Aula 9: Reações de 1ª ordem: sistema de equações acoplado

Professor: Emílio Graciliano Ferreira Mercuri, D.Sc.
Departamento de Engenharia Ambiental - DEA,
Universidade Federal do Paraná - UFPR
emiliomercuri@gmail.com

No estudo de reações e reatores para aplicações em Engenharia Ambiental eventualmente nos deparamos com Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs). O Objetivo dessa aula é apresentar técnicas de resolução de um sistema de equações acoplado que representa um caso da cinética química quando o equilíbrio da reação é reversível por algum motivo como alteração do pH, temperatura, salinidade, entre outros.

No final deste documento há uma lista de bibliografias para o estudo de reatores e uma lista de livros para o estudo de equações diferenciais ordinárias. Encorajo os(as) discentes a consultar estes documentos, são materiais complementares recomendados para a disciplina EAMB7014.

1 Cinética Química

A seguir iremos expressar matematicamente como modelar reações em que pode haver uma taxa para formação dos produtos e outra taxa para formação dos reagentes.

1.1 Sistema de equações diferenciais de 1ª ordem acoplado e linear

Considere uma reação de 2 componentes, X_1 e X_2, que podem ser elementos químicos ou moléculas. Até agora nós estudamos o caso irreversível da reação, quando o equilíbrio químico está deslocado para a direita:

$$X_1 \xrightarrow{\text{k}} X_2 \qquad \text{(caso irreversível)} \tag{1}$$

No estudo da cinética química, dependendo da variação do pH ou da temperatura, o equilíbrio da reação pode se deslocar para a esquerda ou para a direita. É razoável considerarmos o caso reversível da reação:

$$X_1 \underset{k_{21}}{\overset{k_{12}}{\leftrightarrows}} X_2 \qquad \text{(caso reversível)} \tag{2}$$

sendo que k_{21} e k_{12} são as constantes para as taxas de reações de 1ª ordem.

Para representar as concentrações, que podem variar no tempo t, serão usados os seguintes símbolos:

- $x_1(t)$: concentração do componente químico X_1 (em unidades consistentes: mol/L, mg/L, ...)
- $x_2(t)$: concentração do componente químico X_2 (em unidades consistentes: mol/L, mg/L, ...)

A expressão matemática para o balanço de massa da reação química 2 é:

$$\frac{dx_1}{dt} = -k_{21}x_1 + k_{12}x_2 \tag{3}$$

$$\frac{dx_2}{dt} = k_{21}x_1 - k_{12}x_2 \tag{4}$$

ou

$$\begin{aligned} x_1' &= -k_{21}x_1 + k_{12}x_2 \\ x_2' &= k_{21}x_1 - k_{12}x_2 \end{aligned} \tag{5}$$

O primeiro termo no lado direito de 3 representa a perda de X_1 devido à reação $X_1 \to X_2$, ele é proporcional à concentração de X_1, ou seja x_1, e a constante de proporcionalidade é a constante da taxa da reação k_{21}. O segundo termo no lado direito de 3 representa o ganho de X_1 devido à reação inversa $X_2 \to X_1$. O mesmo raciocínio é válido para os termos da Equação 4.

A dificuldade de resolver o sistema de equações 5 é o fato dele ser acoplado. Para resolvê-lo iremos utilizar diagonalização com autovalores e autovetores.

Podemos escrever o sistema acoplado 5 usando notação vetorial:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad , \quad \mathbf{x}' = \begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} -k_{21} & k_{12} \\ k_{21} & -k_{12} \end{bmatrix} \tag{6}$$

Portanto, o sistema de equações diferenciais acoplado 5 pode ser reescrito no formato matricial:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{A}\mathbf{x} \tag{7}$$

Questão de notação: $A \neq \mathbf{A}$, $x \neq \mathbf{x}$, note a utilização do negrito para denotar vetores ou matrizes.

Antes de concluir a resolução vamos relembrar o que é um problema de autovalor e autovetor.

2 Problema de autovalor-autovetor

O problema de autovalor-autovetor pode ser descrito por:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \tag{8}$$

sendo que $\mathbf{A}$ é uma matriz $n \times n$, $\mathbf{x}$ é um vetor com n componentes e λ é um escalar.

Multiplicando o lado direito da Equação 8 pela matriz identidade $\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & \cdots & 1 \end{bmatrix}_{n\times n}$, obtém-se:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{I}\lambda\mathbf{x} \tag{9}$$

Rearranjando:

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0} \tag{10}$$

O problema $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$ admite a solução trivial $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, mas não estamos interessados nela, as soluções triviais não dependem de λ.

