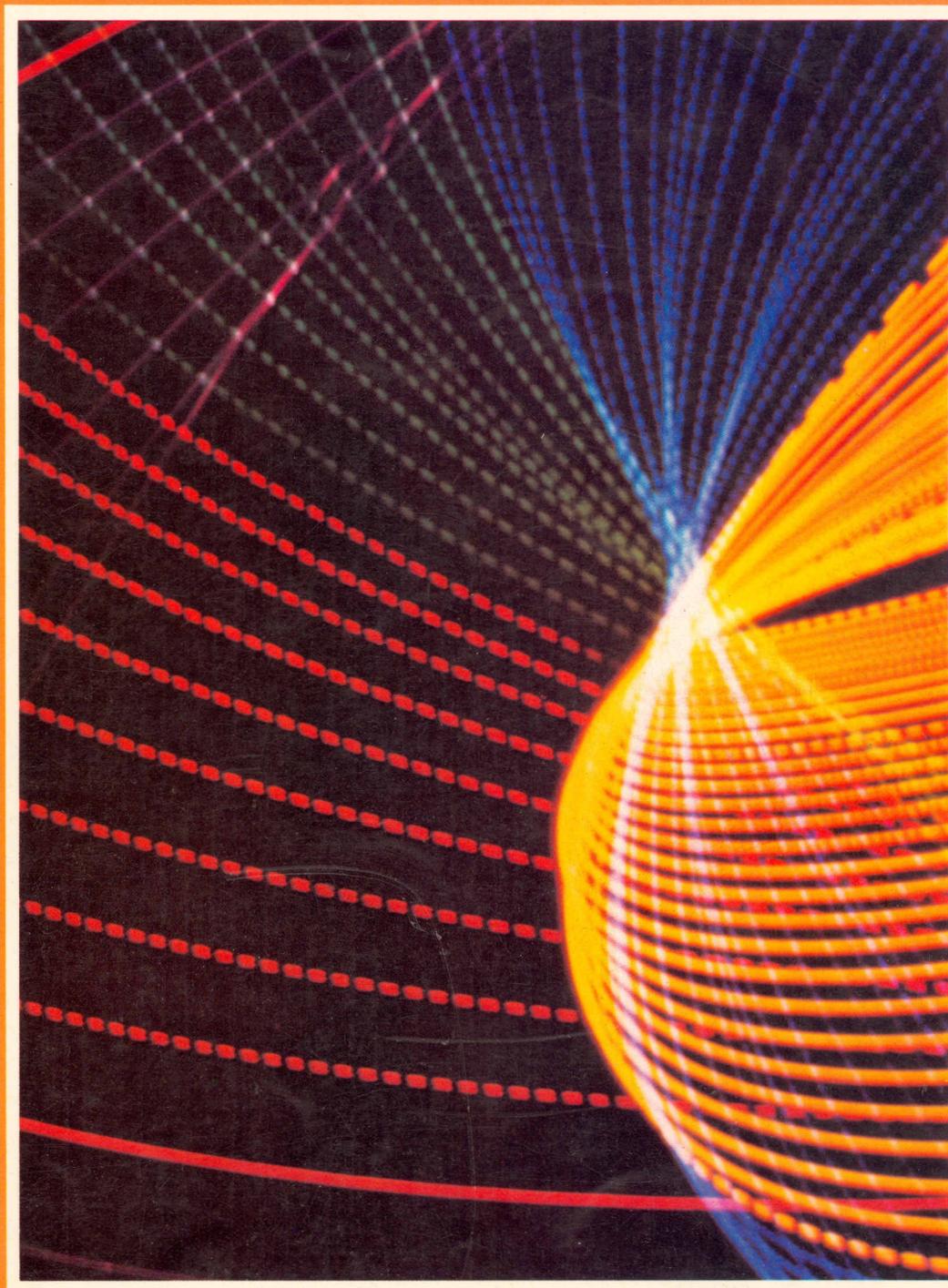


Prof. Zakari

REVISTA
BRASILEIRA DE ENGENHARIA QUÍMICA
ORGÃO DA ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENGENHARIA QUÍMICA

MARÇO 81
Volume 5
Número 1



A Engenharia Química e o Ensino de Polímeros
Equações para Curvas ou Conjunto de Dados
Métodos Tentativos, Aproximativos e Iterativos
O Ensino de Engenharia de Processos na UFRJ
Álcool Combustível e a Engenharia Química

Métodos Tentativos, Aproximativos e Iterativos na Engenharia Química

Abraham Zakon

INTRODUÇÃO

No tempo da régua de cálculo era comum aos engenheiros encontrar equações de difícil resolução e apelar para métodos de **tentativas e erros** ("trial and error calculations"), pois a solução por procedimentos analíticos seria difícil ou impossível. Massarani¹ observa que, segundo o Teorema da Abel-Ruffini, as equações algébricas até do 4.º grau tem solução analítica e as de grau superior, salvo alguns tipos especiais, só podem ser resolvidos numericamente. As equações transcendentes não apresentam solução analítica.

Para Perry & Chilton² o objetivo dos métodos aproximados e numéricos é o de conseguir técnicas convenientes para extrair informações das formas matemáticas associadas aos fenômenos físicos. Os resultados obtidos não são exatos mas próximos dos valores verdadeiros, envolvendo, provavelmente, erros grosseiros ou de arredondamento, ou de truncamento ou de propagação.

De acordo com Mc Cracken e Dorn³, um método numérico no qual

ocorre uma sucessão de aproximações é denominado "iterativo". Cada etapa, ou aproximação, é uma iteração. Para La Fara⁴, a palavra iteração significa um processo repetitivo que executa alguma computação. Segundo Pacitti e Atkinson⁵ um método iterativo principia com uma "estimativa" que fixa uma possível solução para um sistema de equações.

Nossa abordagem visa estabelecer um elo matemático entre alguns casos encontrados na literatura sob as diferentes denominações mencionadas acima, de modo a facilitar a compreensão do emprego das minicalculadoras programáveis e dos computadores digitais.

PROBLEMA BÁSICO

Deseja-se encontrar uma ou mais raízes de uma equação algébrica ou transcendental ou seja, encontrar o zero de uma função que pode ser escrita sob a forma $F(x) = 0$ e ser representada pela **figura 1**:

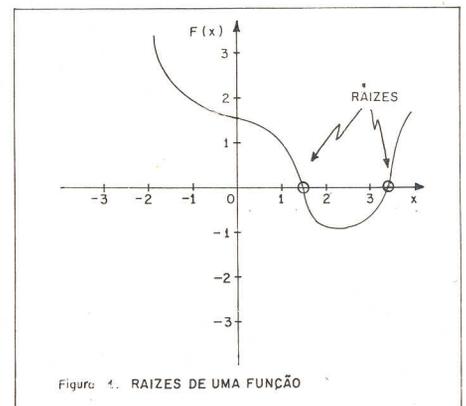


Figura 1. RAÍZES DE UMA FUNÇÃO

Nas vizinhanças das raízes o valor da função muda de sinal.

O intervalo matemático onde está localizada a raiz geralmente corresponde a uma limitação física ou prática do engenheiro e constitui-se em informação útil na resolução da equação.

Segundo Santos e Stravinski⁶ a determinação precisa das raízes da equação é usualmente feita em duas etapas:

a) localização de intervalos de existência das raízes;

b) refinamento dos valores resultantes da localização até que a raiz seja conhecida dentro de uma tolerância desejada.

A localização de raízes reais pode ser efetuada numericamente ou graficamente a partir de varreduras num campo de existência relativamente grande. Os métodos de refinamento das raízes podem ser usados diretamente para determiná-las quando os intervalos de existência são previamente conhecidos.

Uma opção para o procedimento acima é o Método das Tentativas e Erros, que se baseia em artifícios de cálculo de acordo com a inspiração do engenheiro.

