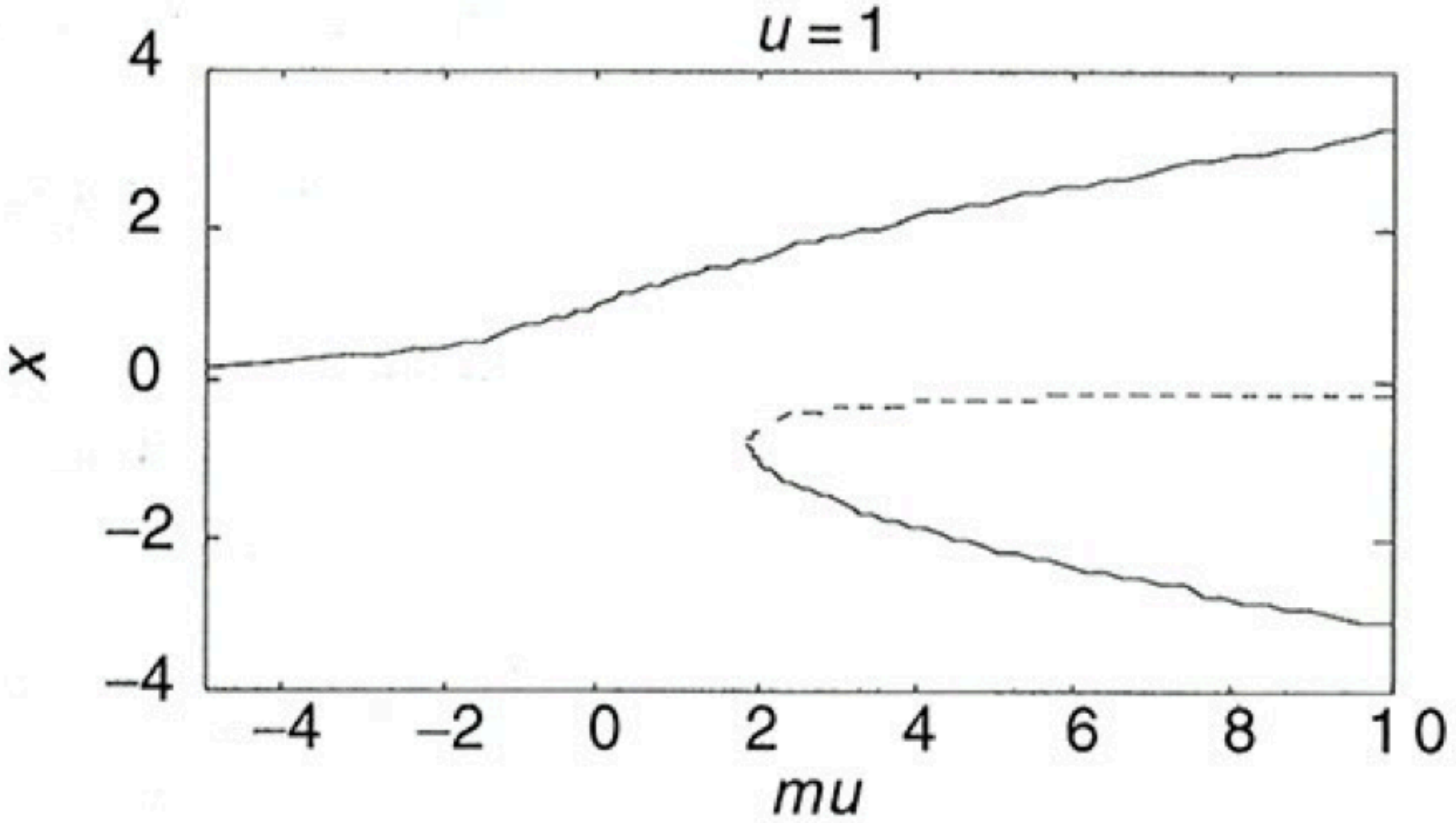
PQI - 5783 – ANÁLISE DE PROCESSOS DA INDÚSTRIA QUÍMICA