Tem-se, portanto, o enunciado do problema de autovalor: dada a matriz $n \times n$ $\mathbf{A}$, iremos buscar os valores de λ (se existirem) tais que a Equação 10 admita uma solução não trivial e vamos encontrar tal solução.

Iremos adotar a seguinte terminologia:

- λ's $\rightarrow$ autovalores
- $\mathbf{e}$'s $\rightarrow$ autovetores associados aos λ's

Um resultado da Álgebra Linear é que o sistema linear de equações $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$ tem solução não trivial se, e somente se,

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0 \tag{11}$$

e a Equação 11 é conhecida como equação característica da matriz $\mathbf{A}$.

A equação característica tem n raízes no plano complexo, que são os autovalores λ's. A partir dos autovalores λ's é possível obter os autovetores $\mathbf{e}$'s.

3 Diagonalização

Voltando no sistema de equações diferenciais ordinárias acoplado e linear:

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) \tag{12}$$

Se a matriz $\mathbf{A}$ fosse diagonal o problema estaria resolvido pois teríamos um sistema de equações desacoplado, não é o caso do exemplo de reações químicas proposto. A técnica de diagonalização irá permitir desacoplar o sistema.

Para realizar a diagonalização parte-se de uma mudança de variáveis:

$$\mathbf{x} = \mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}} \tag{13}$$

sendo $\mathbf{Q}$ uma matriz de coeficientes constantes. A equação vetorial-matricial 13 pode ser aberta no sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{11} & \cdots & q_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ q_{n1} & \cdots & q_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widetilde{x}_1 \\ \vdots \\ \widetilde{x}_n \end{bmatrix} \tag{14}$$

Substituindo a Equação 13 na Equação 12:

$$(\mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}})' = \mathbf{A}\mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}} \tag{15}$$

Como $\mathbf{Q}$ é uma matriz de coeficientes constantes: $(\mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}})' = \mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}}'$.

$$\mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}}' = \mathbf{A}\mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}} \tag{16}$$

A matriz $\mathbf{Q}$ a princípio é arbitrária, não foi definido nenhum requisito para a existência dela até o momento. Portanto, podemos escolher $\mathbf{Q}$ como uma matriz inversível, ou seja, $\exists\, \mathbf{Q}^{-1}$. Multiplicando a Equação 16 à esquerda pela inversa de $\mathbf{Q}$:

$$\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}}' = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}} \tag{17}$$

$$\widetilde{\mathbf{x}}' = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q}\,\widetilde{\mathbf{x}} \tag{18}$$

Fazendo $\mathbf{D} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q}$:

$$\widetilde{\mathbf{x}}' = \mathbf{D}\,\widetilde{\mathbf{x}} \tag{19}$$

A ideia é encontrar $\mathbf{Q}$ tal que $\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q} = \mathbf{D}$ e $\mathbf{D}$ seja uma matriz diagonal.

Teorema 1: $\mathbf{A}$ é diagonalizável se e somente se $\mathbf{A}$ possuir n autovetores linearmente independentes (L.I.).

A prova dos teoremas apresentados neste material pode ser obtido no livro Greenberg, Michael D. Advanced engineering mathematics. Prentice-Hall, 1988.

4 Voltando à Cinética Química

Vamos simplificar um pouco mais a notação para facilitar a álgebra:

$$\begin{array}{lcl} x_1' = -k_{21}x_1 + k_{12}x_2 & \rightarrow & x' = -ax + by \\ x_2' = +k_{21}x_1 - k_{12}x_2 & \rightarrow & y' = +ax - by \end{array} \tag{20}$$

Note que $x = x_1$, $y = x_2$, $a = k_{21}$ e $b = k_{12}$.

Como se tratam de equações diferenciais lineares de 1ª ordem, buscaremos a solução no formato exponencial como uma tentativa:

$$\begin{array}{lcl} x(t) = q_1 e^{rt} & \rightarrow & x' = q_1 r e^{rt} \\ y(t) = q_2 e^{rt} & \rightarrow & y' = q_2 r e^{rt} \end{array} \tag{21}$$

Substituindo:

$$\begin{array}{lcl} q_1 r \cancel{e^{rt}} = -a\, q_1 \cancel{e^{rt}} + b\, q_2\, \cancel{e^{rt}} & \rightarrow & q_1 r = -a\, q_1 + b\, q_2 \\ q_2 r \cancel{e^{rt}} = a\, q_1 \cancel{e^{rt}} - b\, q_2\, \cancel{e^{rt}} & \rightarrow & q_2 r = a\, q_1 - b\, q_2 \end{array} \tag{22}$$