O exemplo 1 apresenta o tipo mais simples de varreduras e o exemplo 2 ilustra uma aplicação de tentativas e erros.

EXEMPLO 1 — Localizar uma raiz real de $x^3 + \cos x = 0$ (Santos & Stravinski)

Solução: Escolhemos um campo para a variável x e um incremento Δx entre seus valores. Se existir uma raiz no intervalo considerado, o sinal da função irá mudar na vizinhança da raiz (veja a figura 1). Aliás, naquele campo poderão existir uma ou mais raízes e podemos, por sorte, encontrar a raiz na primeira varredura.

Adotando o intervalo $(-2,2)$ para x (em radianos) e um incremento unitário, podemos tabelar os resultados assim:

x	$F(x) = x^3 + \cos x$
-2	-8,42
-1	-0,46
0	1
1	1,54
2	7,58

Esta tabela indica a existência de uma raiz real no intervalo $(-1,0)$.

Quanto menor for Δx , melhor será o resultado da raiz. Porém, nem sempre é prático usar um pequeno Δx para todo o intervalo, pois este critério pode resultar em perda de tempo e esforços. Uma alternativa seria tornar Δx menor à medida que os resultados do tabelamento se aproximem do valor verdadeiro da raiz. Para executar tal procedimento podemos empregar fórmulas de recorrência do tipo:

$$\Delta x_{n+1} = \frac{\Delta x_n}{k} \quad (k = n.^\circ \text{ qualquer})$$

Ou seja: o próximo incremento será igual à uma fração do incremento que acabou de ser testado.

1.ª tentativa: adotando $e^{x_1^2} = 14,2$ e aplicando logaritmos naturais:

$$x_1^2 \ln e = \ln 14,2 \text{ donde } x_1 = 1,63;$$

$$\text{checando } x_1: e^{x_1^2} - x_1 = 14,2 - 1,63 = 12,57 \neq 14,2;$$

então devemos efetuar nova tentativa para encontrar uma raiz maior que 1,63 para satisfazer a equação.

2.ª tentativa: adotando $x_2 = 1,7$ então: $e^{(1,7)^2} - 1,7 = 17,99 - 1,7 = 16,29;$

sendo $16,29 \neq 14,2$, podemos admitir que um valor intermediário entre 1,63 e 1,7 satisfaça a equação.

3.ª tentativa: $x_3 = (1,63 + 1,7)/2 = 1,67;$

$$\text{checando } x_3 \text{ na equação: } e^{x_3^2} - x_3 = 16,26 - 1,67 = 14,59.$$

4.ª tentativa: $x_4 = 1,665$ donde $e^{x_4^2} - x_4 = 14,33 \neq 14,2.$

5.ª tentativa: $x_5 = 1,662$ donde $e^{x_5^2} - x_5 = 14,17 \cong 14,2.$

O número de tentativas depende apenas da precisão desejada pelo calculista.

Podemos observar que nos dois exemplos as respostas foram obtidas por aproximação. No primeiro exemplo a varredura permitiu que se partisse de um ponto a outro no campo de existência e forneceu uma noção do valor da raiz. Esta varredura ocorreu num sentido. No segundo exemplo ocorreu uma espécie de zigzague.

Quando os valores da função tendem para zero (indicando a existência da raiz) diz-se que ocorre uma convergência, a qual pode ser monotônica (exemplo 1) e oscilatória (exemplo 2).

No Exemplo 1 a convergência monotônica ocorreu dentro do intervalo $(-2,0)$. Caso iniciássemos a resolução do problema estudando o intervalo $(1,5)$ encontraríamos os seguintes valores:

x	$x^3 + \cos x$
1	1,54
2	7,58
3	8,01
4	63,35
5	125,28

Estes resultados indicam que ocorreu divergência monotônica pois os valores da função afastam-se progressivamente de zero.

EXEMPLO 2 — Obter uma raiz real para $e^{x^2} - x = 14,2$ (Anderson e Wenzel⁷)

Solução: Um artifício de cálculo pode ser adotado: desprezar x na equação acima.

Caso adotássemos outros valores tentativos (oscilatórios) para o exemplo 2, encontraríamos.

x	$e^{x^2} - x$
1,63	12,62
2,0	52,60
1,0	1,72
3,0	8100,08
0,0	1,0

Aqui ocorreu divergência oscilatória pois os valores da função ($e^{x^2} - x$) afastaram-se de 14,2.

Anderson e Wenzel⁷ comentam que um engenheiro experimentado pode fazer estimativas, cálculos e interpolações mentais para obter as raízes ou valores desejados. Eles recomendam nunca esquecer o princípio de que o número de equações independentes deve igualar o número de incógnitas a fim de que o método tentativo forneça uma solução. Para eles, os métodos de tentativas e erros não oferecem resultados descobertos por mágica, porém constituem-se em procedimentos grosseiros para resolver uma equação ou um conjunto de equações.

MÉTODOS ITERATIVOS

São organizados, sofisticados e adequados ao uso de máquinas programáveis digitais e permitem obter

raízes refinadas (com maior precisão). Neste panorama, a sequência de operações matemáticas destinadas a encontrar uma solução de um dado problema é denominada **algoritmo**, o qual pode ser segundo La Fara⁴.

- direto (fechado) — executa operações aritméticas e lógicas de modo não repetitivo; cada etapa é executada somente uma vez e a resposta obtida é essencialmente exata.
- indireto (aberto) — executa operações aritméticas e lógicas, onde um grupo destas pode ser repetido. A resposta obtida é aproximada, sendo melhorada com cada repetição das operações. A sequência termina quando duas aproximações sucessivas da resposta se igualam dentro da precisão desejada.

A compreensão do método iterativo é facilitada pela representação do mesmo em um fluxograma. Assim, para cada operação matemática envolvida indicamos um símbolo gráfico, que pode conter uma descrição da mesma. A simbologia que vem sendo adotada é a da linguagem FORTRAN, usada em computadores.

Os **exemplos 1 e 2** podem ser resolvidos através de métodos iterativos, porque as varreduras e os artifícios de cálculo podem ser organizados na forma de algoritmos mais sofisticados para refinar os resultados. Naqueles exemplos não ocorreu nenhum desdobramento da equação $F(x) = 0$.

As **Iterações Lineares**, também conhecidas por "Método das Aproximações Sucessivas", ou das "Substituições Diretas", baseiam-se no desdobramento de $F(x) = 0$ num sistema de duas equações:

$$F(x) = 0 \text{ gera } x = g(x) \text{ que resulta em}$$

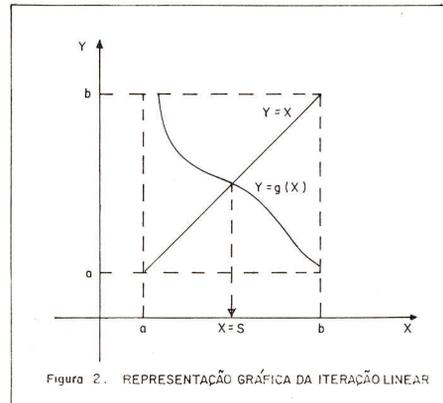
$$y = x$$

$$y = g(x)$$

Uma das equações representa uma reta e a outra é uma curva qualquer, que poderia ser também uma reta.

Uma raiz da equação $F(x) = 0$ será $x = s$ pertencente aos intervalos contínuos ($a \leq x \leq b$) e ($a \leq y \leq b$), que são definidos, na prática, pelas limitações conheci-

das (condições de contorno) dos problemas físico-químicos. O valor de s é pesquisado através de iterações e corresponde ao ponto de intercessão entre $y = x$ e $y = g(x)$ conforme a **figura 2**.



