CENTRO UNIVERSITÁRIO DA FEI
MESTRADO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Vitor Stabile Garcia N° 417121-1

Resolução Lista de Exercícios 03
Métodos Matemáticos em Engenharia Química
Luís F. Novazzi

São Bernardo do Campo

1° Período de 2017

1) Resolver o Exemplo 1.2 do Constantinides, p.28.

Example 1.2: Finding a Root of an *n*th-Degree Polynomial by Newton-Raphson Method Applied to the Soave-Redlich-Kwong Equation of State. Develop a MATLAB function to calculate a root of a polynomial equation by Newton-Raphson method. Calculate the specific volume of a pure gas, at a given temperature and pressure, by using the Soave-Redlich-Kwong equation of state

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a\alpha}{V(V + b)}$$

The equation constants, a and b, are obtained from

$$a = \frac{0.4278\, R^2 T_C^2}{P_C}$$

$$b = \frac{0.0867\, R\, T_C}{P_C}$$

where T_C and P_C are critical temperature and pressure, respectively. The variable α is an empirical function of temperature:

$$\alpha = \left[1 + S\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_C}}\right)\right]^2$$

The value of S is a function of the acentric factor, ω, of the gas:

$$S = 0.48508 + 1.55171\,\omega - 0.15613\,\omega^2$$

The physical properties of *n*-butane are:

$$T_C = 425.2\ K, \qquad P_C = 3797\ kPa, \qquad \omega = 0.1931$$

and the gas constant is:

$$R = 8314\ J/kmol.K.$$

Calculate the specific volume of *n*-butane vapor at 500 K and at temperatures from 1 to 40 atm. Compare the results graphically with the ones obtained from using the ideal gas law. What conclusion do you draw from this comparison?

O exercício foi realizado em forma de Script, para melhor compreender o método de Newton-Raphson, e vermos o passo a passo do método.
Devemos escrever a função de SRK, passando o termo P para o outro lado da equação, e também escrever sua derivada.

