

## Utilização dos Métodos Computacionais Newton Raphson na Resolução de Problemas de Engenharia Química

### *Use of Newton Raphson Computational Methods in Solving Chemical Engineering Problems*

Nicole Maia Argondizzi<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Aluna do Curso de Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Uberaba, Minas Gerais, Brasil. E-mail: d201811344@uftm.edu.br

**RESUMO:** O artigo apresenta o uso do método de Newton-Raphson de primeira ordem para resolver problemas de engenharia química, utilizando o *software Scilab*. O método de Newton-Raphson é um método iterativo que busca encontrar a raiz de uma função através de sucessivas aproximações. A escolha do método adequado para a resolução de sistemas de equações é importante para a eficiência e precisão das soluções obtidas. O objetivo do estudo é determinar as concentrações de cada componente envolvido no processo de oxidação de SO<sub>2</sub> a SO<sub>3</sub> em fase gasosa, para um reator CSTR de 5000L e vazão inicial igual a 100 L/min. Este artigo descreve os procedimentos metodológicos utilizados para criar um algoritmo prático que demonstre a aplicação do método de Newton-Raphson na engenharia química.

**Palavras-chave:** Reator de mistura, simulação, *scilab*, Newton-Raphson, modelagem.

**ABSTRACT:** The article presents the use of the first order Newton-Raphson method to solve chemical engineering problems, using the *Scilab* software. The Newton-Raphson method is an iterative method that seeks to find the root of a function through successive approximations. Choosing the appropriate method for solving systems of equations is important for the efficiency and accuracy of the solutions obtained. The objective of the study is to determine the concentrations of each component involved in the oxidation process from SO<sub>2</sub> to SO<sub>3</sub> in the gaseous phase, for a 5000L CSTR reactor and initial flow equal to 100 L/min. The article describes the methodological procedures used to create a practical algorithm that demonstrates the application of the Newton-Raphson method in chemical engineering.

**Keywords:** Mixing reactor, simulation, *scilab*, Newton-Raphson, modeling.

## INTRODUÇÃO

A resolução de sistemas de equações é um problema fundamental em diversas áreas da ciência e da engenharia, incluindo a modelagem e simulação de processos. Nesse sentido, a escolha do método mais adequado para a resolução de sistemas de equações é um fator crítico na eficiência e precisão das soluções obtidas.

O método de Newton-Raphson é um método iterativo que busca encontrar a raiz de uma função através de sucessivas aproximações. Este método é amplamente utilizado na

resolução de equações lineares e não lineares e converge rapidamente para uma solução precisa (BROWN,1967).

O método de Newton-Raphson de primeira ordem requer o cálculo da derivada da função, enquanto o método de Newton-Raphson de segunda ordem requer o cálculo da derivada segunda. O método de Newton-Raphson de segunda ordem é mais preciso, mas também é mais complexo e pode ser mais difícil de implementar. (AMARAL,2015)

Por outro lado, o método da Secante é uma variação do método de Newton-Raphson que não requer o cálculo da derivada da função. Em vez disso, ele utiliza uma aproximação da derivada com base em dois pontos adjacentes. Isso torna o método da Secante mais fácil de implementar do que o método de Newton-Raphson, mas também menos preciso e mais lento para convergir para uma solução precisa. (VETTER, 2006)

Portanto será utilizado o método de Newton-Raphson de primeira ordem para resolver o sistema de equações e obter as concentrações de cada componente. A escolha do método mais adequado para a resolução de sistemas de equações depende de vários fatores, como a precisão desejada, a complexidade da função e o esforço computacional disponível. O método de Newton-Raphson de primeira ordem é uma opção eficiente para sistemas complexos, sendo mais fácil de implementar do que a versão de segunda ordem. Comparado ao método da Secante, o método de Newton-Raphson de primeira ordem é mais preciso e converge mais rapidamente para uma solução precisa, mas requer o cálculo da derivada da função, o que pode ser uma limitação em algumas situações.