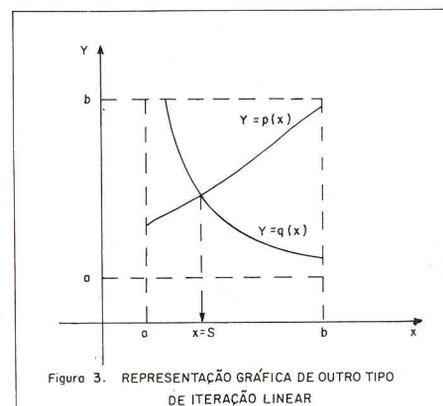
Outro desdobramento $F(x) = 0$ poderia gerar duas curvas quaisquer, ou seja:

$$p(x) = q(x) \text{ que resulta em}$$

$$y = p(x)$$

$$y = q(x)$$

Uma raiz da equação $F(x) = 0$ será $x = s$ pertencente aos intervalos contínuos ($a \leq x \leq b$) e ($a \leq y \leq b$) para valores físico-químicos coerentes. A intercessão de ambas as curvas fornecerá $x = s$, conforme a **figura 3**.



Massarani¹ sugere para este caso o emprego de métodos gráficos, após o tabelamento (por varredura) de valores de x , $p(x)$ e $q(x)$. Ele comenta que a precisão dos resultados a que conduz o método gráfico depende fundamentalmente da habilidade do desenhista. O método torna-se inadequado quando deseja-se obter as raízes com mais do que três algarismos significativos exatos.

EXEMPLO 3 — O calor específico do oxigênio, C_p , em cal/(gmol °K), é função da temperatura absoluta, T em °K. É representado pela equação:

$$C_p = 8,27 + 0,000258 T - \frac{187800}{T^2}$$

Qual será o valor da temperatura quando $C_p = 8,44$ cal/(gmol °K)? (Williams e Johnson⁸).

Solução: Fazendo $C_p = 8,44$ na equação acima e multiplicando ambos os lados por T^2 encontraremos:

$$0,000258 T^3 - 0,17 T^2 - 187800 = 0$$

Esta equação pode fornecer 3 raízes (ou 2 imaginárias e 1 real). Explicitando T :

$$T = 658,9 + 7,72 \times 10^8 \frac{1}{T^2}$$

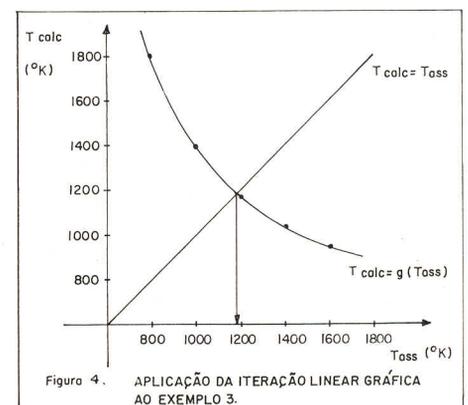
Poderemos encontrar o valor de T , através de iterações lineares, adotando o seguinte algoritmo.

- assumir um valor para T e aplicá-lo em T^2 ;
- calcular T no lado esquerdo da equação;
- tabelar T assumido e T calculado;
- plotar $y = T_{\text{assumido}}$
 $y = T_{\text{calculado}} = g(T)$.

Para o intervalo 800 a 1600°F encontraremos:

$T_{\text{ass.}}$	$T_{\text{calc.}}$
800	1797
1000	1386
1200	1164
1400	1030
1600	943

Pela **figura 4** encontraremos $T \cong 1180^\circ\text{K}$.

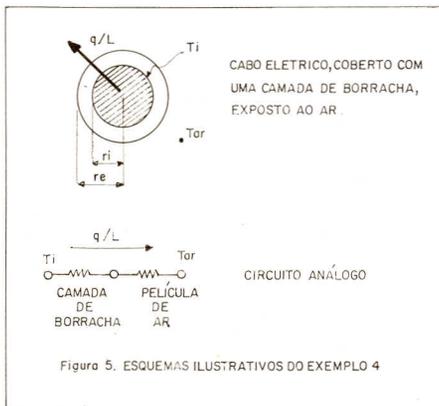


EXEMPLO 4 — Um cabo elétrico de 15 mm de diâmetro deverá ser isolado com uma camada de borracha, cuja condutividade térmica, k , é 0,134 kcal/(h m °C). O cabo estará ao ar livre (20°C), cujo coeficiente de película, h_e , é 7,32 kcal/(h m² °C). Qual é o valor do raio crítico da camada de isolante que deverá apresentar perda máxima de calor, se a temperatura da superfície do metal for 65°C? (Kreith⁹).

Solução: Pela Teoria da Transferência de Calor, sabemos que o raio crítico do isolante é determinado diretamente pela relação:

$$r_{ec} = \frac{k}{h_e}$$

Então, $r_{ec} = 0,134/7,32 = 0,0183 \text{ m} = 18,3 \text{ mm}$. Este mesmo resultado pode ser obtido graficamente, através da equação da taxa de transferência de calor por unidade de comprimento, válida para a **Figura 5**:



$$q = \frac{2 \pi k (T_i - T_{ar})}{L \left[\ln(r_e/r_i) + \frac{k}{h_e r_e} \right]}$$

$$= \frac{2(\pi) 0,134 (65-20)}{\ln\left(\frac{r_e}{7,5}\right) + \left(\frac{0,134}{7,32}\right) \left(\frac{100}{r_e}\right)}$$

$$\frac{q}{L} = \frac{37,89}{\ln(r_e/7,5) + \frac{18,3}{r_e}} \text{ kcal/h m}$$

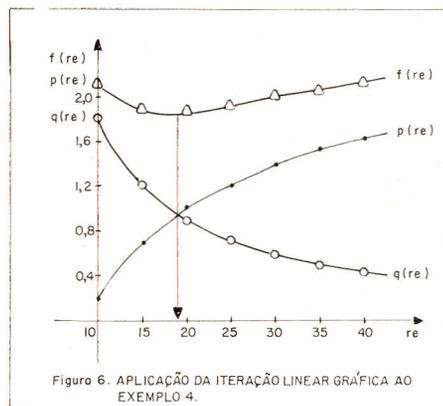
Desejamos encontrar o valor de r_e que forneça o valor máximo de (q/L) : isto ocorrerá quando o valor do denominador tender para zero. Em termos práticos é impossível anular o denominador mas é possível admitir que o mesmo possa atingir um valor mínimo para o raio crítico. Podemos, então, escrever:

$$f(r_e) = \ln\left(\frac{r_e}{7,5}\right) + \frac{18,3}{r_e} = p(r_e) + q(r_e)$$

Tabelando os valores de r_e entre 10 e 40 mm, encontramos:

r_e	$\ln\left(\frac{r_e}{7,5}\right)$	$\frac{18,3}{r_e}$	$f(r_e)$
10	0,29	1,83	2,12
15	0,69	1,22	1,91
20	0,98	0,92	1,90
25	1,20	0,73	1,93
30	1,39	0,61	2,00
35	1,39	0,52	2,06
40	1,54	0,46	2,13

Plotando estes resultados na **figura 6**:



Pelo gráfico: $r_{ec} \cong 18,5 \text{ mm}$. O resultado obtido também pode ser refinado, dependendo do intervalo de existência de r_e considerado ou da escala gráfica. O valor máximo da taxa unitária seria 20,03 kcal/(h m).