$$f(x) = -P + \frac{R.T}{V-b} - \frac{a.\alpha}{V(V+b)}$$

$$f(x+dx) = -P + \frac{R.T}{(V+dx)-b} - \frac{a.\alpha}{(V+dx)((V+dx)+b)}$$

$$f'(x) = \lim_{dx \to 0} \frac{f(x+dx) - f(x)}{dx}$$

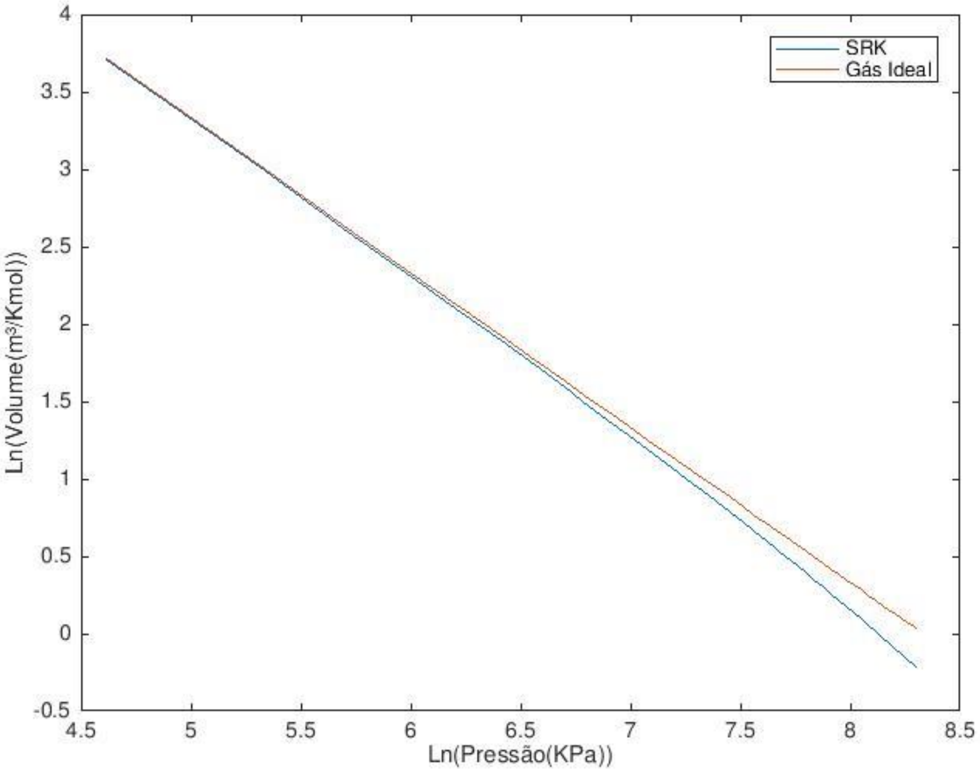
Formula de Newton-Raphson

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Escrevendo o Script

```
i = 0;
%iremos utilizar um For, para o Calculo de cada V, para cada P, mantendo
a Temperatura constante
for P = 101325:101325:4053000 %(Pa)
i = i+1;
%Chute Inicial
V = 1; %(M³/Kmol)
%Parametros de Entreda do n-butano
T = 500; %(K)
R = 8314; %(J/Kmol)
Tc = 425.2; %(K)
Pc = 3797000; %(Pa)
%Passo Utilizado para a Derivada
dx = 0.5;
%Fator acentrico
fatoracentrico = 0.1931;
%Calculo do alfa
alfa = (1+((0.48508+1.55171*(fatoracentrico)-
0.15613*(fatoracentrico^2))*(1-sqrt(T/Tc))))^2;
%Calculo dos parametros a e b
a = (0.4278*(R^2)*(Tc^2))/Pc;
b = (0.0867*R*Tc)/Pc;
%Escrevendo a função f(x) de SRK
f = -P+((R*T)/(V-b))-((a*alfa)/(V*(V+b)));
%Enquanto a função de SRK não for menor que a tolerancia de 10^-6.
while abs(f)>10e-6
%Calculando f(x+dx)
derivada = -P+((R*T)/((V+dx)-b))-((a*alfa)/((V+dx)*((V+dx)+b)));
%Calculando f'(x)
der = (derivada-f)/dx;
%Calculando o novo V com a formula de Newton-Raphson
V = V - f/der;
%Calculando f(x) novamente, com o novo valor de V
```

```
f = -P+((R*T)/(V-b))-((a*alfa)/(V*(V+b)));
VSoave_Redlich_Kwong(i) = V;
end
end
VSoave_Redlich_Kwong;
k = 0;
%Calculando V com a formula P.V=R.T para as mesma pressões
for P = 101325:101325:4053000
    k = k+1;
    %V = (R.T)/P
    Videal = (R*T)/P;
    Vgasideal(k) = Videal;
end
Vgasideal;
%Plotando o Gràfico de Ln(V) Vs Ln(P), comparando o desvio de V calculado
para um gãs Ideal, e com a Formula de SRK
x = (101.325):(101.325):(4053.000);
x = log(x);
y1 = log(VSoave_Redlich_Kwong);
plot(x,y1)
hold on
y2 = log(Vgasideal);
plot (x,y2)
xlabel('Ln(Pressão(KPa))')
ylabel('Ln(Volume(m³/Kmol))')
legend('SRK','Gás Ideal')
```



2) Resolver o Exercício 1.3 do Constantinides, p.53.

Repeat Example 1.2 by using the Benedict-Webb-Rubin (BWR) and the Patel-Teja (PT) equations of state. Compare the results with those obtained in Example 1.2.

Benedict-Webb-Rubin equation of state:

$$P = \frac{RT}{V} + \frac{B_0RT - A_0 - (C_0/T^2)}{V^2} + \frac{bRT - a}{V^3} + \frac{a\alpha}{V^6} + \frac{c}{V^3T^2}\left(1 + \frac{\gamma}{V^2}\right)e^{-\gamma/V^2}$$

where A_0, B_0, C_0, a, b, c, α, and γ are constants. When P is in atmosphere, V is in liters per mole, and T is in Kelvin, the values of constants for n-butane are:

$A_0 = 10.0847$	$B_0 = 0.124361$	$C_0 = 0.992830\times10^6$
$a = 1.88231$	$b = 0.0399983$	$c = 0.316400\times10^6$
$\alpha = 1.10132\times10^{-3}$	$\gamma = 3.400\times10^{-2}$	$R = 0.08206$

Patel-Teja equation of state:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V(V + b) - c(V - b)}$$

where a is a function of temperature, and b and c are constants

$$a = \Omega_a(R^2T_c^2/P_c)\left[1 + F(1 - \sqrt{T_R})\right]^2$$

$$b = \Omega_b(RT_c/P_c)$$

$$c = \Omega_c(RT_c/P_c)$$

where

$$\Omega_c = 1 - 3\zeta_c$$

$$\Omega_a = 3\zeta_c^2 + 3(1 - 2\zeta_c)\Omega_b + \Omega_b^2 - 1 - 3\zeta_c$$

and Ω_b is the smallest positive root of the cubic

$$\Omega_b^3 + (2 - 3\zeta_c)\Omega_b^2 + 3\zeta_c^2\Omega_b - \zeta_c^3 = 0$$

F and ζ_c are functions of the acentric factor given by the following quadratic correlations

$$F = 0.452413 + 1.30982\omega - 0.295937\omega^2$$

$$\zeta_c = 0.329032 - 0.076799\omega + 0.0211947\omega^2$$

Use the data given in Example 1.2 for n-butane to calculate the parameters of PT equation.