Escrevendo a Equação 22 no formato matricial:

$$\begin{bmatrix} -a & b \\ a & -b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix} = r \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix} \tag{23}$$

Reconhecemos que 23 é um problema de autovalor e autovetor: $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} -a & b \\ a & -b \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{r}_{\lambda} \underbrace{\begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}} \tag{24}$$

Encontrando os autovalores:

$$\begin{vmatrix} (-a-\lambda) & b \\ a & (-b-\lambda) \end{vmatrix} = 0 \tag{25}$$

$$\begin{aligned}
&(-a-\lambda)(-b-\lambda)-ab=0\\
&\cancel{ab}+a\lambda+b\lambda+\lambda^2-\cancel{ab}=0\\
&\lambda^2+\lambda(a+b)=0\\
&\lambda[\lambda+(a+b)]=0
\end{aligned} \tag{26}$$

Da Equação 26 obtém-se:

$$\begin{aligned}
&\lambda_1=0\\
&\lambda_2=-(a+b)
\end{aligned} \tag{27}$$

Para $\lambda_1 = 0$, substitui-se novamente o valor de λ no sistema linear de equações $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$:

$$\begin{bmatrix} -a & b \\ a & -b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{28}$$

Observe a matriz aumentada:

$$\begin{bmatrix} -a & b & | & 0 \\ a & -b & | & 0 \end{bmatrix} \tag{29}$$

Somando a primeira linha com a segunda linha da matriz aumentada, percebemos que a segunda linha é uma combinação linear da primeira linha, e o problema tem infinitas soluções. O sistema linear 29 é equivalente a:

$$\begin{bmatrix} -a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{30}$$

Portanto, fazendo $x_2 = \gamma = \alpha\, a$, podemos obter x_1:

$$-\,a\,x_1 + b\,\alpha\,a = 0 \qquad \rightarrow \qquad x_1 = b\,\alpha \tag{31}$$

$$\text{Conclui-se que para o autovalor} \quad \lambda_1 = 0 \quad \text{tem-se o autovetor} \quad \mathbf{e}_1 = \alpha \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} \tag{32}$$

Para $\lambda_2 = -(a + b)$, substitui-se novamente o valor de λ no sistema linear de equações $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$:

$$\begin{bmatrix} -a+a+b & b \\ a & -b+a+b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{33}$$

O sistema linear 33 é equivalente a:

$$\begin{bmatrix} b & b \\ a & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{34}$$

Multiplicando a primeira linha por $-\frac{a}{b}$ e somando na segunda linha:

$$\begin{bmatrix} b & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{35}$$

Portanto, fazendo $x_2 = -\beta$, podemos obter x_1:

$$b\,x_1 - b\,\beta = 0 \qquad \rightarrow \qquad x_1 = \beta \tag{36}$$

$$\text{Conclui-se que para o autovalor} \quad \lambda_2 = -(a+b) \quad \text{tem-se o autovetor} \quad \mathbf{e}_2 = \beta \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{37}$$

Voltando para a nomenclatura original das taxas:

$$\lambda_1 = 0, \mathbf{e}_1 = \alpha \begin{bmatrix} k_{12} \\ k_{21} \end{bmatrix}; \quad \lambda_2 = -\left(k_{12} + k_{21}\right), \mathbf{e}_2 = \beta \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{38}$$

<u>Teorema 2</u>: Se $\mathbf{A}$ tem n autovetores L.I., escolhendo $\mathrm{Q} = [\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n]$, obtém-se $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$.

O Teorema 2 basicamente garante que é possível realizar a diagonalização de um sistema linear quando os autovetores são linearmente independentes (L.I.).

Como os autovalores λ's são distintos, pois $k_{12} > 0$ e $k_{21} > 0$, o Teorema 2 garante que $\mathbf{A}$ é diagonalizável. Outra forma de perceber que $\mathbf{A}$ é diagonalizável é o fato de $\mathbf{e}_1$ e $\mathbf{e}_2$ serem linearmente independentes (L.I.).