ITERAÇÕES POR ETAPAS OU CICLOS

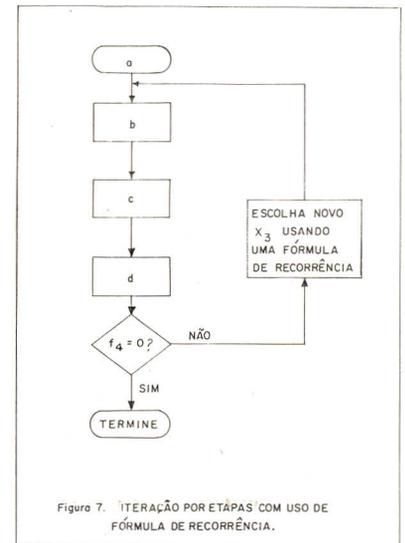
De acordo com Henley e Rosen¹⁰, seja o seguinte conjunto de quatro equações e quatro incógnitas:

$$\begin{aligned} f_1(x_2, x_3) &= 0 \\ f_2(x_2, x_3, x_4) &= 0 \\ f_3(x_1, x_2, x_3, x_4) &= 0 \\ f_4(x_1, x_2, x_4) &= 0 \end{aligned}$$

Podemos resolver simultaneamente estas quatro equações por meio de dois algoritmos muito parecidos:

1.º Algoritmo

- estimar um valor inicial para x_3 ;
- resolver x_2 em f_1 ;
- resolver x_4 em f_2 ;
- resolver x_1 em f_3 ;
- checar a estimativa de x_3 em f_4 ; se $f_4 = 0$ terminar;
- se $f_4 \neq 0$, assumir um novo valor para x_3 .



● Como escolher um novo valor para x_3 ?

Resposta: através de uma nova equação relacionada ao comportamento ou condições físicas do processo que gerou este sistema de equações, isto é, de uma **Fórmula de Recorrência**.

2.º Algoritmo

- estimar um valor inicial para x_3 ;
- resolver x_2 em f_1 ;

- c) resolver x_4 em f_2 ;
- d) resolver x_1 em f_4 ;
- e) resolver x_3 em f_2 para x_2, x_4, x_1 ;
- f) se $x_{3 \text{ novo}} = x_{3 \text{ anterior}}$ terminar;
- g) se $x_{3 \text{ novo}} \neq x_{3 \text{ anterior}}$ usar $x_{3 \text{ novo}}$ em f_1 e recomeçar o ciclo.

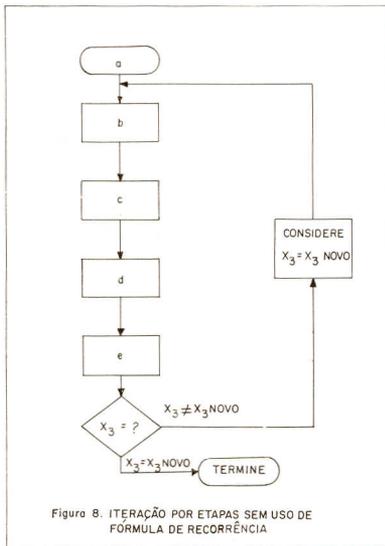


Figura 8. ITERAÇÃO POR ETAPAS SEM USO DE FÓRMULA DE RECORRÊNCIA

EXEMPLO 5 — Determinar o fluxo térmico numa parede plana composta por 3 materiais diferentes. São conhecidas as espessuras x_1, x_2 e x_3 dos materiais e as temperaturas nas faces externas. A condutividade térmica de cada camada é função linear da sua respectiva temperatura média de acordo com a expressão

$$k_i = A \bar{T}_i + B.$$

Solução:

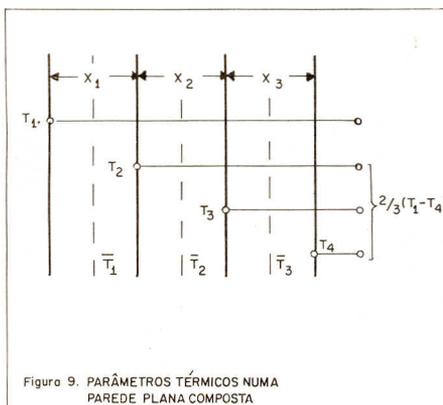


Figura 9. PARÂMETROS TÉRMICOS NUMA PAREDE PLANA COMPOSTA

As equações que descrevem o comportamento térmico da parede são:

$$Q = q/A = \frac{T_1 - T_4}{\frac{x_1}{k_1} + \frac{x_2}{k_2} + \frac{x_3}{k_3}} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} k_1 &= A_1 \bar{T}_1 + B_1 \\ k_2 &= A_2 \bar{T}_2 + B_2 \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} k_3 &= A_3 \bar{T}_3 + B_3 \\ \bar{T}_1 &= (T_1 + T_2)/2 \end{aligned} \quad (3)$$

$$\bar{T}_2 = (T_2 + T_3)/2 \quad (T_2 \text{ e } T_3 \text{ são desconhecidos})$$

$$\bar{T}_3 = (T_3 + T_4)/2$$

Admitindo regime permanente:

$$\begin{aligned} \frac{k_1}{k_1} (T_1 - T_2) &= \frac{k_2}{k_2} (T_2 - T_3) \\ &= \frac{k_3}{k_3} (T_3 - T_4) = Q \end{aligned}$$

$$\text{Daqui obtemos: } T_2 = T_1 \frac{Q x_1}{k} \quad (4)$$

$$\text{e } T_3 = T_4 + \frac{Q x_3}{k^3} \quad (5)$$

Os valores de T_2 e T_3 só poderão ser obtidos pelas equações (4) e (5) de Q for determinado previamente. Então, o problema exige que os cálculos sejam iniciados através da estimativa de Q ou de T_2 e T_3 (simultaneamente).

Esta situação permite estimar razoavelmente os valores de T_2 e T_3 porque T_1 e T_4 são conhecidos. Podemos admitir que a distribuição de temperaturas proporcione:

$$T_2 - T_4 = \frac{2}{3} (T_1 - T_4) \quad (6)$$

$$T_3 - T_4 = \frac{1}{3} (T_1 - T_4)$$

ALGORÍTMO

- a) fazer uma estimativa razoável para T_2 e T_3 e assumir $Q = 0$:

$$T_2 = T_4 + \frac{2}{3} (T_1 - T_4)$$

$$T_3 = T_4 + \frac{1}{3} (T_1 - T_4)$$

- b) determinar os valores de T_i com as equações (3);
- c) determinar os valores de k_i com as equações (2);
- d) usar a equação (1) para determinar o valor de QN ;
- e) verificar se $(QN - Q) < \epsilon$ (precisão escolhida pelo engenheiro);
- f) se $(QN - Q) > \epsilon$, utilize QN para calcular novos valores de T_2 e T_3 e considere $Q = QN$;
- g) repetir as etapas **b** até **f** enquanto $(QN - Q) > \epsilon$;
- h) se $(QN - Q) < \epsilon$, termine.

Este problema, com dados em unidades coerentes, foi resolvido, com o emprego de computador, programado na linguagem FORTRAN, por Hodge e Mantey¹¹.

EXEMPLO 6 — Valor a 400 psia e 600°F escoa numa velocidade de 100 pés/min através de uma linha de aço de 6 polegadas, n.º série 40 ($k = 27 \text{ BTU}/(\text{hr ft } ^\circ\text{F})$), que está coberta com uma camada de isolante de magnésia a 85% ($k = 0,004 \text{ BTU}/(\text{hr ft } ^\circ\text{F})$), cuja espessura é de 1,5 polegadas. O tubo é horizontal e está localizado numa sala cuja temperatura é 70°F. Calcular a temperatura da superfície externa do isolante, o coeficiente global de TC e a perda térmica por pé de comprimento do tubo (Chapman)¹².