O exercício foi realizado em forma de Script, para melhor compreender o método de Newton-Raphson, e vermos o passo a passo do método.
Devemos escrever a função de BWR e de PT, passando o termo P para o outro lado da equação, e também escrever suas derivadas.
A analogia com o exercício 1 é muito parecida, onde temos que aplicar os seguintes conceitos abaixo

$$f(x) = Eq\ de\ BWR = 0$$

$$f(x) = Eq\ de\ PT = 0$$

$$f(x)\ BWR = -P + \frac{R.T}{V} + \frac{B_0.R.T - A_0 - \left(\frac{C_0}{T^2}\right)}{V^2} + \frac{b.R.T - a}{V^3} + \frac{a.\alpha}{V^6} + \frac{c}{V^3.T^2} * \left(1 + \frac{\gamma}{V^2}\right) * e^{(-\gamma/V^2)}$$

$$f(x)PT = -P + \frac{R.T}{V-b} - \frac{a}{V(V+b) + c.(V-b)}$$

$$f(x+dx)BWR = -P + \frac{R.T}{(V+dx)} + \frac{B_0.R.T - A_0 - \left(\frac{C_0}{T^2}\right)}{(V+dx)^2} + \frac{b.R.T - a}{(V+dx)^3} + \frac{a.\alpha}{(V+dx)^6} + \frac{c}{(V+dx)^3.T^2} * \left(1 + \frac{\gamma}{(V+dx)^2}\right) * e^{(-\gamma/(V+dx)^2}$$

$$f(x+dx)PT = -P + \frac{R.T}{(V+dx) - b} - \frac{a}{(V+dx)\big((V+dx)+b\big) + c.((V+dx) - b)}$$

$$f'(x) = \lim_{dx \to 0} \frac{f(x+dx) - f(x)}{dx}$$

Formula de Newton-Raphson

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Escrevendo um Script para BWR

```
i = 0;
%iremos utilizar um For, para o Calculo de cada V, para cada P, mantendo
a Temperatura constante
for P = 1:1:40 %(atm)
    i = i+1;
    V = 1; %(Chute inicial L/mol)
    T = 500; %(K)
    %Parametros do n - butano
    A0 = 10.0847;
    a = 1.88231;
    alfa = 1.10132e-3;
    B0=0.124361;
    b= 0.0399983;
    gama = 3.400e-2;
    C0 = 0.992830e6;
    c = 0.316400e6;
    R = 0.08206; %(L.Atm/Mol.K)
    dx = 0.5; %(Passo da derivada)
    %Escrevendo a função f(x) de BWR
    f = -P+((R*T)/(V))+(((B0*R*T)-A0-(C0/T^2))/(V^2))+(((b*R*T)-
a)/(V^3))+((a*alfa)/(V^6))+(c/((V^3)*(T^2)))*(1+(gama/(V^2)))*exp(-
gama/(V^2));
    %Enquanto a função de BWR não for menor que a tolerancia de 10^-6.
    while abs(f)>10e-6
    %Calculando f(x+dx)
    derivada = -P+((R*T)/(V+dx))+(((B0*R*T)-A0-
(C0/T^2))/((V+dx)^2))+(((b*R*T)-
a)/((V+dx)^3))+((a*alfa)/((V+dx)^6))+(c/(((V+dx)^3)*(T^2)))*(1+(gama/((V+
dx)^2)))*exp(-gama/((V+dx)^2));
    %Calculando f'(x)
    der = (derivada-f)/dx;
    %Calculando o novo V com a formula de Newton-Raphson
    V = V - f/der;
    %Calculando f(x) novamente, com o novo valor de V
    f = -P+((R*T)/(V))+(((B0*R*T)-A0-(C0/T^2))/(V^2))+(((b*R*T)-
a)/(V^3))+((a*alfa)/(V^6))+(c/((V^3)*(T^2)))*(1+(gama/(V^2)))*exp(-
gama/(V^2));
    VBenedict_webb_rubin(i) = V;
    end
end
VBenedict_webb_rubin
```