Utilizando a mudança de variáveis $\mathbf{x} = \mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}}$, fazendo $\alpha = \beta = 1$ e montando a matriz $\mathbf{Q}$:

$$\mathrm{Q} = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2] = \begin{bmatrix} k_{12} & 1 \\ k_{21} & -1 \end{bmatrix} \tag{39}$$

A análise da diagonalização garante que:

$$\widetilde{\mathbf{x}}' = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}} = \mathbf{D}\widetilde{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \widetilde{\mathbf{x}} \tag{40}$$

Portanto, temos um sistema *desacoplado* (que é o nosso objetivo).

$$\begin{aligned} \widetilde{x}_1' &= \lambda_1 \widetilde{x}_1 \\ \widetilde{x}_2' &= \lambda_2 \widetilde{x}_2 \end{aligned} \tag{41}$$

A solução geral do sistema desacoplado é:

$$\begin{aligned} \widetilde{x}_1 &= C_1 e^{\lambda_1 t} = C_1 \\ \widetilde{x}_2 &= C_2 e^{\lambda_2 t} = C_2 e^{-(k_{12}+k_{21})t} \end{aligned} \tag{42}$$

Voltando para a variável inicial $\mathbf{x} = \mathbf{Q}\widetilde{\mathbf{x}}$:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{12} & 1 \\ k_{21} & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 e^{-(k_{12}+k_{21})t} \end{bmatrix} \tag{43}$$

Ou, escrevendo o sistema de equação no formato algébrico:

$$\begin{aligned} x_1(t) &= C_1 k_{12} + C_2 e^{-(k_{12}+k_{21})t} \\ x_2(t) &= C_1 k_{21} - C_2 e^{-(k_{12}+k_{21})t} \end{aligned} \quad \blacksquare \tag{44}$$

Foi dada ênfase na matemática ao invés da química e foi assumido que as taxas das constantes são conhecidas. As constantes de integração C_1 e C_2 podem ser obtidas com as condições iniciais do problema.

5 Exercícios propostos

"EXEMPLO: ENCONTRE OS AUTOVALORES E AUTOVETORES DE (2)

$$\underset{\sim}{A} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{l|l} x^3 - 7x^2 + 11x - 5 & x - 5 \\ \hline -x^3 + 5x^2 & x^2 - 2x + 1 \\ \hline -2x^2 + 11x - 5 & \\ \hline +2x^2 - 10x & \\ \hline x - 5 & \end{array}$$

EQ. CARACTERÍSTICA: $\det\left(\underset{\sim}{A} - \underset{\sim}{I}\lambda\right) = 0$

$$\det\left(\underset{\sim}{A} - \underset{\sim}{I}\lambda\right) = \begin{vmatrix} 2-\lambda & 2 & 1 \\ 1 & 3-\lambda & 1 \\ 1 & 2 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (2-\lambda)^2(3-\lambda) + 2 + 2 - \left[(3-\lambda) + 2(2-\lambda) + 2(2-\lambda)\right] = 0$$

$$(4 - 4\lambda + \lambda^2)(3-\lambda) + 4 - \left[3 - \lambda + 4 - 2\lambda + 4 - 2\lambda\right] = 0$$

$$12 - 12\lambda + 3\lambda^2 - 4\lambda + 4\lambda^2 - \lambda^3 + 4 - 11 + 5\lambda = 0$$

$$-\lambda^3 + 7\lambda^2 - 11\lambda + 5 = 0$$

$$\lambda^3 - 7\lambda^2 + 11\lambda - 5 = 0$$

ALGORITMO DE BRIOT-RUFFINI (REGRA DE RUFFINI): DIVISÃO DE POLINÔMIOS $\dfrac{P(x)}{Q(x)}$ ← BINÔMIO $(x-a)$

$P(x) = 1x^3 - 7x^2 + 11x - 5$

$Q(x) = x - 5$ (MINHA ESCOLHA: $a = 5$)

$$\begin{array}{c|cccc} a \downarrow & 1 & -7 & 11 & -5 \\ 5 & & & & \\ \hline (x) & 1 & & & \end{array}$$

← COEFICIENTES

(MONTAGEM DO ALGORITMO)

↖ REPITO O COEFICIENTE DE GRAU MAIS ALTO → x^3

$$\begin{array}{c|cccc} & 1 & -7 & 11 & -5 \\ 5 & & 5 & -10 & 5 \\ \hline & \underbrace{1 \quad -2 \quad 1}_{\text{COEFICIENTES}} & & & \underbrace{0}_{\text{RESTO}} \end{array}$$

$$\frac{x^3 - 7x^2 + 11x - 5}{(x-5)} = \underbrace{x^2 - 2x + 1}_{(x-1)^2} + 0$$

$\therefore$ $\lambda^3 - 7\lambda^2 + 11\lambda - 5 = 0$

$(\lambda - 5)(\lambda - 1)^2 = 0$ → AUTOVALORES DE $\underset{\sim}{A}$ SÃO $\lambda_1 = 5$