Solução:

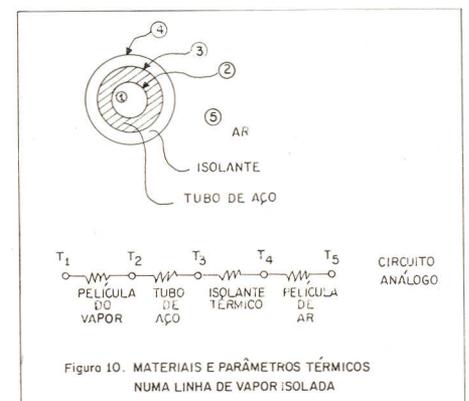


Figura 10. MATERIAIS E PARÂMETROS TÉRMICOS NUMA LINHA DE VAPOR ISOLADA

Considerações Iniciais:

O algoritmo global englobará os seguintes cálculos:

- 1.º — coeficiente de película do vapor;
- 2.º — coeficiente de película do ar;
- 3.º — coeficiente global de transferência de calor;
- 4.º — perda térmica por unidade de comprimento do tubo;

A determinação da temperatura da superfície externa do isolante está inserida no cálculo do coeficiente de película do ar.

Os fatores de depósito serão desprezados.

Cálculo do coeficiente de película do vapor:

Fluxograma:

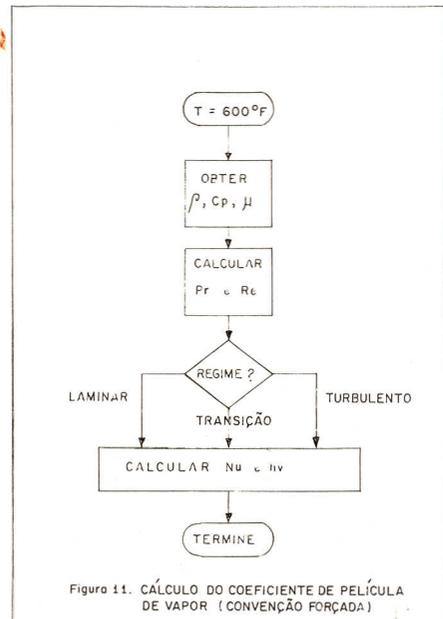


Figura 11. CÁLCULO DO COEFICIENTE DE PELÍCULA DE VAPOR (CONVECÇÃO FORÇADA)

Este algoritmo dispensa o uso de iterações porque as temperaturas do vapor superaquecido e do tubo de aço podem ser consideradas iguais.

Cálculo do coeficiente de película do ar

Temos duas incógnitas: a temperatura da superfície externa do isolante e o coeficiente de película do ar; Nos casos em que ocorre convecção livre (natural) em condições atmosféricas normais é possível adotar um valor tentativo de 1 BTU/(hr ft² °F) para o coeficiente de película do ar;

Fluxograma

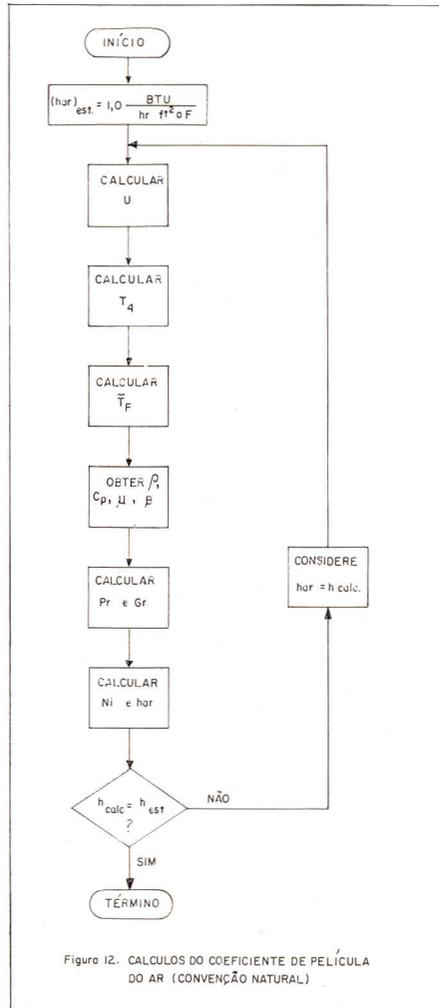


Figura 12. CÁLCULOS DO COEFICIENTE DE PELÍCULA DO AR (CONVECÇÃO NATURAL)

Resultados:

Admitindo D₂ = 0,505 ft, D₃ = 0,552 ft e D₄ = 0,802 ft

● cálculo de h_v

para o vapor a 400 psia e 600°F (Chapman⁽¹²⁾):

$\rho = 0,677 \text{ lbm/ft}^3$ $\mu = 0,0494 \text{ lbm/(ft hr)}$; $k = 0,0255 \text{ BTU/(hr ft}^\circ\text{F)}$

$R_c = \frac{Dv\rho}{\mu} = 4,15 \times 10^5$ (regime turbulento);

$P_r = \frac{C_p r}{k} = 1,12$;

admitindo (L/D) > 60, o cálculo de Nu é feito pela equação (10.50) apresentada por Perry e Chilton⁽²⁾:

$Nu = 0,036 R_c^{0,8} P_r^{1/3} = 1167,2$

$h_v = \frac{Nu}{D} \frac{k}{\text{hr ft}^2 \text{ }^\circ\text{F}} = 58,94$

(D → é um comprimento característico da geometria; é o diâmetro interno)

● cálculo de h_{ar}

$$U = \frac{1}{\frac{r_4}{r_2} h_v + \frac{r_4 \ln(r_3/r_2)}{k_{aco}} + \frac{r_4 \ln(r_4/r_3)}{k_{isolante}} + \frac{1}{h_{ar}}}$$

$U = 0,209 \text{ BTU/(hr ft}^2 \text{ }^\circ\text{F)}$

No regime permanente: $h_{ar} (T_4 - T_5) = U (T_1 - T_5)$

Então: T₄ = 181°F. Podemos checar a estimativa de h_{ar}:

$T_4 - T_5 = 181 - 70 \text{ }^\circ\text{F} \cong 110 \text{ }^\circ\text{F}$; $T_F = \frac{181 + 70}{2} \cong 125 \text{ }^\circ\text{F}$

$\beta = \frac{1}{T_{ar}} = \frac{1}{530 \text{ }^\circ\text{R}}$; $\rho = 0,0678 \text{ lbm/ft}^3$;

$k = 0,0163 \text{ BTU/(hr ft }^\circ\text{F)}$; $\mu = 0,0476 \text{ lbm/(ft hr)}$;

$c = 0,24075 \text{ BTU/(lbm }^\circ\text{F)}$; $P_r = 0,703$.

$Gr = \frac{D^3 \rho^2 g \beta \Delta T}{\mu^2} = 0,95 \times 10^8$

Podemos empregar a equação (10-32b) apresentada por Perry e Chilton², para tubos horizontais com diâmetro menor que 8 polegadas e calcular h_{ar} :

$$Nu = 0,53 (0,635 \times 10^3)^{0,25} e$$

$$h_{ar} \cong 0,955 \text{ BTU}/(\text{hr ft}^2 \text{ } ^\circ\text{F})$$

O coeficiente calculado é praticamente igual ao valor estimado.

● **cálculo da perda térmica por unidade de comprimento do tubo.**

$$\frac{q}{L} = \frac{A_4}{L} U(T_1 - T_s) =$$

$$276 \text{ BTU}/(\text{hr ft}).$$

CONVERGÊNCIA E DIVERGÊNCIA EM SISTEMAS DE EQUAÇÕES

Quando as iterações produzem aproximação que se aproximam mais e mais da solução, dizemos que o método iterativo converge. A convergência pode significar que as equações foram estudadas para intervalos de valores adequados para a descoberta da raiz. Quando as equações estão mal formuladas, ou quando os intervalos foram escolhidos de modo errado pode ocorrer divergência.

