



**CENTRO UNIVERSITÁRIO DA FEI  
MESTRADO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

Vitor Stabile Garcia

Nº 417121-1

**Resolução Lista de Exercícios 02  
Métodos Matemáticos em Engenharia Química  
Luís F. Novazzi**

São Bernardo do Campo

1º Período de 2017

1) Resolva manualmente o seguinte sistema de equações, usando o método de Gauss Seidel e o método de Jacobi. Para ambos, inicie as iterações a partir do ponto (1,0 ; 0,5) e considere uma tolerância de  $10^{-2}$ .

$$x_1 + x_2 = 3$$

$$-x_1 + 2x_2 = 0$$

%Pelo método de Gauss-Seidel no Matlab

%Escrevendo a matriz A, b e xi

A = [1,1;-1,2];

b = [3;0];

%chute inicial

xi = [1;0.5];

%Sendo o sistema diagonal, a formula para Gauss-Seidel é:

$$X(i) = \frac{1}{a(i,i)} * \left( b(i) - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a(i,j) * X(j) \right) \text{ onde } i = 1,2,3 \dots n$$

%Logo, em linguagem de programação, podemos escrever

%Calculo de X1

x(1,1) = (1/A(1,1)) \* ((b(1,1)) - (A(1,2)\*xi(2,1)));

%Calculo de X2

x(2,1) = (1/A(2,2)) \* ((b(2,1)) - (A(2,1)\*x(1,1)));

i=1

V1(i)=x(1,1);

V2(i)=x(2,1);

%Enquanto |X1-X01|>0.01 ou |X2-X02|>0.01

while abs(xi(1,1)-x(1,1))>0.01 || abs(xi(2,1)-x(2,1))>0.01

%Faça

xi = x;

x(1,1) = (1/A(1,1)) \* ((b(1,1)) - (A(1,2)\*x(2,1)));

x(2,1) = (1/A(2,2)) \* ((b(2,1)) - (A(2,1)\*x(1,1)));

i=i+1

V1(i)=x(1,1);

V2(i)=x(2,1);

End

i

X=[1,V1;0.5,V2]

%Com isso, podemos ter os seguintes resultados

	i=0	i=1	i=2	i=3	i=4	i=5	i=6	i=7	i=8	i=9
x1	1.0	2.5	1.75	2.125	1.9375	2.0312	1.9844	2.0078	1.9961	2.002
x2	0.5	1.25	0.875	1.0625	0.9688	1.0156	0.9922	1.0039	0.9980	1.0010

%Pelo método de Jacobi

%Escrevendo a matriz A, b e xi

A = [1,1;-1,2];

b = [3;0];

%chute inicial

xi = [1;0.5];

%Sendo o sistema diagonal, a formula para Jacobi é:

$$x^{(k+1)} = D^{-1} * b - (D^{-1} * A - I) * x^k$$

Onde  $D^{-1}$  é a matriz inversa da matriz composta pela diagonal de da matriz A e I é a matriz identidade de mesma ordem de A

%Logo, podemos definir

D = diag(diag(A));

n = length(b);

I = eye(n);

D =

1 0  
0 2

I =

1 0  
0 1

Dinv = inv(D);

Dinv =

1.0 0  
0 0.50

```

%Pela formula
x = (Dinv*b)-(Dinv*A-I)*xi;
i = 1;
V1(i)=x(1,1);
V2(i)=x(2,1);

%Enquanto |X1-X01|>0.01 ou |X2-X02|>0.01

while abs(xi(1,1)-x(1,1))>0.01 || abs(xi(2,1)-x(2,1))>0.01
%Faça
xi = x;
    x = (Dinv*b)-(Dinv*A-I)*xi;
    i=i+1
    V1(i)=x(1,1);
    V2(i)=x(2,1);
End

```

i

X=[1,V1;0.5,V2]

%Com isso, podemos ter os seguintes resultados

	i=0	i=1	i=2	i=3	i=4	i=5	i=6	i=7	i=8
<b>x1</b>	1.0	2.5	2.5	1.75	1.75	2.125	2.125	1.9375	1.9375
<b>x2</b>	0.5	0.5	1.25	1.25	0.875	0.875	1.0625	1.0625	0.9688

	i=9	i=10	i=11	i=12	i=13	i=14	i=15	i=16
<b>x1</b>	2.0313	2.0313	1.9844	1.9844	2.0078	2.0078	1.9961	1.9961
<b>x2</b>	0.9688	1.0156	1.0156	0.9922	0.9922	1.0039	1.0039	0.9980