Escrevendo um Script para PT

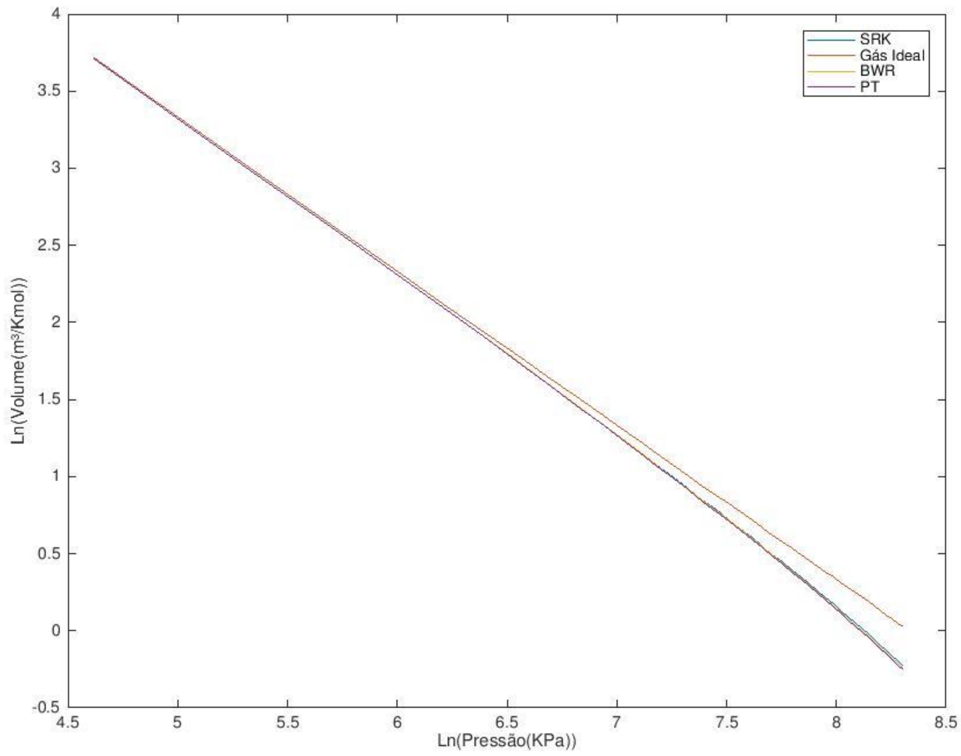
```
%iremos utilizar um For, para o Calculo de cada V, para cada P, mantendo
a Temperatura constante
    for P = 1:1:40
    i = i+1;
    V = 1; %Chute Inicial L/Mol
    T = 500; %(K)
    R = 0.08206; %(Atm.L/Mol.K)
    Tc = 425.2; %(K)
    Pc = 37.4734; %(Atm)
    %(passo da derivada)
    dx = 0.5;
    %Calculo dos parametros da Equação
    facentric = 0.1931;
    F = 0.452413+1.30982*(facentric)-0.295937*(facentric^2);
    zeta = 0.329032 - 0.076799*(facentric)+0.0211947*(facentric^2);
    omegac = 1-3*zeta;
    %Calculo da Primeira raiz da função Omegab
    omegab = fzero('calc_omega_b',1);
    omegaa = 3*(zeta^2)+3*(1-2*zeta)*omegab+(omegab^2)+1-3*zeta;
    a = omegaa*(((R^2)*(Tc^2))/(Pc))*((1+F*(1-sqrt(T/Tc)))^2);
    b = omegab*((R*Tc)/Pc);
    c = omegac*((R*Tc)/Pc);
    %%Escrevendo a função f(x) de PT
    f = -P +((R*T)/(V-b))-((a)/(V*(V+b)+c*(V-b)));
    %Enquanto a função de BWR não for menor que a tolerancia de 10^-6.
      while abs(f)>10e-6
          %Calculo de f(x+dx)
      derivada = -P +((R*T)/((V+dx)-b))-
((a)/((V+dx)*((V+dx)+b)+c*((V+dx)-b)));
      %Calculo de f'(x)
      der = (derivada-f)/dx;
      %Calculando o novo V com a formula de Newton-Raphson
      V = V - f/der;
      %Calculando f(x) novamente, com o novo valor de V
      f = -P +((R*T)/(V-b))-((a)/(V*(V+b)+c*(V-b)));
      VPatel_Teja(i) = V;
      end
    end
    VPatel_Teja
```

Função Omega b

```
function f = calc_omega_b(omegab)
facentric = 0.1931;
zeta = 0.329032 - 0.076799*(facentric)+0.0211947*(facentric^2);
f = (omegab^3)+(2-3*zeta)*(omegab^2)+3*(zeta^2)*omegab-(zeta^3);
end
```

Plotando os gráficos de Vsrk, Vgasideal,Vbwr e Vpt

```
%Plotando o Gràfico de Ln(V) Vs Ln(P), comparando os desvios de V
x = 101.325:101.325:4053.000;
x = log(x);
y1 = log(VSoave_Redlich_Kwong);
plot(x,y1)
hold on
y2 = log(Vgasideal);
plot (x,y2)
y3 = log(VBenedict_webb_rubin);
plot (x,y3)
y4 = log(VPatel_Teja);
plot(x,y4)
xlabel('Ln(Pressão(KPa))')
ylabel('Ln(Volume(m³/Kmol))')
legend('SRK','Gás Ideal','BWR','PT')
```



3) Resolver o Exercício 1.10 do Constantinides, p.61.