A convergência e a divergência podem ser lentas ou rápidas. Convém lembrar sempre que cada máquina digital possui sua própria precisão interna e os resultados de duas máquinas diferentes podem ser diferentes. Além disto, é necessário fixar uma precisão, para a comparação de dois valores sucessivamente obtidos pelo algoritmo, de modo a estabelecer um critério ou uma etapa de interrupção dos cálculos.

A **figura 13** apresenta os casos de convergência e divergência das iterações lineares.

EXEMPLO 7 — Resolver o sistema

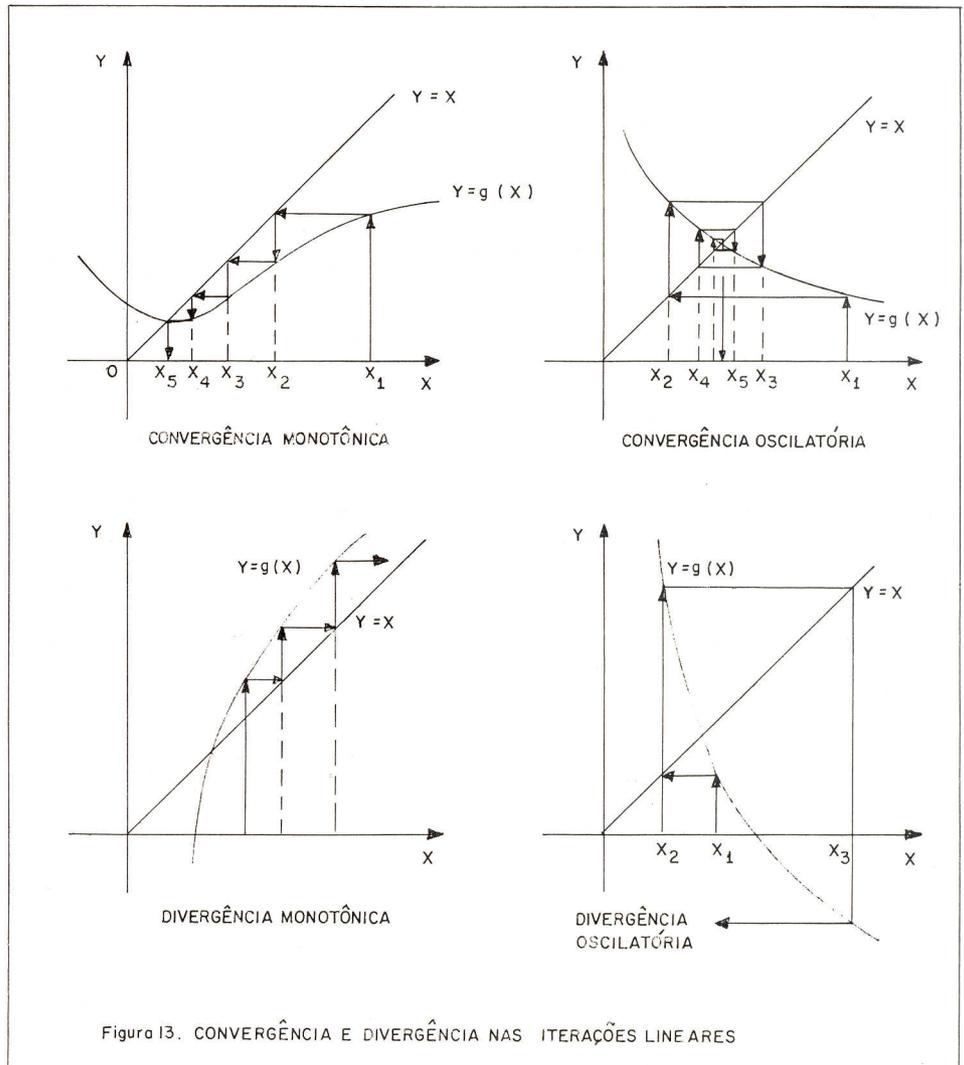


Figura 13. CONVERGÊNCIA E DIVERGÊNCIA NAS ITERAÇÕES LINEARES

equações abaixo:

$$3x + 2y = 2 \quad (a)$$

$$2x + 3y = 4$$

As duas equações representam linhas retas que se interceptam em algum ponto do plano x-y, cujas coordenadas desejamos conhecer. Segundo Franks¹³:

ALGORÍTMO

- a) estimar um valor inicial para y;
- b) obter x em (a) para y_i ;
- c) aplicar x em (b) e resolvê-la para y;
- d) com este novo y obter em (a) outro valor de x;
- e) repetir as etapas c, d até que os valores dos incrementos entre as iterações sejam desprezíveis.

Tabelando os resultados:

Iteração para $y_i = 3$	$X_{calc.}$	$Y_{calc.}$
1	— 1,33	2,22
2	— 0,81	1,88
3	— 0,58	1,72
4	— 0,48	1,65
5	— 0,44	1,62
6	— 0,42	1,61
7	— 0,40	1,60

O algoritmo convergiu para a solução do problema em seis ciclos ou iterações. Uma visão gráfica é oferecida pela **figura 14**:

Consideremos ainda o mesmo sistema de equações lineares:

$$3x + 2y = 2 \quad (a)$$

$$2x + 3y = 4 \quad (b)$$

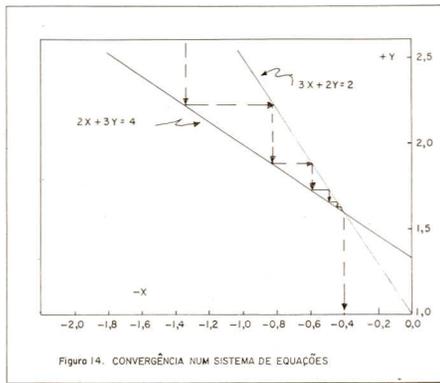


Figura 14. CONVERGÊNCIA NUM SISTEMA DE EQUAÇÕES

A equação (a) foi usada antes para fornecer x e a outra para y. Suponhamos o caso contrário com algoritmo semelhante para um valor arbitrário de $x_i = -2$.

Tabelando os novos resultados

Iteração para $x_i = 2$	$x_{calc.}$	$y_{calc.}$
1	-2	4
2	-4	7
3	-8,5	13,75
4	-18,63	28,94
5	-41,41	63,11

Plotando, obteremos a figura 15:

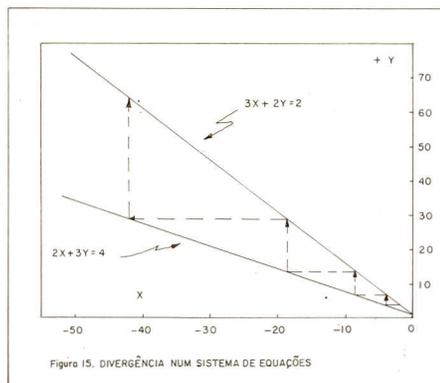


Figura 15. DIVERGÊNCIA NUM SISTEMA DE EQUAÇÕES

A divergência que ocorre neste caso é fácil de ser verificada tanto pela tabela como pelo gráfico. O engenheiro não deve preocupar-se com as razões matemáticas que provocam o fenômeno da divergência em equações lineares e não lineares, mas deve ser capaz de reconhecer ou admitir que um conjunto de equações pode ser mal agrupado (ou definido) provocando dificuldades desta espécie.

O fato importante é que se um conjunto de equações algébricas descreve um sistema físico estável, a se-

quência de cálculos pode resultar numa configuração estável, dentro daquilo que se denomina "arranjo natural".

Existem meios matemáticos que nos permitem obter configurações estáveis. Por exemplo: No caso de equações como (a) e (b) cada uma deve ser resolvida para a incógnita (x ou y) que possua o maior coeficiente.

Outro meio seria resolver cada equação para sua variável ou incógnita mais significativa.

