

Métodos Matemáticos Aplicados à Engenharia Química II

Lista de Exercícios 04 - Métodos Quase-Newton

Prof. Éliton Fontana

1) A equação de estado de Van der Waals é expressa por:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$

onde as constantes a e b são definidas em função das propriedades críticas do fluido avaliado:

$$a = \frac{27(RT_c)^2}{64P_c} \quad b = \frac{RT_c}{8P_c}$$

Para temperaturas e pressões inferiores às condições críticas ($T < T_c$, $P < P_c$), a equação possui três raízes reais. Para uma condição de saturação, a menor dela corresponde ao volume do líquido saturado, a maior ao volume do vapor saturado e a raiz intermediária corresponde a um estado instável e por isso não é considerada.

Para o dióxido de carbono, $T_c = 304.2 \text{ K}$ e $P_c = 73.85 \text{ bar}$. Para uma temperatura de $T = 273.15 \text{ K}$, a pressão de saturação é de $P = 34.851 \text{ bar}$. Utilize o método de Newton para estimar os volumes molares do líquido e do vapor saturado nestas condições. Para determinar o volume do vapor, utilize como condição inicial $V = RT/P$ e para determinar o volume do líquido utilize como condição inicial $V = 1.5b$. Considere $R = 83.14 \text{ cm}^3 \text{ bar mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Resolva cinco iterações para cada caso e compare com os valores obtidos com o método de Newton modificado.

R: Raiz Vapor: $V = 504.107 \text{ cm}^3/\text{mol}$ (Newton), $V = 510.665 \text{ cm}^3/\text{mol}$ (Newton modificado); Raiz líquido: $V = 82.8227 \text{ cm}^3/\text{mol}$ (Newton), $V = 82.148 \text{ cm}^3/\text{mol}$ (Newton modificado)

2) Utilize o método de Newton modificado para estimar a solução dos seguintes sistemas não-lineares com as condições iniciais especificadas. Compare com os valores obtidos com o método de Newton (lista de exercícios 03). Resolva três iterações.

a)

$$x^2 - 2x - y + 0.5 = 0$$

$$x^2 + 4y^2 - 4 = 0$$

$$\mathbf{x}^0 = (x^0, y^0) = (2, 0.25)$$

$$\mathbf{R}: \mathbf{x}^3 = (1.90073, 0.311254)$$

b)

$$x_1 - x_2 + 1 = 0$$

$$x_1^2 + x_2^2 = 4$$

$$\mathbf{x}^0 = (x_1^0, x_2^0) = (2, 1)$$

$$\mathbf{R}: \mathbf{x}^3 = (0.647495, 1.647495)$$

3) Utilize o método de Broyden para resolver os sistemas não-lineares apresentados no exercício 02, resolvendo pelo menos 2 iterações.

$$\mathbf{R}: (a) \mathbf{x}^2 = (1.90087, 0.310765)$$

$$\mathbf{R}: (b) \mathbf{x}^2 = (0.426448, 1.42645)$$