O objetivo do presente estudo é determinar as concentrações de cada componente envolvido no processo de oxidação de SO<sub>2</sub> a SO<sub>3</sub> em fase gasosa considerando o exemplo apresentado no texto: determinar as concentrações de cada componente no processo de oxidação de SO<sub>2</sub> a SO<sub>3</sub> em fase gasosa, para um reator CSTR de 5000L e vazão inicial igual a 100 L/min. (FOGLER, Elementos De Engenharia das Reações Químicas, 4 ed – Exercício Adaptado)

## PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

### Métodos Utilizados:

Foi criado um algoritmo prático para demonstrar a aplicação do método de Newton-Raphson na engenharia química utilizando o *software Scilab*. De acordo com Nunes, o método de Newton-Raphson funciona expandindo a função  $f(x)$  pela série de Taylor, conforme a equação (1):

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \frac{f'(x) \cdot \Delta x}{1!} + \frac{f''(x) \cdot \Delta x^2}{2!} + \frac{f'''(x) \cdot \Delta x^3}{3!} + \dots + \frac{f^{(n)}(x) \cdot \Delta x^n}{n!} \quad (1)$$

Aproximando a expressão do primeiro termo da expansão, para  $\Delta x \rightarrow 0$ , teríamos a seguinte equação (2) aproximada:

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x) \Delta x \quad (2)$$

Deste modo, foi obtido o erro ( $\varepsilon$ ) dado pela equação (3):

$$\varepsilon = \frac{f''(x) \cdot \Delta x^2}{2!} \quad (3)$$

Desse modo, para funções multivariadas  $f(x_1, x_2, \dots)$  aproximando a expressão do primeiro termo da expansão, para  $(\Delta x_1 \rightarrow 0, \Delta x_2 \rightarrow 0, \dots)$  obtém-se a equação (4):

$$\begin{aligned} f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2, \dots, x_n + \Delta x_n) \\ = f(x_1, x_2, \dots, x_n) + \frac{\partial f \cdot \Delta x_1}{\partial x_1 \cdot 1!} + \frac{\partial f \cdot \Delta x_2}{\partial x_2 \cdot 1} + \dots + \frac{\partial^2 f \cdot \Delta x^2_1}{\partial x^2_1 \cdot 2!} \\ + \frac{\partial^2 f \cdot \Delta x^2_2}{\partial x^2_2 \cdot 2!} + \dots + \frac{\partial^2 f \cdot \Delta x^2_n}{\partial x^2_n \cdot n!} \end{aligned} \quad (4)$$

Portanto para um determinado sistema de equações, tem-se:

$$f_1(x_1 + \Delta x_1, \dots) = f_1(x_1, \dots, x_n) + \frac{\partial f_1 \cdot \Delta x_1}{\partial x_1 \cdot 1!} + \frac{\partial f_1 \cdot \Delta x_2}{\partial x_2 \cdot 1} + \dots + \frac{\partial f_1 \cdot \Delta x_n}{\partial x_n \cdot 1!} \quad (5)$$

$$f_2(x_1 + \Delta x_1, \dots) = f_2(x_2, \dots, x_n) + \frac{\partial f_2 \cdot \Delta x_1}{\partial x_1 \cdot 1!} + \frac{\partial f_2 \cdot \Delta x_2}{\partial x_2 \cdot 1} + \dots + \frac{\partial f_2 \cdot \Delta x_n}{\partial x_n \cdot 1!} \quad (6)$$

$$f_3(x_1 + \Delta x_1, \dots) = f_3(x_2, \dots, x_n) + \frac{\partial f_3 \cdot \Delta x_1}{\partial x_1 \cdot 1!} + \frac{\partial f_3 \cdot \Delta x_2}{\partial x_2 \cdot 1} + \dots + \frac{\partial f_3 \cdot \Delta x_n}{\partial x_n \cdot 1!} \quad (7)$$