REFINAMENTO DE RAÍZES

Os métodos de refinamento das raízes mais conhecidos são os da Bisseção ("Binary Search"), da Interpolação ("Regula Falsi"), da Secante e o da Tangente (Newton ou Newton-Raphson).

O método de Newton é o mais empregado na solução de equações algébricas e transcendentais por aliar à simplicidade de sua execução uma boa velocidade de convergência, e pode ser também empregado na determinação de raízes complexas¹. O método da tangente consiste em, a partir do primeiro valor tentativo da variável x, determinar a tangente à curva da função neste ponto e adotar como próxima estimativa a interseção desta com o eixo x, conforme a figura 16.

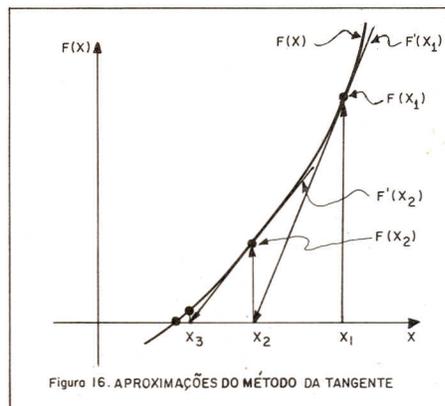


Figura 16. APROXIMAÇÕES DO MÉTODO DA TANGENTE

Tal método simplesmente permite ao engenheiro empregar a seguinte fórmula de recorrência:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{F(x_n)}{F'(x_n)}$$

Conforme já dissemos, um método de refinamento pode ser usado diretamente para a determinação das raízes.

EXEMPLO 8 — O gráfico de fatores de atrito, originalmente proposto por Moody, aparece em muitos livros de engenharia e catálogos de indústrias. É um instrumento muito útil para engenheiros envolvidos no dimensionamento de tubulações e nos problemas associados de escoamento de fluidos. Existem muitos problemas, entretanto, que requerem cálculos sucessivos de fatores de atrito. Se ao invés de empregarmos tabelas e gráficos usarmos relações analíticas será possível usar máquinas digitais. Sommerfeld¹⁴ sugeriu o seguinte procedimento para problemas envolvendo o fator de atrito:

Considerando que o gráfico de Moody foi também construído com base na equação de Colebrook.

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log_{10} \quad (1)$$

$$\frac{\epsilon}{3.7 D} + \frac{2.51}{Re \sqrt{f}}$$

onde ϵ/D = Rugosidade Relativa;

Re = Número de Reynolds;

f = Fator de Atrito de Moody.

Para calcular o fator de atrito, f, válido para escoamento turbulento, usando a equação acima é necessário empregar o Método de Newton, partindo-se de valores conhecidos de ϵ , D e Re . Para atingir este objetivo, torna-se necessário reescrever a equação da seguinte forma:

$$Y = x + 2 \log(A + Bx) \quad (2)$$

onde $x = 1/\sqrt{f}$ (3)

$$A = \epsilon / (3.7 D) \quad (4)$$

$$B = 2.51 + Re \quad (5)$$

O problema então será descobrir x tal que y = 0. Para usar o Método de Newton, a primeira derivada de Y com relação a x será:

$$Y' = \frac{dy}{dx} = 1 + \frac{2 B \log e_{10}}{A + B x} \quad (6)$$

Os valores tentativos de x serão obtidos da relação:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{Y(x_n)}{Y'(x_n)} \quad (7)$$

até que o valor de Y(x_n) esteja suficientemente próximo de zero. O valor correspondente de x será então substituído na equação (3) para calcular o fator de atrito.

EXEMPLO 9 — Pretende-se separar uma mistura de benzeno e tolueno, que contém 40 moles % de benzeno, para produzir um destilado com 90 moles % de benzeno no topo e um resíduo com um máximo de 10 moles % de benzeno. A alimentação é aquecida de maneira a entrar na coluna no seu ponto de bolha e o vapor que sai da coluna é condensado, mas não subesfriado, fornecendo refluxo e produto de topo. Deseja-se operar a unidade com uma razão de refluxo de 3 moles/mol de produto. Pede-se a determinação do número de pratos teóricos necessários e da posição de introdução da alimentação. O diagrama de equilíbrio para funcionamento à pressão de 1 atm está representado na **figura 17**, apresentado por Coulson e Richardson¹⁵.

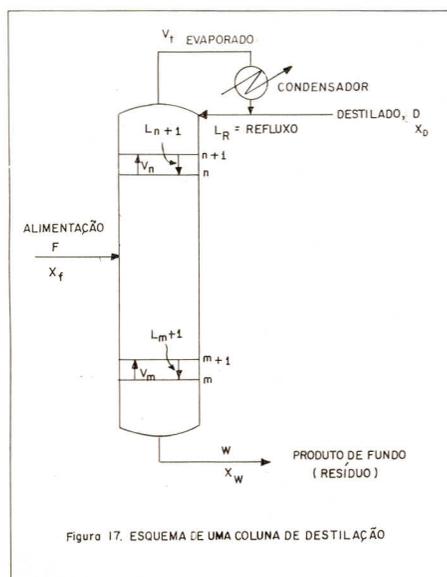


Figura 17. ESQUEMA DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Solução:

● Considerando uma alimentação de 100 moles, podemos fazer:

$$\text{Balanço material total: } 100 = D + W \quad (1)$$

$$\text{Balanço material do benzeno: } 100 \times 0,4 = 0,9 D + 0,1 W \quad (2)$$

Donde: W = 62,5 moles e D = 37,5 moles

$$\bullet \text{ Balanço material acima do prato } n: V_n = L_{n+1} + D \quad (3)$$

Sendo L_n = 3D = 112,5; então: V_n = 150

$$\text{Para o constituinte mais volátil: } Y_n V_n = L_{n+1} x_{n+1} + D x_d \quad (4)$$

$$\text{Portanto: } Y_n = \frac{L_{n+1}}{V_n} x_{n+1} + \frac{D}{V_n} x_d = \frac{L_n}{V_n} x_{n+1} + \frac{D}{V_n} x_d \quad (5)$$

Esta equação fornece uma relação do líquido existente em qualquer prato entre a composição do vapor, que ascende para o prato e a composição do líquido existente em qualquer prato acima do prato de alimentação. Assim:

$$Y_n = \frac{112,5}{150} x_{n+1} + \frac{37,5 (0,9)}{150} = 0,75 x_{n+1} + 0,225 \quad (6)$$

$$\bullet \text{ Balanço material abaixo do prato } m: L_m = V_m + W \quad (7)$$

Visto que a alimentação é toda de líquido à sua temperatura de ebulição, este descerá como um acréscimo de reflexo para o prato de baixo.

$$\text{Sendo: } L_m = L_n + F = 212,5; \text{ então: } V_m = 212,5 - 62,5 = 150 = V_n$$

$$\text{Para o Componente mais volátil: } Y_m V_m = L_m x_{m+1} - W x_w \quad (8)$$

$$\text{Então: } Y_m = \frac{L_{m+1}}{V_m} x_{m+1} - \frac{W}{V_m} x_w \quad (\text{Sendo } L_m = L_{m+1}) \quad (9)$$

$$\text{Assim: } Y_m = \frac{212,5}{150} x_{m+1} - \frac{62,5}{150} \times 0,1 = 1,415 x_{m+1} - 0,042 \quad (10)$$

As equações (6) e (10) representam as retas de operação acima e abaixo do prato de alimentação, respectivamente. Com tais equações e a equação representativa de uma curva de equilíbrio é possível calcular a composição da mistura nos diversos pratos da coluna, quer trabalhando a partir do refeedor e subindo até o condensador, quer no sentido contrário.

Observando-se que todo o vapor gerado na coluna é condensado, a composição do vapor do prato de topo, Y_t, tem de ser igual à do destilado, x_d, e à do refluxo, x_r. Pela curva de equilíbrio podemos calcular o valor de x_t, em equilíbrio com y_t.