1.10 The elementary reaction A → B + C is carried out in a continuous stirred tank reactor (CSTR). Pure A enters the reactor at a flow rate of 12 mol/s and a temperature of 25°C. The reaction is exothermic and cooling water at 50°C is used to absorb the heat generated. The energy balance for this system, assuming constant heat capacity and equal heat capacity of both sides of the reaction, can be written as

$$-F_{A_0} X \Delta H_R = F_{A_0} C_{p_A} (T - T_0) + UA(T - T_a)$$

where F_{A_0} = molar flow rate, mol/s
X = conversion
ΔH_R = heat of reaction, J/mol A
C_{p_A} = heat capacity of A, J/mol.K
T = reactor temperature, °C
T_0 = reference temperature, 25°C
T_a = cooling water temperature, 20°C
U = overall heat transfer coefficient, W/m^2.K
A = heat transfer area, m^2

For a first-order reaction the conversion can be calculated from

$$X = \frac{\tau k}{1 + \tau k}$$

where τ is the residence time of the reactor in seconds and k is the specific reaction rate in s^{-1} defined by the Arrhenius formula:

$$k = 650 \exp[-3800/(T + 273)]$$

Solve the energy balance equation for temperature and find the steady-state operating temperatures of the reactor and the conversions corresponding to these temperatures. Additional data are:

ΔH_R = -1500 kJ/mol τ = 10 s C_{p_A} = 4500 J/mol.K UA/F_{A_0} = 700 W.s/mol.K

O exercício foi realizado em forma de Script, para melhor compreender o método de Newton-Raphson, e vermos o passo a passo do método.
Iremos escrever a função, em relação a T, substituindo X na Equação.

$$f(x) = X * \Delta H_R + C_{PA}.\left((T + 273) - (T_0 + 273)\right) + \frac{U.A}{F_{A0}} * ((T + 273) - (Ta + 273))$$

$$f(x + dx) = X * \Delta H_R + C_{PA}.\left(((T + dx) + 273) - (T_0 + 273)\right) + \frac{U.A}{F_{A0}} * (((T + dx) + 273) - (Ta + 273))$$

$$f(x) = \frac{\tau.650.\exp\left(\frac{-3800}{T + 273}\right)}{1 + \tau.650.\exp\left(\frac{-3800}{T + 273}\right)} * \Delta H_R = C_{PA}.\left((T + 273) - (T_0 + 273)\right) + \frac{U.A}{F_{A0}} * ((T + 273) - (Ta + 273))$$

$$f'(x) = \lim_{dx \to 0} \frac{f(x+dx) - f(x)}{dx}$$

Formula de Newton-Raphson

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Escrevendo o Script abaixo

```
Fa0 = 12; %(mol/s)
DeltaHr = -1500000; %(J/mol)
Cpa = 4500; %(J/mol.k)
Ta = 50; %(°C)
T0 = 25; %(°C)
UA = 8400; %(W/k)
Tal = 10; %(s)
T = 70; %(°C -> Chute Inicial
%Passo da derivada
dx = 0.5;
%Função
f = Cpa*((T+273)-(T0+273))+((UA)/(Fa0))*((T+273)-
(Ta+273))+(((Tal*650*exp((-3800)/(T+273)))/(1+(Tal*650*exp((-
3800)/(T+273))))))*DeltaHr;
%Enquanto a função for menor que a tolerancia
while abs(f) > 10e-6
    %Calculo de f(x+dx)
    derivada = Cpa*(((T+dx)+273)-(T0+273))+((UA)/(Fa0))*(((T+dx)+273)-
(Ta+273))+(((Tal*650*exp((-3800)/((T+dx)+273)))/(1+(Tal*650*exp((-
3800)/((T+dx)+273))))))*DeltaHr;
    %Calculo de f'(x)
    der = (derivada-f)/dx;
    %Aplicando o metodo de Newton-Raphson para o novo calculo de T
    T = T - f/der;
    %Calculo de f com o novo T calculado
    f = Cpa*((T+273)-(T0+273))+((UA)/(Fa0))*((T+273)-
(Ta+273))+(((Tal*650*exp((-3800)/(T+273)))/(1+(Tal*650*exp((-
3800)/(T+273))))))*DeltaHr;
end
T
X = (((Tal*650*exp((-3800)/(T+273)))/(1+(Tal*650*exp((-3800)/(T+273))))))
```

```
T =

   36.9986


X =

     0.0299
```

A equação pode obter mais 2 soluções

Para chute de T=100

```
T =

  135.0655


X =

     0.3699
```

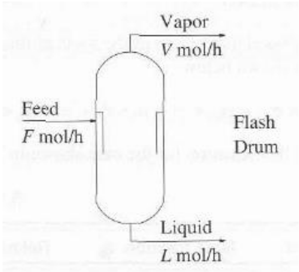
Para chute de T = 250

```
T =

  279.2507


X

0.8697
```

Para o primeiro chute, T=70C, o resultado obtido não representa a condição do reator, pois o fluido de resfriamento entra a 50C, e o produto do reator está saindo mais frio que o fluido de resfriamento de entrada.

