

MS211 - Cálculo Numérico - Projeto 1 (v1.0)

Entrega: 22/10/2019, às 14h:00, na sala de aula

(O trabalho poderá ser feito em grupos de até cinco pessoas.
Todos os alunos devem estar presentes na entrega.)

Questão 1

Projeto 1 - Método de Newton Discreto, do livro Cálculo Numérico, Ruggiero-Lopes, 2a Ed, (p. 206). Resolva a letra d) do Exercício 2 (p. 205) para $h = 10^{-2}$ e $h = 10^{-5}$

Questão 2

A relação entre a pressão (p) o volume (V) e a temperatura (T) de um gás *real* pode ser dada por uma equação de estado na forma $p = p(V, T)$ ou

$$\varphi(p, V, T) = 0, \quad (1)$$

com $\varphi(p, V, T)$ uma função não-linear obtida a partir da equação de estado. Assim, dado um par pressão-temperatura, o volume do fluido pode ser determinado por uma das raízes da equação não-linear (1). Esta raiz pode ser determinada, por exemplo, a partir do uso do método de Newton. Como condição de partida do algoritmo, pode ser empregado o volume inicial como sendo aquele ocupado por um gás ideal, sob mesmas condições de pressão e temperatura:

$$V_0 = \frac{nRT}{p}. \quad (2)$$

onde n é o número de moles e R é a constante universal dos gases, Uma vez determinada uma sequência convergente $\{V_0, V_1, \dots, V_n, \dots\}$, é encontrado o volume V . Um exemplo de lei de estado cúbica é a equação de estado de Van der Waals

$$\left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT. \quad (3)$$

onde a e b são constantes dependentes do gás representado. Neste caso, a função φ pode ser definida para um par pressão-temperatura prescritos, como sendo

$$\varphi(V) = (pV^2 + an^2)(V - nb) - nRTV^2.$$

Assim, dado o volume inicial V_0 como em (2), a sequência do método de Newton é gerada pela fórmula

$$V_{k+1} = V_k - \varphi(V_k) \left(\frac{d\varphi}{dV} \Big|_{V_k} \right)^{-1}. \quad (4)$$

- a) Assumindo que a equação (3) seja valida e utilizando a metodologia descrita acima, calcule o volume de um mol de gás carbônico ($n = 1$, $a = 0.3656$ e $b = 4.283 \times 10^{-5}$) para os seguintes casos (dado: $R = 8.3144621 \text{ J/K/mol}$)

- Terra: temperatura média $T = 288 \text{ K}$ e pressão atmosférica de $p = 101.325 \text{ Pa}$.
- Venus: temperatura média $T = 734 \text{ K}$ e pressão atmosférica de $p = 9.200.000 \text{ Pa}$

- b) Uma função de grande importância na representação de gases é o fator de compressibilidade Z , que pode ser definido como a razão entre o volume de n moles do gás sob pressão p e temperatura T e o volume ideal do mesmo número de moles sob as mesmas condições

$$Z = \frac{V}{V_0} = \frac{V}{(nRT)/p}. \quad (5)$$

Construa gráficos plotando os valores de Z do gás carbônico na Terra e em Vênus. Tome $n = 1$ e um intervalo $[0,1 \times p_{\text{atm}}; 10 \times p_{\text{atm}}]$, onde p_{atm} é a respectiva pressão atmosférica, subdividido em intervalos regulares de $0,1 \times p_{\text{atm}}$.

* **Extra:** A equação (3) é válida para o gás carbônico em Vênus?