Sendo y_t = 0,9; pela **figura 18**, x_t = 0,79. Pela equação (6) obtemos:

$$y_{t-1} = 0,75 (0,79) + 0,225 = 0,818;$$

x_{t-1} (obtido da curva de equilíbrio) é 0,644;

$$y_{t-2} = 0,75 (0,644) + 0,225 = 0,707; \text{ pela curva } x_{t-2} = 0,492;$$

$$y_{t-3} = 0,75 (0,492) + 0,225 = 0,594; \text{ daqui: } x_{t-3} = 0,382$$

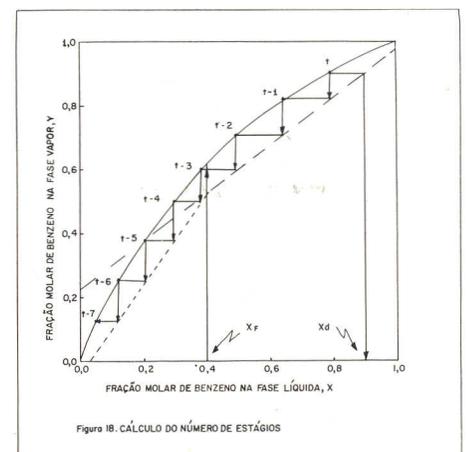


Figura 18. CÁLCULO DO NÚMERO DE ESTÁGIOS

Confie os estudos Químicos ao CPQ antes que sua Indústria se transforme em laboratório experimental.

O Centro de Pesquisas Químicas do IPEI, realiza estudos de processos químicos industriais, com a maior precisão, rapidez e economia.

Para isso, utiliza desde uma moderníssima usina-piloto até os mais sofisticados aparelhos de análise instrumental.

A usina-piloto realiza operações unitárias de destilação e retificação, absorção, filtração e centrifugação, secagem, evaporação, extração sólido-líquido, etc.

O CPQ possui ainda laboratório de pesquisa e um laboratório de controle e análises com todos os aparelhos necessários: analisador automático de CHNO, espectrofotômetros, cromatógrafos, liofilizador, densímetros, viscosímetros, reômetro universal, polarímetro, refratômetro, e uma série de outros.

O CPQ emite Certificado de Qualidade e oferece completa assistência, desde a pesquisa até a implantação da indústria.

Telefone, informe-se e venha até o CPQ. Sua indústria só tem a ganhar e custa bem pouco.

cpq

Centro de Pesquisas Químicas

INSTITUTO DE PESQUISAS E ESTUDOS INDUSTRIAIS
da Fundação de Ciências Aplicadas

Av. Humberto de Alencar Castelo Branco,
3972 - São Bernardo do Campo - SP
CEP 09700 - Caixa Postal 721
Fone 452-1155 - Ramal 243

Este último valor de composição está abaixo daquele especificado para a alimentação, a qual, portanto, deverá ser introduzida no prato $t-2$.

$$y_{t-4} = 1,415 (0,382) - 0,042 = 0,498; \text{ então: } x_{t-4} = 0,298$$

$$y_{t-5} = 1,415 (0,298) - 0,042 = 0,379; \text{ daqui: } x_{t-5} = 0,208;$$

$$y_{t-6} = 1,415 (0,208) - 0,042 = 0,252; \text{ portanto: } x_{t-6} = 0,12$$

$$y_{t-7} = 1,415 (0,120) - 0,042 = 0,127; \text{ deste ponto: } x_{t-7} = 0,048$$

da curva de equilíbrio; $x_{t-7} = 0,048$.

Este licor x_{t-7} é ligeiramente mais fraco do que o mínimo que é exigido e pode ser removido como resíduo. Portanto, x_{t-7} neste caso corresponderá ao refeedor e existirão sete estágios na coluna.

Neste caso as curvas de operação referentes às equações (6) e (10) representam linhas retas ligando y_n com x_{n+1} e y_m com x_{m+1} e podem ser traçadas no mesmo diagrama da curva de equilíbrio para proporcionar uma resolução gráfica quanto ao número de pratos necessários (método de McCabe-Thiele). Assim como as iterações numéricas conduziram às respostas, partindo de intervalos de existência conhecidos, o procedimento gráfico na forma de degraus entre as retas de operação e a curva de equilíbrio pode fornecer as informações desejadas conforme o exposto neste exemplo. Convém ressaltar que o número de iterações no método analítico corresponde ao número de pratos teóricos, onde a idéia de "aproximações sucessivas" foi aproveitada. No método gráfico tais aproximações para um sistema binário correspondem aos degraus e, portanto, aos estágios.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os métodos iterativos, aproximativos apresentados, apesar de constituírem o conjunto de técnicas mais empregadas pelos engenheiros químicos não esgotam o tema. Outros métodos tais como o de Gauss-Seidel, denominado "Iteração em Etapas Totais" por Perry e Chilton², ampliam consideravelmente o assunto e merecem uma apreciação em separado.

BIBLIOGRAFIA

1. Massarani, G., "Introdução ao Cálculo Numérico" Ao Livro Técnico S.A. — Rio de Janeiro (1967)..

Para a parte inferior da coluna usaremos a reta de operação da equação (10) empregando x_{t-3} .

2. Perry & Chilton, "Manual de Engenharia Química" 5.ª Guanabara Dois — Rio de Janeiro (1980).
3. McCracken, D. D. e Dorn, W. S., "Numerical Methods and Fortran Programming" John Wiley and Sons, Inc. — U.S.A. (1964).
4. LaFara, R., "Computer Methods for Science and Engineering" Intertext Books — Great Britain (1973).
5. Pacitti, T. & Atkinson, C. P., "Programação e Métodos Computacionais" Livros Técnicos e Científicos Editora S.A. — Rio de Janeiro (1976).
6. Santos, J. A. R. e Strawinski, V. M., "Processamento de Dados" LTC/EDUSP — Rio de Janeiro (1980).
7. Andersen, L. B. e Wenzel, L. A., "Introduction to Chemical Engineering" McGraw-Hill e Kogakusha — Tokyo (1961).
8. Williams, T. E. e Johnson R. C., "Stoichiometry for Chemical Engineers" McGraw-Hill e Kogakusha — Tokyo (1958).
9. Kreith, F., "Princípios da Transmissão de Calor" Editora Edgard Blücher Ltda. — São Paulo (1977).
10. Henley, J. E. e Rosen, E. M., "Material and Energy Balance Computations" John Wiley & Sons, Inc. — N. Y. (1969).
11. Hodge, B. e Mantey, J. P., "Applying FORTRAN to Engineering Problems" Chemical Engineering — July 29, (1968).
12. Chapman, A. L., "Heat Transfer", 3ª Macmillan e Collier — N. Y. (1974).
13. Franks, R. G. E., "Mathematical Modeling in Chemical Engineering" John Wiley & Sons, Inc. — N. Y. (1967).
14. Sommerfeld, J. T., "Equation for Fluid Friction Factor" Hydrocarbon Processing, July 1967, 46, N.º 7.
15. Coulson, J. M. e Richardson, J. F., "Tecnologia Química" Fundação Colouste Gulbenkian — Lisboa (1977).

Abraham Zakon — Engenheiro Químico e Mestre em Ciências pela Escola de Química da U.F.R.J. Exerceu atividades profissionais na Foster Wheeler Ltda. e na Abbott Laboratórios do Brasil Ltda. Lecionou "Análise de Dados Experimentais (Fortran)" para os alunos do Convênio Petrobrás/EQ-UFRJ. Atualmente leciona "Operações Unitárias da Indústria Química (Transmissão de Calor)" na Escola de Química da UFRJ para alunos do curso de graduação.