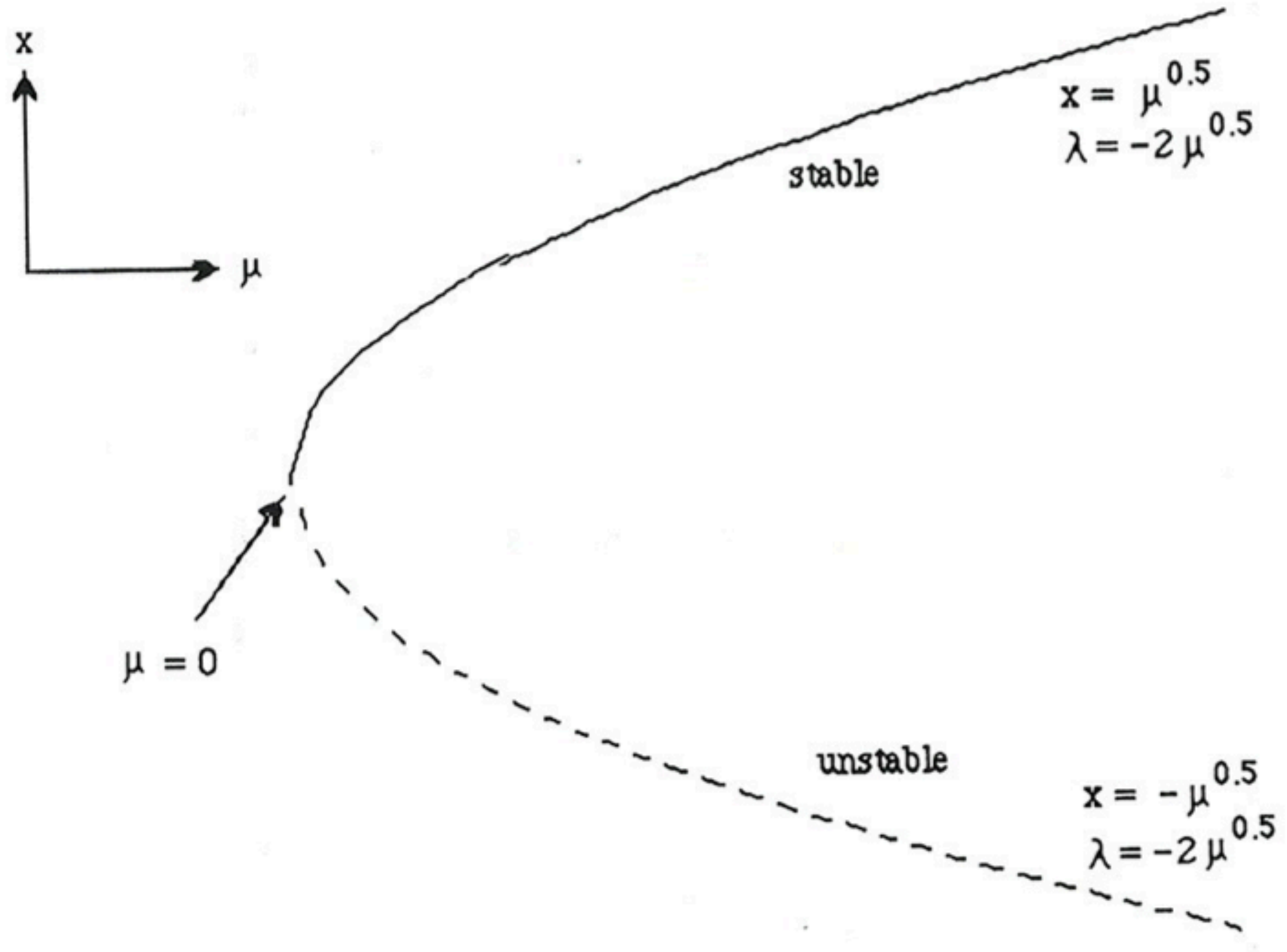
Aula Vc – Diagramas de Bifurcação



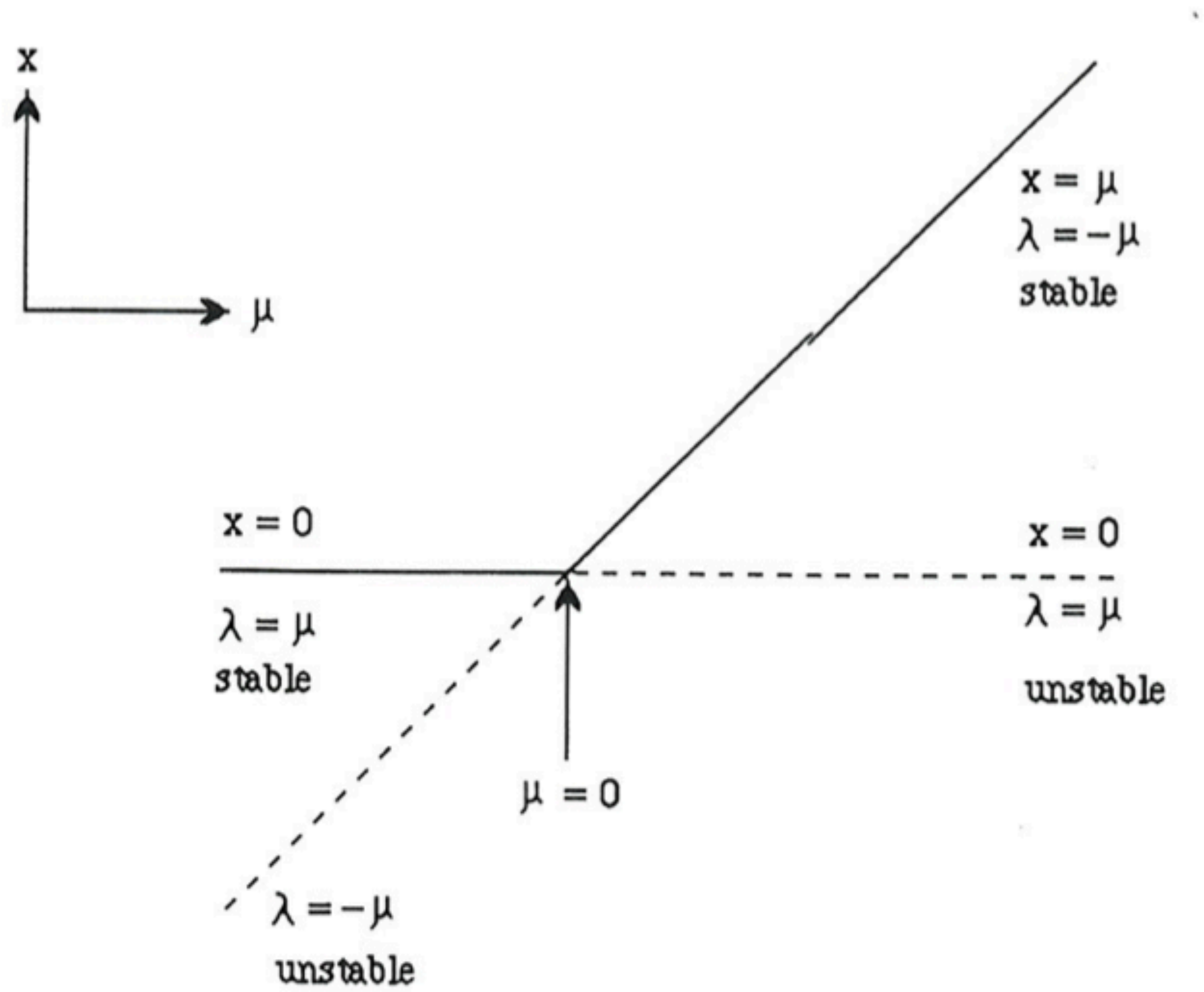
x
μ
$x = \mu^{0.5}$
$\lambda = -2\mu$
stable
$x = 0$
$\lambda = \mu$
$x = 0$
μ
unstable
$\lambda = \mu$
$\mu = 0$
$x = -\mu^{0.5}$
stable
$\lambda = -2\mu$


