ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

- PQI 3403 Análise de Processos da Indústria Química

Ardson dos Santos Vianna Júnior - ASVJ
e-mail: ardson@usp.br

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

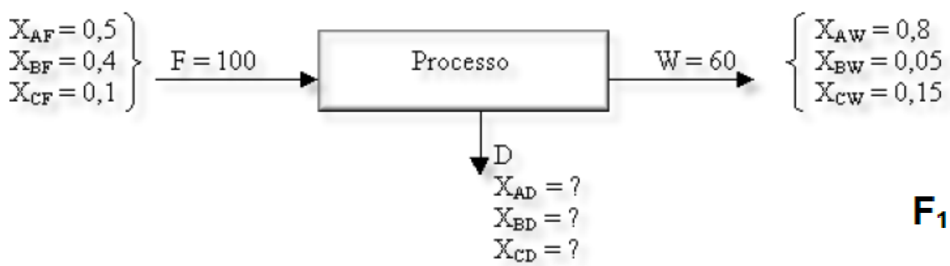
Aula 2 – Álgebra linear – matrizes

PQI 3403 Análise de Processos da Indústria Química

Motivação - Sistema de equações

- Sistema de equações: são usados para representar problemas que envolvem a interação de várias propriedades

- Balanços de massa e energia



$$F_1 - [\ F_2 + F_3] = 0$$

$$F_1 \ .\ X_{A1} - [\ F_2 X_{A2} + F_3 X_{A3}] = 0$$

$$F_{B1} - [F_{B2} + F_{B3}] = 0$$

Roteiro

1. Matrizes especiais
2. Estudo de caso
3. Conclusões
4. Bibliografia

1. Matrizes especiais

- Matriz definida positiva
- Matriz com predominância diagonal
- Matrizes esparsas

1.1 Matrizes especiais

- Matriz definida positiva:

Matriz quadrada

$x^t\ Ax > 0$ para todo vetor n dimensional $x \neq 0$

1.2 Matriz com predominância diagonal

- Matriz com predominância diagonal:

Matriz quadrada

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|$$

1.2 Matriz com predominância diagonal

- Propriedades da matriz estritamente diagonal dominante (com predominância diagonal ou diagonal dominante):

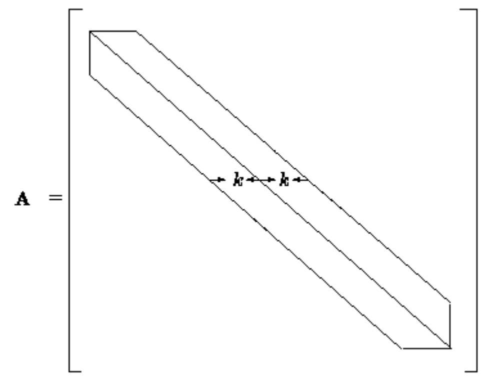
- Tem uma inversa
- A eliminação gaussiana não necessita de troca de linhas ou colunas
- Cálculos são estáveis, o erro de arredondamento não aumenta

1.3 Matrizes esparsas

- Matrizes esparsas
  - Vários elementos da matriz são iguais a zero
  - Guardar somente os elementos diferentes de zero

1.3 Matrizes esparsas

- Matriz de banda (matriz em banda)
- Se existem os números inteiros p e q, com $1<p$, $q<n$, com $aii=0$ quando $i+p<=j$ ou $j+q>=i$



- Concentra as entradas diferentes de zero nas diagonais

1.3 Matrizes esparsas

$$A = \begin{bmatrix} X & X & X & X & X & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ X & X & 0 & X & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ X & X & X & X & X & X & X & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & X & X & X & X & 0 & X & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ X & 0 & X & X & X & X & X & X & X & 0 & 0 & 0 \\ X & 0 & X & X & 0 & X & X & 0 & X & X & 0 & 0 \\ 0 & X & X & X & X & X & X & X & X & X & X & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X & 0 & 0 & X & X & X & X & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X & X & X & X & X & X & 0 & X & X \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X & X & 0 & X & X & X \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X & X & X & X & X & X \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X & 0 & X & X & X & X \end{bmatrix}$$

largura de banda superior: número de diagonais não nulas, acima da diagonal principal

largura de banda inferior: número de diagonais não nulas, abaixo da diagonal principal

largura de banda = largura de banda superior + largura de banda inferior + 1
ou seja, largura de banda é o numero total de diagonais não nulas

1. Matrizes esparsas

- Matrizes esparsas no Scilab:
  - Definição: sparse(A) apenas elementos não nulos são armazenados

  - Solução de sistemas esparsos: decomposição LU
  - lusolve: solucionador de sistemas esparsos
  - x=lusolve(A,b)

- C=sparse(A)
- x=lusolve(C,b)

Solução de sistemas lineares

- Inversa: A x = b >> x=inv(A) * b

- Operador divisor a esquerda: sol=A\b.