Com isto escrevendo na forma matricial dado que  $(\Delta x = x_f - x_i)$ :

$$A \cdot \Delta x = B \quad (8)$$

Assim obteve-se a forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_3}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \Delta x_3 \\ \vdots \\ \Delta x_n \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} f_1(x_1, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, \dots, x_n) \\ f_3(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) \end{bmatrix}$$

Deste modo  $A \cdot \Delta x = B$ , isolando (x) final, chegasse no seguinte método iterativo, representado pela equação (9):

$$X^{(i+1)} = X^{(i)} - A^{(-1)} \cdot B \quad (9)$$

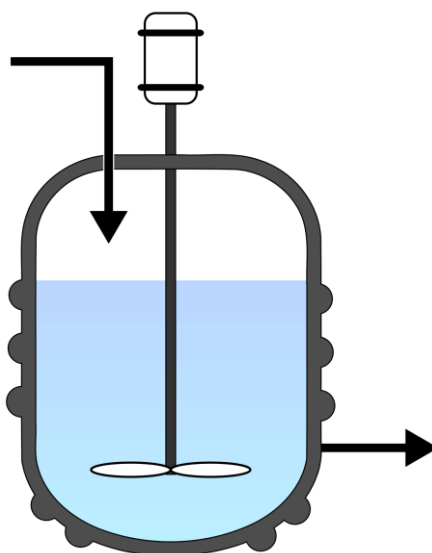
Assim sendo, o método foi implementado ao problema abordado neste artigo.

### Exercício Adaptado:

O sistema é composto por um reator CSRT, figura 1, operando de forma adiabática onde ocorre a seguinte reação dada na equação (10):



**Figura 1.** Reator CSRT



Fonte: MRABET, 2009.

Para a resolução do problema abordado foram feitas as seguintes hipóteses:

H1: Mistura perfeita.

H2: Densidade constante e iguais.

H3: Volume constante.

Assim utilizando o *software SCILAB*, foram implementadas as seguintes equações feitas por balanço de massa por componentes demonstradas a seguir:

$$\frac{dCa}{dt} = \frac{Ca_e \cdot Fe - Ca \cdot Fs}{V} - K \cdot Ca \cdot Cb^{1/2} \quad (12)$$

$$\frac{dC_b}{dt} = \frac{C_{be} \cdot Fe - C_b \cdot Fs}{V} - 1/2 K \cdot Ca \cdot C_b^{1/2} \quad (13)$$

$$\frac{dC_c}{dt} = \frac{C_{ce} \cdot Fe - C_c \cdot Fs}{V} + K \cdot Ca \cdot C_b^{1/2} \quad (14)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{C_{ce} \cdot Fe - C_c \cdot Fs}{V} \quad (15)$$

**Figura 2.** Parâmetros, definição e valores.

Parâmetro	Definição	Valores
P	Pressão	1485 kPa
T	Temperatura	227°C
Fe, Fs	Vazão	100 L/min
V	Volume	5000 L
K	Constante Cinética	0,01 L <sup>(1/2)</sup> /mol <sup>(1/2)</sup> *min
Yao	Porcentagem de entrada	0,28
Yar	Porcentagem de entrada	0,72
Cao	Concentração inicial	0,1 mol/L

Fonte: Dos Autores, 2023.

Desse modo, utilizando o método de Newton-Raphson, foi determinado a matriz Jacobiana (A) e, por meio do método iterativo da equação (9) foi determinada a concentração de cada componente no estado estacionário.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

As equações, os parâmetros e o algoritmo foram implementados no *scilab* e com as funções obteve-se os valores das concentrações em estado estacionário representado na figura 3.