2
1
x 0
−1
−2
−2
−1.5
−1
−0.5
0
0.5
1
1.5
2
mu


u = 1
4
2
0
−2
−4
x
−4
−2
0
2
4
6
8
10
mu



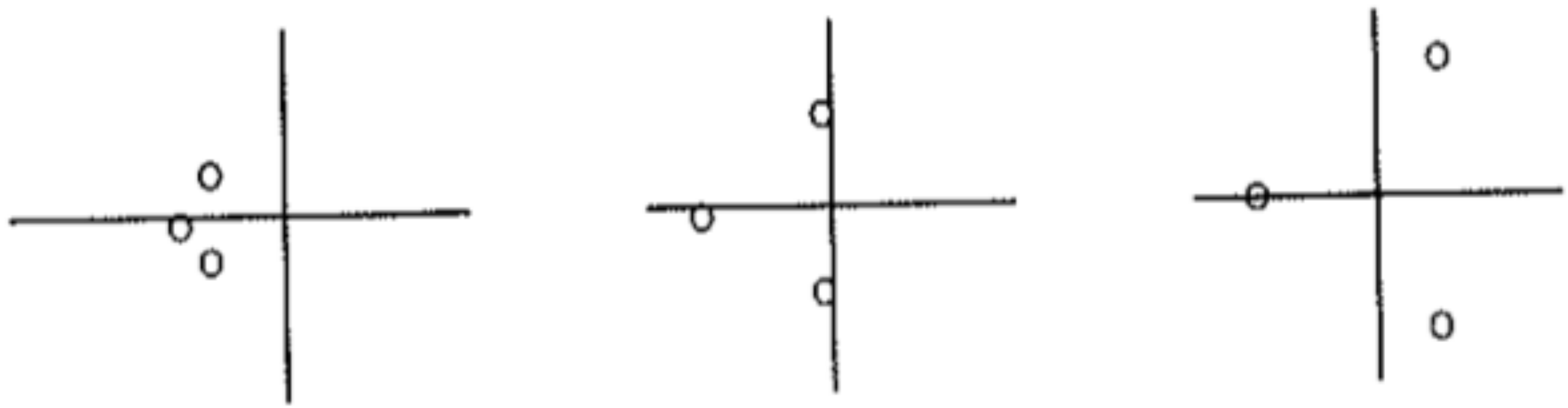
x
μ
x = μ^0.5
λ = −2 μ^0.5
stable
μ = 0
unstable
x = − μ^0.5
λ = −2 μ^0.5


x
μ
x = μ
λ = −μ
stable
x = 0
λ = μ
stable
x = 0
λ = μ
unstable
μ = 0
λ = −μ
unstable

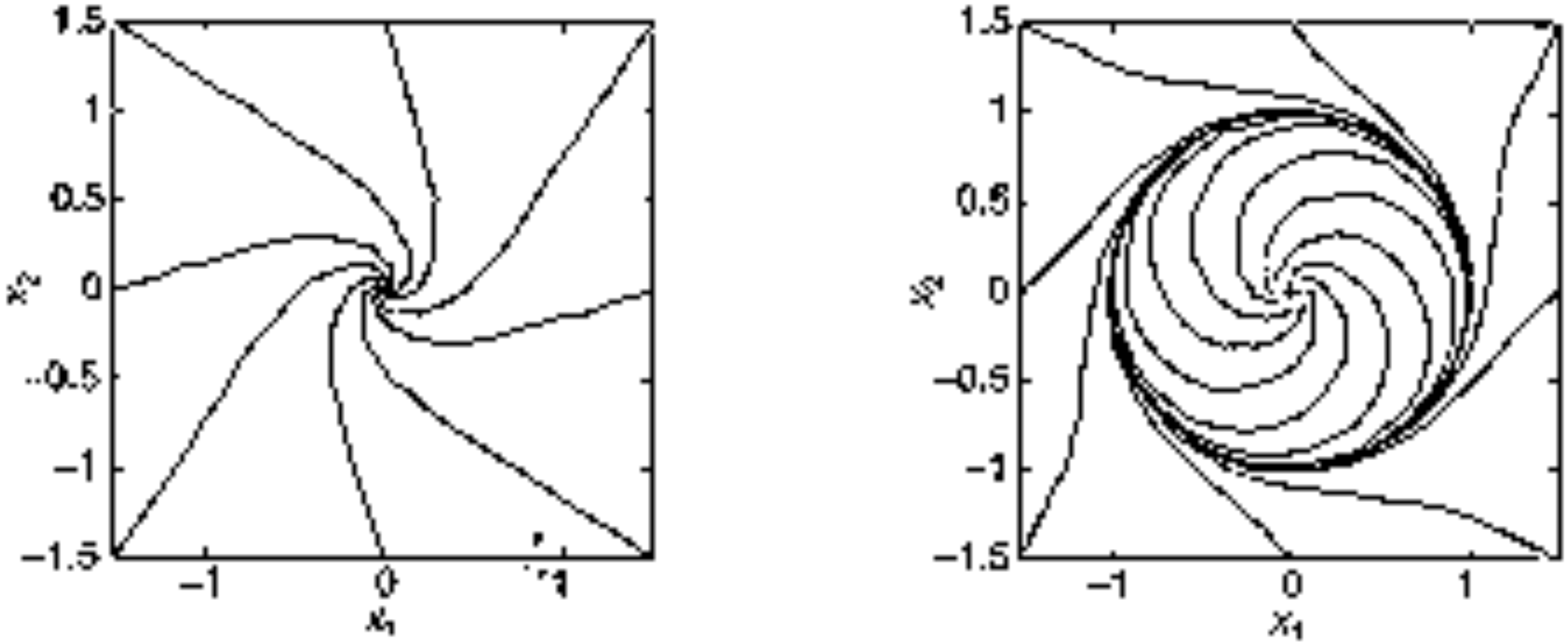
Equações Diferenciais Ordinárias - PVI

- Sistemas de EDOs não lineares
  - Exemplo 1 – diagrama de fases
  - Exemplo 2 – diagrama de fases
- Diagramas de bifurcação
  - **Bifurcação de Hopf**