$\lambda_2 = 1$, $\lambda_3 = 1$ } MULTIPLICIDADE 2

Figura 1: Solução do Exercício Proposto

p/ $\lambda_1 = 5$: $\left(\underset{\sim}{A} - \lambda_1 \underset{\sim}{I}\right) \underset{\sim}{x}_1 = \underset{\sim}{0}$

$$\begin{bmatrix} (2-5) & 2 & 1 \\ 1 & (3-5) & 1 \\ 1 & 2 & (2-5) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -3 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 2 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

TÉCNICA DE ELIMINAÇÃO DE GAUSS

MATRIZ AUMENTADA

$$\left[\begin{array}{ccc|c} -3 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -3 & 0 \end{array}\right] \times(-1) \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -3 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & -4 & 0 \end{array}\right] L1+3L2$$

$L3 \leftarrow L2 \times (-1) + (L3)$ $\qquad$ $L2 \leftarrow L1 + 3L2$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} -3 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -4 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & -4 & 0 \end{array}\right] \times \qquad \left[\begin{array}{ccc|c} -3 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

$L3 \leftarrow L2 + L3$

$L2 \leftarrow -L2\left(\frac{1}{4}\right)$

$$\begin{bmatrix} -3 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \boxed{x_3 = \alpha} \text{ (ARBITRÁRIO)}$$

$x_2 - x_3 = 0 \rightarrow x_2 = x_3 \rightarrow \boxed{x_2 = \alpha}$

$-3x_1 + 2\alpha + \alpha = 0 \rightarrow -3x_1 = -3\alpha$

$\boxed{x_1 = \alpha}$

p/ $\lambda_1 = 5$ $\quad \underset{\sim}{e}_1 = \begin{bmatrix} \alpha \\ \alpha \\ \alpha \end{bmatrix} = \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

Figura 2: Solução do Exercício Proposto

③

p/ $\lambda_2 = 1$ $\quad \left(\underset{\approx}{A} - \lambda_2 \underset{\approx}{I}\right)\underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{0}$

$$\begin{bmatrix} 2-1 & 2 & 1 \\ 1 & 3-1 & 1 \\ 1 & 2 & 2-1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

ELIM. GAUSS:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \boxed{\begin{aligned} x_3 &= \beta \\ x_2 &= \gamma \end{aligned}} \qquad x_1 + 2\gamma + \beta = 0 \quad \boxed{x_1 = -\beta - 2\gamma}$$

$$\text{p/ } \lambda_2 = 1 \rightarrow \underset{\sim}{e_2} = \begin{bmatrix} -\beta - 2\gamma \\ \gamma \\ \beta \end{bmatrix} = \beta\begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} + \gamma\begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

p/ $\lambda_3 \rightarrow \underset{\sim}{e_3} = \underset{\sim}{e_2}$.

Figura 3: Solução do Exercício Proposto

Bibliografia sobre Reatores

- Nauman, E. Bruce. Chemical reactor design, optimization, and scaleup. John Wiley & Sons, 2008.
- Chapra, Steven C. Surface water-quality modeling. Waveland press, 2008.
- Introdução à Engenharia Ambiental, Tradução da 2ª Ed. norte-americana. P. Aarne Vesilind, Susan M. Morgan; revisão técnica de Carlos Alberto de Moya Figueira Netto e Lineu Belico dos Reis. São Paulo, Cengage Learning, 2011.
- Princípios de Engenharia Ambiental. Mackenzie L. Davis, Susan J. Masten. 3a ed. Porto Alegre: AMGH, 2016.
- Engenharia Ambiental: Fundamentos, Sustentabilidade e Projeto. Mihelcic, James R., Julie Beth Zimmerman, and Ramira Maria Siqueira da Silva Pires. Grupo Gen-LTC, 2000.
- Mihelcic, James R. Fundamentals of environmental engineering. 1999.
- Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka. OCEN 475/677 : Special Topics in Mixing and Transport in the Environment (Environmental Fluid Mechanics)

Bibliografia sobre Equações Diferenciais Ordinárias

- Rice, Richard G., and Duong D. Do. Applied mathematics and modeling for chemical engineers. John Wiley & Sons, 2012.
- Greenberg, Michael D. Advanced engineering mathematics. Prentice-Hall, 1988.
- Butkov, Eugene. Física matemática. Livros Técnicos e Científicos, 1988.