**Figura 3.** Concentrações por componente no estado estacionário

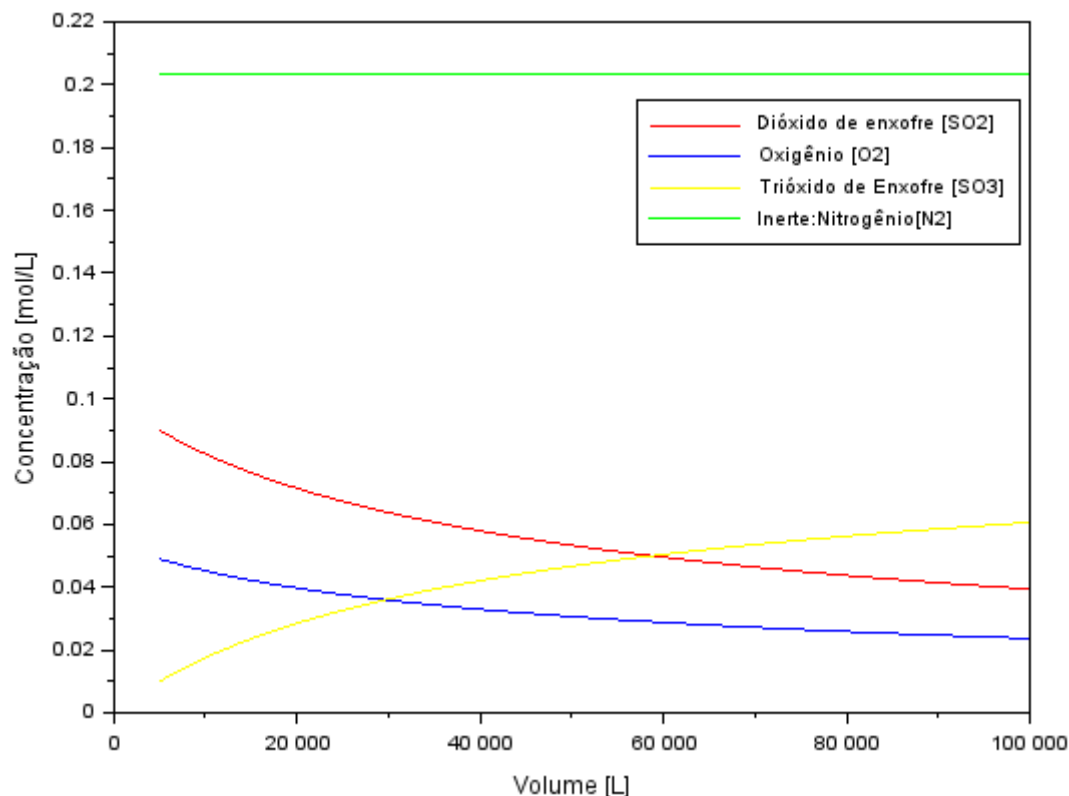
```
Concentrações em estado estacionário:
SO2: 0.090033 mol/L
O2: 0.049017 mol/L
SO3: 0.009967 mol/L
Inerte-Nitrogênio[N2]: 0.203200 mol/L
```

Fonte: Dos Autores, 2023.

Contudo, o número de iterações necessários para determinar o valor destas concentrações foi igual a 2. Com isto, foi realizado um experimento para se determinar a

variação do volume do reator em correlação com as concentrações em estado estacionário, representado na figura 4.

**Figura 4** – Respectivas concentrações em estado estacionário em função do volume do reator.



Fonte: Dos Autores, 2023.

O experimento realizado demonstrou que, à medida que o volume do reator CSTR aumentou, houve um consumo proporcional da concentração de SO<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>, conforme evidenciado na figura 4. Além disso, a concentração de SO<sub>3</sub> aumentou, enquanto a concentração do inerte permaneceu estável. Esses resultados sugerem uma relação direta entre o volume do reator e as concentrações dos gases envolvidos no processo químico.