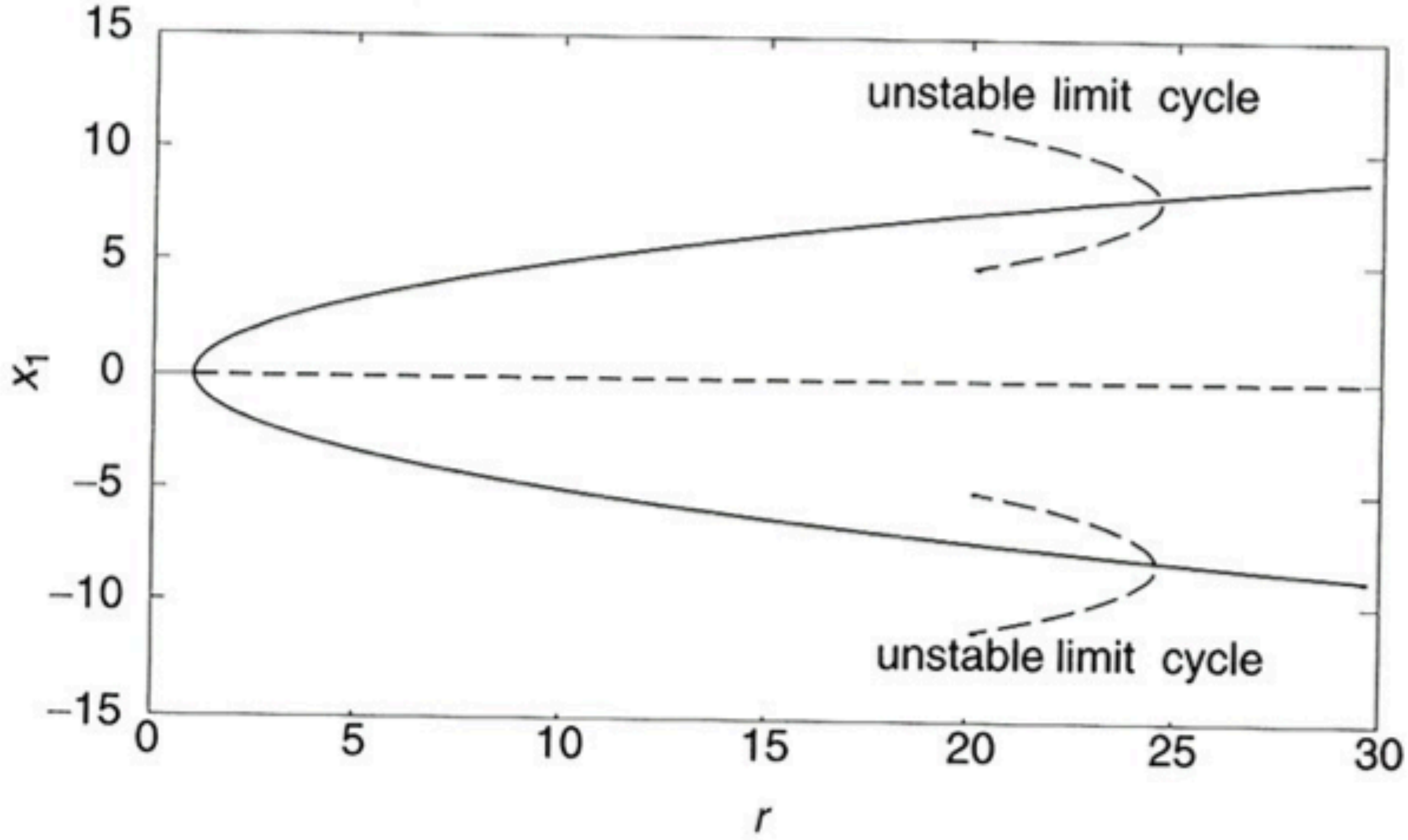
$\mu < 0$ $\mu = 0$ $\mu > 0$



$\mu < 0$ $\mu = 0$ $\mu > 0$



a. $\mu = -1$ b. $\mu = 1$


unstable limit cycle
unstable limit cycle
15
10
5
0
−5
−10
−15
x_1
0
5
10
15
20
25
30
r