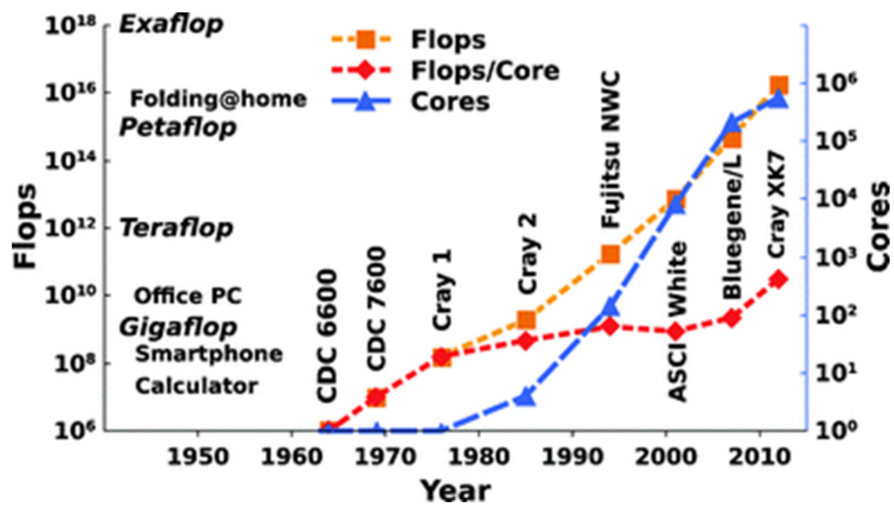
- Usando função linsolve: sol=linsolve(A,-b)

2. tempo computacional

- Operação algébrica com numero representando ponto flutuante (*flop – float point operation*)
- +, -, x, /
- 1.0e-2
- Métrica para velocidade de calculo

2 tempo computacional

- Operação com ponto flutuante (*flop – float point operation*)



2. tempo computacional

- `tic()`
- `    <comandos>`
- `<variável> = toc()`

Se o computador estiver executando várias tarefas simultaneamente, `tic-toc` pode não ser uma medida muito confiável

```
timer()
    <comandos>
<variável2> = timer()
```

3. Estudo de caso: EDO

- **Diferenças finitas - EDO**

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \phi^2 . y = 0 \qquad 1 C.C.\ x = 0 \quad \frac{dy}{dx} = 0$$

$$2 C.C. \quad x = 1 \quad y = 1$$

- Balanço de massa para pellet retangular

3. Estudo de caso: EDO

Diferenças finitas - Método

- Gerar a malha: pontos onde se resgata a solução
- Substituir os operadores diferenciais por operadores diferença
- Construir o sistema de equações
- Resolver o sistema
- Representar a solução

3. Estudo de caso - EDO

Diferenças finitas - fórmulas

Ponto de partida***: Série de Taylor***

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \ldots$$

$$R_{n+1} = \frac{f^{(n+1)}(x_0)}{(n+1)!}(\xi_i)^{n+1}$$

3. Estudo de caso - EDO

Aproximação da 1ª derivada: truncamento da Série de Taylor

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

Aproximar a derivada no ponto x_i, atribuir:

$x \leftarrow x_{i-1}$ $x_0 \leftarrow x_i$

3. Estudo de caso - EDO

Fórmula *forward* ou adiantada

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f´(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f´´(x_i)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{f´´´(x_i)}{3!}(x_{i+1} - x_i)^3 + \ldots$$

$$u_{i+1} = u_i + h.u´_i$$

3. Estudo de caso - EDO

Fórmula *backward* ou atrasada ou retrograda

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i-1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}(x_{i-1} - x_i)^3 + \ldots$$

$$u_i = u_{i-1} + h.u'_i$$

3. Estudo de caso - EDO

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}(x_{i+1} - x_i)^3 + \ldots$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i-1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}(x_{i-1} - x_i)^3 + \ldots$$

Somando

$$u''_i \cong \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

3. Diferenças finitas - Método

- Gerar a malha: pontos onde se resgata a solução
- Substituir os operadores diferenciais por operadores diferença
- Construir o sistema de equações
- Resolver o sistema
- Representar a solução

3. Diferenças finitas - Método

- Gerar a malha: pontos onde se resgata a solução

  $x_i=x_0+i.h$

xo	u1
x1	u1
x2	u2
….	
xn	un

3. Diferenças finitas - Método

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - \phi^2 . y = 0 \qquad u``_i \cong \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} - \phi^2 . u_i = 0$$

$$x = 0 \quad \frac{u_1 - u_0}{h} = 0$$

$$x = 1 \quad u_n = 1$$

3. Diferenças finitas - Método

- Montando o sistema

$$u_1 = u_0$$

$$u_{i+1} - (2 + h^2)\phi^2 u_i + u_{i-1} = 0$$

$$u_{n+1} = 1$$

- Sistema tridiagonal

3. Diferenças finitas - Método

- Resolvendo o sistema – algoritmo de Thomas = TMDA

$$Ax = b$$

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \ldots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \ldots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & & 0 \\ \ldots & \ldots & & & \\ \ldots & \ldots & \ldots & a_n & b_n \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \ldots \\ \ldots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \ldots \\ \ldots \\ d_n \end{pmatrix}$$

3. Diferenças finitas - Método

- Resolvendo o sistema – identificando os vetores a,b,c e d

- $b_1=1$, $c_1=-1$, $d_1=0$

- $b_i=-(2+h^2\Phi^2)$, $a_i=1$, $c_i=1$, $d_i=0$, $2 \leq i \leq n$

- $b_{n+1}=1$ $d_{n+1}=1$

4. Conclusões

- Matrizes especiais
- Sistemas de equações
- Estudo de caso

Bibliografia

- Beers, K.J., Numerical Methods for Chemical Engineering, Cambridge, 2007;
- Burden, R.L., Faires, J.D., Análise Numérica, Cengage, 2008 – tradução da 8a edição americana;
- https://www.scilab.org/