2) Considere o sistema linear do exercício anterior. Aplicando as funções em Matlab *jacobi.m* e *gauss\_seidel.m*, resolva o sistema, também iniciando as iterações a partir do ponto (0,0). Admita agora que a tolerância seja igual a  $10^{-6}$ . Compare o número de iterações necessárias no método de Jacobi e no método de Gauss Seidel, discutindo a respeito da diferença entre ambas. Utilize a rotina “\” para a resolução de sistemas lineares e compare os tempos de simulação para cada caso.

```
%Aplicando Jacobi
A = [1,1;-1,2];
b = [3;0];
%chute inicial
xi = [0;0];
tol = 1e-06;
tic
[x,i]=jacobi(A,b,xi,tol)
toc

%Resultado:

x =

    1.9995
    0.9998

i =

    25

Elapsed time is 0.004575 seconds.
```

```
%Aplicando Gauss_Seidel
A = [1,1;-1,2];
b = [3;0];
%chute inicial
xi = [0;0];
tol = 1e-06;
tic
[x,i]=gauss_seidel(A,b,xi,tol)
toc

%Resultado:

x =

    1.9995
    0.9998

i =

     3

Elapsed time is 0.005198 seconds.
```

```

%Aplicando '\'
A = [1,1;-1,2];
b = [3;0];
tic
x = A\b
toc

%Resultado:

x =

     2
     1

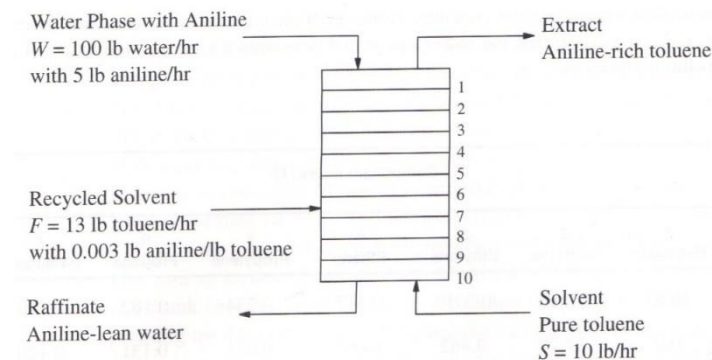
Elapsed time is 0.000672 seconds.

```

O número de iterações pelo método de Gauss-Seidel, é menor em relação ao método de Jacobi, pois na formula de Gauss-Seidel, ele os elementos individuais da matriz para seu cálculo, e também, sempre utiliza o valor atualizado de  $x(1,1)$ , calculado da primeira equação, sendo esse  $x(1,1)$  atualizado, imediatamente utilizado para calcular  $x(2,1)$ . Já no método de Jacobi, ele sempre ira calcular por operações matriciais, e o valor de  $x(1,1)$  e  $x(2,1)$  é atualizado somente no final do cálculo.

O método ``\` é mais rápido em relação a Jacobi e Gauss-Seidel, pois este já é um algoritmo do próprio Matlab. Já as funções jacobi.m e gauss\_seidel.m, foram criadas.

3) Anilina está sendo removida da água através de uma extração líquido-líquido, utilizando-se tolueno como solvente. A unidade de extração possui 10 estágios e opera em contracorrente, conforme esquematizado a seguir.



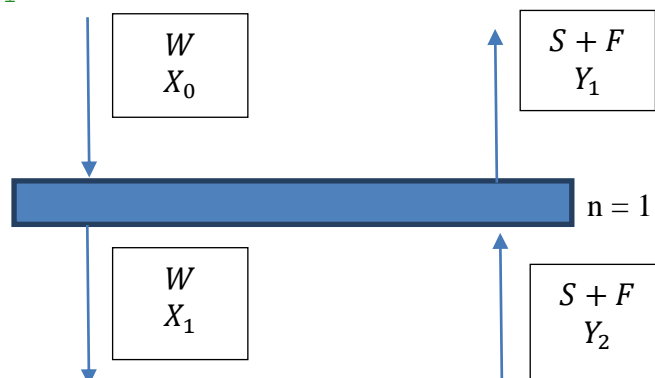
Os estágios podem ser considerados de equilíbrio e uma aproximação para isso é dada pela equação a seguir, na qual  $Y_i$  representa a quantidade de anilina na fase orgânica em relação à quantidade de tolueno e  $X_i$  indica a quantidade de anilina na fase aquosa em relação à quantidade de água. Tanto  $X_i$  como  $Y_i$  são escritos em base mássica. Pode-se supor que a solubilidade da água no tolueno e do tolueno na água seja desprezível.

$$m = \frac{Y_i}{X_i} = 9$$

- A partir de balanços materiais e de relações de equilíbrio em cada estágio, escrever as equações que fazem descrevem esse sistema.
- Escrever um *script* em Matlab para resolver esse problema, deixando-o em função de um número de estágios genéricos  $n$  e de um prato de alimentação  $nf$ .

%a) Escrevendo as equações para cada uma coluna de  $n$  pratos. Considerando a Água e o Tolueno totalmente imiscíveis.