## CONCLUSÕES

Em conclusão, o método de Newton-Raphson de primeira ordem se mostrou uma opção eficiente e precisa para resolver sistemas complexos de equações na engenharia química, como no caso do exemplo apresentado de oxidação de SO<sub>2</sub> a SO<sub>3</sub> em fase gasosa. Embora o método de segunda ordem seja ainda mais preciso, ele pode ser mais difícil de implementar. Por outro lado, o método da Secante é mais fácil de implementar, mas menos preciso e mais lento para convergir para uma solução precisa. A escolha do método mais adequado depende das necessidades do problema em questão, como a precisão desejada e o esforço computacional disponível. A utilização de softwares como o Scilab pode facilitar

a aplicação desses métodos computacionais na resolução de problemas de engenharia química, permitindo uma maior eficiência e precisão nas soluções obtidas.

## REFERÊNCIAS

- [1] Luyben, W. L. (2017). **Modelagem, Simulação e Controle de Processos para Engenheiros Químicos**. Educação McGraw-Hill.
- [2] KUMAR, Pramod; BABU, B. V. **Modeling and Simulation of Continuous Stirred Tank Reactors (CSTRs) with Jacket Cooling**. International Journal of Chemical Engineering and Applications, v. 2, n. 6, p. 382-387, 2011.
- [3] Fogler, H. S. (2016). **Elementos de Engenharia de Reações Químicas**. Pearson.
- [4] Himmelblau, D.M., & Riggs, J.B. (2012). **Princípios básicos e cálculos em engenharia química**. Pearson Educação.
- [5] Seider, W.D., Seader, J.D., Lewin, D.R., & Widagdo, S. (2017). **Princípios de design de produtos e processos: síntese, análise e avaliação**. John Wiley & Filhos.
- [6] SOUSA, N. G. **Principais funções para a simulação de modelos**. 2022. 23p. Material de aula (Disciplina Modelagem e simulação de processos I) - Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Departamento de Engenharia Química, Uberaba, MG, 2022.
- [7] Viana, G.V.R, **Métodos Iterativos para Resolução de Sistemas de Equações Não Lineares**, R. Cient. Fac. Lour. Filho, v. 1, n. 1, (2001). Disponível em: <<https://silo.tips/download/metodos-iterativos-para-resoluao-de-sistemas-de-equacoes-nao-lineares>>. Acesso em: 18 de Março de 2023.
- [8] NUNES, R. S, et al. **INTERFACE GRÁFICA PARA OBTENÇÃO DE TRAJETÓRIAS DE SOLUÇÕES DE SISTEMAS NÃO LINEARES POR MEIO DO MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON MODIFICADO**. DINCON, 2011. Disponível em: <[http://metaeventos.net/inscricoes/formularios\\_off/resumo\\_preenchido/DINCON/17\\_06\\_2011\\_08\\_06\\_36\\_renato\\_interface\\_grca\\_MNM.pdf](http://metaeventos.net/inscricoes/formularios_off/resumo_preenchido/DINCON/17_06_2011_08_06_36_renato_interface_grca_MNM.pdf)>. Acesso em: 18 de Março de 2023.
- [9] VETTER, Narã Vieira; SANTOS, Guilherme Paiva Silva; MARQUES, Rafael Pereira. Método da Secante Para Resolução de equações do tipo  $f(x) = 0$ . O SEGeT–Simpósio de Excelência em Gestão e Tecnologia, v. 1, p. 1-9, 2006.
- [10] AMARAL, Cleyton; SOUZA, Marcus; CATALAN, Thiago. Um estudo do método de newton-raphson. Revista eletrônica matemática e estatística em foco, 2015.
- [11] GYassineMrabetTalk. **Continuous stirred-tank reactor symbol**. 27 de outubro de 2009. Disponível em: <[https://pt.m.wikipedia.org/wiki/Ficheiro:Continuous\\_bach\\_reactor\\_CSTR.svg](https://pt.m.wikipedia.org/wiki/Ficheiro:Continuous_bach_reactor_CSTR.svg)>. Acesso em: 18 de Março de 2023.