As outras duas respostas, são mais adequadas.

4) Uma vazão de F mols por hora de uma corrente de gás natural contendo n componentes é alimentada num tanque *flash*, como ilustrado na figura a seguir. O vapor que sai no topo e o líquido no fundo têm vazões molares iguais a V e L, respectivamente. As frações molares de cada um dos componentes na corrente de alimentação, topo e fundo são expressas como z_i, y_i e x_i, respectivamente, com i variando de 1 até n.



Supondo-se que exista equilíbrio dentro do vaso e que o regime seja permanente, pode-se escrever o balanço material total (Equação 1), o balanço material parcial para o i-ésimo componente (Equação 2) e as relações de equilíbrio (Equação 3).

$$F = L + V \tag{1}$$
$$Fz_i = Lx_i + Vy_i \tag{2}$$
$$K_i = y_i/x_i \tag{3}$$

A partir das Equações 1, 2 e 3 e do fato que $\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i = 1$, tem-se:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{z_i K_i F}{V(K_i - 1) + F} = 1 \tag{4}$$

Os dados apresentados na tabela a seguir se referem a um ensaio de separação dos componentes do gás natural, numa pressão de 11 MPa. Sabendo-se que F é igual a 100 mol/h, resolva a Equação 4 e determine a vazão molar V. Utilize o método da bissecção para resolver essa equação, com tolerância de 10^{-3}. Inicie sua busca no intervalo entre 5 e 95 mol/h.

Componente	i	z_i	K_i
Metano	1	0,875	1,545
Etano	2	0,040	0,360
Propano	3	0,018	0,195
Butano	4	0,014	0,105
Pentano	5	0,030	0,046
Hexano	6	0,023	0,032

O exercício foi realizado em forma de Script, para melhor compreender o método da Bissecçao, e vermos o passo a passo do método.
Iremos escrever a função, em relação a V.

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \frac{z_i K_i F}{V(K_i - 1) + F} - 1$$

Escrevendo o Script

```
%Parametros Iniciais
n = 6;
F = 100;
z = [0.875,0.04,0.018,0.014,0.03,0.023];
K = [1.545,0.36,0.195,0.105,0.046,0.032];
%Intervalo de troca de sinal da função
a = 5;
b = 95;
%Calculo do ponto medio do intervalo de a e b
c = (a + b)/2;
A = 0;
B = 0;
C = 0;
%Calculo do fator soma da função em relacao ao ponto a
    for i = 1:n
        A = A + ((z(i)*K(i)*F)/(a*(K(i)-1)+F));
    end
%Calculo de fa
    fa = A - 1;
%Calculo do fator soma da função em relacao ao ponto b
    for i = 1:n
        B = B + ((z(i)*K(i)*F)/(b*(K(i)-1)+F));
    end
%Calculo de fb
    fb = B - 1;
%Calculo do fator soma da função em relacao ao ponto b
    for i = 1:n
        C = C + ((z(i)*K(i)*F)/(c*(K(i)-1)+F));
    end
%Calculo de fa
    fc = C - 1;
    cont= 0;
%Enquanto a diferença entre a e b, for maior que a tolerancia
    while abs(a-b)>1e-3
%Se fa calculado tiver valor diferente de fc calculado
        if (fa*fc)<0
% b recebe o valor de c
            b = c;
%caso contrario, a recebe c
        else
            a = c;
        end
```

```
%Calculo do novo valor do ponto medio em relacao ao novo intervalo entre
a e b
        c = (a+b)/2;
%Calculo os novos valores de fa, fb e fc, com os novos valores de a ou b,
e c
        A = 0;
        for i = 1:n
        A = A + ((z(i)*K(i)*F)/(a*(K(i)-1)+F));
        end
        fa = A - 1;
        B = 0;
        for i = 1:n
        B = B + ((z(i)*K(i)*F)/(b*(K(i)-1)+F));
        end
        fb = B-1;
        C = 0;
        for i = 1:n
        C = C + ((z(i)*K(i)*F)/(c*(K(i)-1)+F));
        end
        fc = C - 1;
        cont = cont+1;
    end
V = a;
V
cont
```

```
V =

   78.0275


cont =

    17
```

5) As funções f_1 e f_2 a seguir representam um sistema não linear de equações:

$$f_1 = x_1^2 + 2x_2^3 - 4x_1x_2 - 3 = 0$$

$$f_2 = x_1 + 3x_1^2 + x_1x_2 + x_2 - 2 = 0$$

a) Tendo em vista o método de Newton Raphson, construa a matriz Jacobiana para esse sistema de equações.
b) A partir da resposta do item anterior, aplique o método de Newton Raphson na resolução desse problema, considerando uma tolerância de 10^{-7}.

O exercício foi realizado em forma de Script, para melhor compreender o método de Newton-Raphson para mutivariaveis, e vermos o passo a passo do método.

Escrevendo a matriz jacobiana

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f1}{\partial x1} & \frac{\partial f1}{\partial x2} \\ \frac{\partial f2}{\partial x1} & \frac{\partial f2}{\partial x2} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial f1}{\partial x1} = 2.x1 - 4.x2$$

$$\frac{\partial f1}{\partial x2} = -4.x1 + 6.x2^2$$

$$\frac{\partial f2}{\partial x1} = 6.x1 + x2 + 1$$

$$\frac{\partial f2}{\partial x2} = x1 + 1$$

Escrevendo o Script para resolver o problema

```
%Fator de relaxamento
ro = 0.1;
%Chute Inicial
X = [0.25;1];
%Escrevendo as funções
f = zeros(2,1);
f(1,1) = ((X(1,1))^2)+2*((X(2,1))^3)-4*(X(1,1))*(X(2,1))-3;
f(2,1) = (X(1,1))+3*((X(1,1))^2)+(X(1,1))*(X(2,1))+(X(2,1))-2;
%Escrevendo a matriz Jacobiana das derivadas das funções
J = zeros(2,2);
J(1,1) = 2*(X(1,1))-4*(X(2,1));
J(1,2) = -4*(X(1,1))+6*((X(2,1))^2);
J(2,1) = 6*(X(1,1))+(X(2,1))+1;
J(2,2) = (X(1,1))+1;
%Resolvendo o sistema, e sabendo que J.Delta = -f. Enquanto o erro
quadratico de f, for maior que a tolerância
    while ((f')*(f))>1e-7
    delta = -J\f;
    X = X+ro*delta;
%Recalculando as novas funções com os novos valores de X
f(1,1) = ((X(1,1))^2)+2*((X(2,1))^3)-4*(X(1,1))*(X(2,1))-3;
f(2,1) = (X(1,1))+3*((X(1,1))^2)+(X(1,1))*(X(2,1))+(X(2,1))-2;
%Recalculando a Matriz Jacobiana, com os novos valores de X
J(1,1) = 2*(X(1,1))-4*(X(2,1));
J(1,2) = -4*(X(1,1))+6*((X(2,1))^2);
J(2,1) = 6*(X(1,1))+(X(2,1))+1;
J(2,2) = (X(1,1))+1;
end
X
```

```
X =

    0.2407
    1.2777
```

6) As reações a seguir representam a hidrodealquilação do mesitileno (M), utilizando-se hidrogênio (H) e tendo-se como produtos xileno (X), tolueno (T) e metano (met). Essas reações são conduzidas em fase gasosa, a 1500 ºR e 35 atm, num reator contínuo de mistura perfeita (CSTR), de volume V igual a 238 ft^3 e tempo espacial τ de 0,5 h. (3,5 pontos)

$$M + H \rightarrow X + met$$

$$X + H \rightarrow T + met$$

Em regime permanente, esse sistema pode ser bem modelado pelas equações a seguir, nas quais $x_{1,o}$ e $x_{2,o}$ são as concentrações de alimentação de mesitileno e hidrogênio, sendo respectivamente iguais a 0,010 e 0,020 lbmol/ft^3. As variáveis x_1, x_2 e x_3 representam as concentrações molares de mesitileno, hidrogênio e xileno, enquanto que as constantes cinéticas k_1 e k_2 têm valores de 55 e 30 (ft^3/lbmol)^{0,5}/h, respectivamente.

$$\left(x_{1,o} - x_1\right) - k_1 \tau x_1 x_2^{0,5} = 0$$

$$\left(x_{2,o} - x_2\right) - \left(k_1 x_1 x_2^{0,5} + k_2 x_2^{0,5} x_3\right)\tau = 0$$

$$-x_3 + \left(k_1 x_1 x_2^{0,5} - k_2 x_2^{0,5} x_3\right)\tau = 0$$

a) Considerando o método de Newton Raphson, construa a matriz Jacobiana para esse sistema de equações.
b) A partir da resposta do item anterior, aplique o método de Newton Raphson na resolução desse problema, considerando uma tolerância de 10^{-8} e um fator de relaxamento de 0,1. Tome como valores iniciais de x_1, x_2 e x_3 as concentrações de 0,005, 0,010 e 0,005.

O exercício foi realizado em forma de Script, para melhor compreender o método de Newton-Raphson para mutivariaveis, e vermos o passo a passo do método.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f1}{\partial x1} & \frac{\partial f1}{\partial x2} & \frac{\partial f1}{\partial x3} \\ \frac{\partial f2}{\partial x1} & \frac{\partial f2}{\partial x2} & \frac{\partial f2}{\partial x3} \\ \frac{\partial f3}{\partial x1} & \frac{\partial f3}{\partial x2} & \frac{\partial f3}{\partial x3} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial f1}{\partial x1} = -1 - K1.\tau.x2^{0.5}$$

$$\frac{\partial f1}{\partial x2} = -K1.\tau.x1.0{,}5.x2^{-0{,}5}$$

$$\frac{\partial f1}{\partial x3} = 0$$

$$\frac{\partial f2}{\partial x1} = -\tau.(K1.x2^{0{,}5})$$

$$\frac{\partial f2}{\partial x2} = -1 - \tau(K1.x1.0{,}5.x2^{-0{,}5} + K2.x3.0{,}5.x2^{-0.5})$$

$$\frac{\partial f2}{\partial x3} = -\tau.(K2.x2^{0{,}5})$$

$$\frac{\partial f3}{\partial x1} = +\tau.(K1.x2^{0{,}5})$$

$$\frac{\partial f3}{\partial x2} = \tau.(K1.x1.0{,}5.x2^{-0{,}5} - K2.x3.0{,}5.x2^{-0{,}5})$$

$$\frac{\partial f3}{\partial x3} = -1 + \tau.(-K2.x2^{0{,}5})$$

Escrevendo o script para resolução

```
%paramentros iniciais
tal = 0.5;
X1i = 0.01;
X2i = 0.02;
K1 = 55;
K2 = 30;
%Fator de Relaxamento
ro = 0.1;
%Chute Inicial
X = [0.005;0.01;0.005];
%Escrevendo as funções
f = zeros(3,1);
f(1,1) = (X1i-X(1,1))-K1*tal*X(1,1)*((X(2,1)^0.5));
f(2,1) = (X2i-X(2,1))-
tal*(K1*X(1,1)*(X(2,1)^0.5)+K2*(X(2,1)^0.5)*X(3,1));
f(3,1) = -X(3,1)+tal*(K1*X(1,1)*(X(2,1)^0.5)-K2*(X(2,1)^0.5)*X(3,1));
%Escrevendo a matriz Jacobiana das derivadas das funções
J = zeros(3,3);
J(1,1) = -1-K1*tal*(X(2,1)^0.5);
```

```
J(1,2) = -K1*tal*X(1,1)*0.5*(X(2,1)^-0.5);
J(1,3) = 0;
J(2,1) = -tal*K1*(X(2,1)^0.5);
J(2,2) = -1-tal*(K1*X(1,1)*0.5*(X(2,1)^-0.5)+K2*X(3,1)*0.5*(X(2,1)^-
0.5));
J(2,3) = -tal*(K2*(X(2,1)^0.5));
J(1,3) = +tal*(K1*(X(2,1)^0.5));
J(2,3) = tal*(K1*X(1,1)*0.5*(X(2,1)^-0.5)-K2*X(3,1)*0.5*(X(2,1)^-0.5));
J(3,3) = -1 + tal*(-K2*(X(2,1)^0.5));
%Resolvendo o sistema, e sabendo que J.Delta = -f. Enquanto o erro
quadratico de f, for maior que a tolerancia
while abs((f')*(f))>1e-8
    delta = -J\f;
    X = X+ro*delta;
%Recalculando as novas funções com os novos valores de X
f(1,1) = (X1i-X(1,1))-K1*tal*X(1,1)*((X(2,1)^0.5));
f(2,1) = (X2i-X(2,1))-
tal*(K1*X(1,1)*(X(2,1)^0.5)+K2*(X(2,1)^0.5)*X(3,1));
f(3,1) = -X(3,1)+tal*(K1*X(1,1)*(X(2,1)^0.5)-K2*(X(2,1)^0.5)*X(3,1));
%Recalculando a Matriz Jacobiana, com os novos valores de X
J(1,1) = -1-K1*tal*(X(2,1)^0.5);
J(1,2) = -K1*tal*X(1,1)*0.5*(X(2,1)^-0.5);
J(1,3) = 0;
J(2,1) = -tal*K1*(X(2,1)^0.5);
J(2,2) = -1-tal*(K1*X(1,1)*0.5*(X(2,1)^-0.5)+K2*X(3,1)*0.5*(X(2,1)^-
0.5));
J(2,3) = -tal*(K2*(X(2,1)^0.5));
J(1,3) = +tal*(K1*(X(2,1)^0.5));
J(2,3) = tal*(K1*X(1,1)*0.5*(X(2,1)^-0.5)-K2*X(3,1)*0.5*(X(2,1)^-0.5));
J(3,3) = -1 + tal*(-K2*(X(2,1)^0.5));
end
X
```

```
X =

    0.0028
    0.0086
    0.0030
```