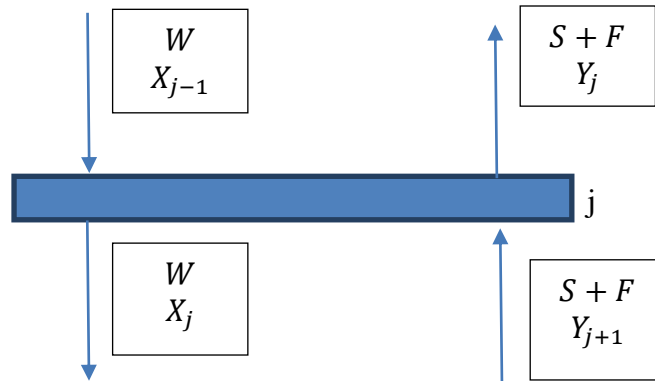
%Para  $n = 1$



%Realizando o balanço para a Anilina no prato  $n = 1$

$$-W \cdot X_1 - (S + F) \cdot Y_1 + (S + F) \cdot Y_2 = -W \cdot X_0$$

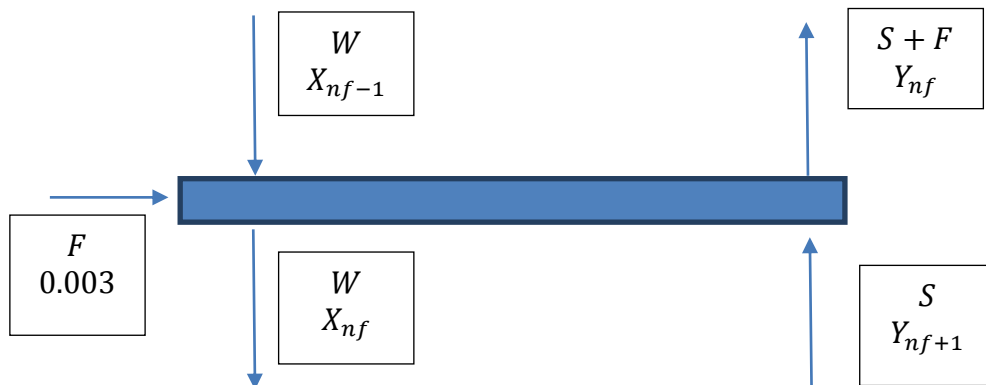
%Para (nf -1), onde nf é o prato de alimentação do reciclo de tolueno



%Realizando o balanço para a Anilina até o prato nf-1

$$W.X_{j-1} - W.X_j - (S + F).Y_j + (S + F).Y_{j+1} = 0$$

%Para nf

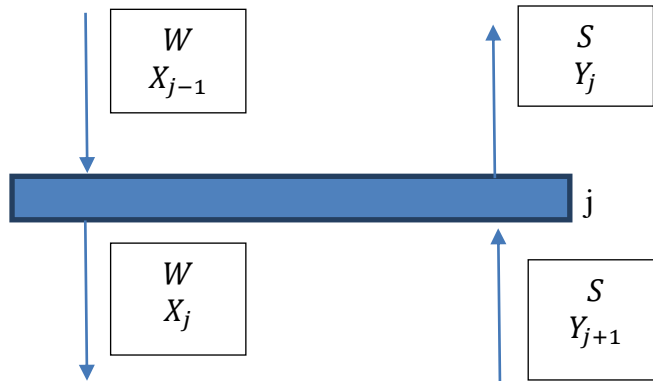


%Realizando o balanço para a Anilina no prato nf

$$W.X_{nf-1} - W.X_{nf} - (S + F).Y_{nf} + (S).Y_{nf+1} = -F.0.003$$



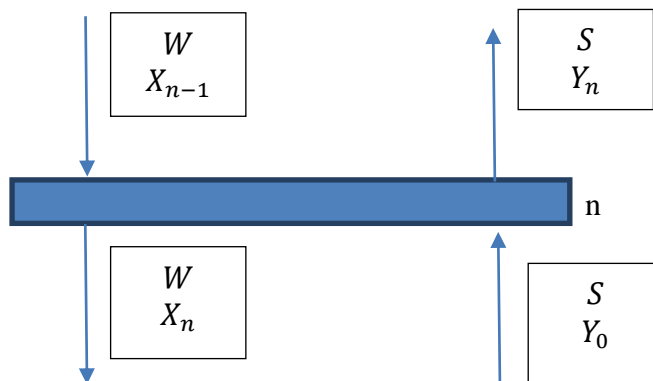
%Para nf+1 a n-1



%Realizando o balanço para a Anilina do prato nf+1 a n-1

$$W.X_{j-1} - W.X_j - (S).Y_j + (S).Y_{j+1} = 0$$

%Para o ultimo prato n



%Realizando o balanço para a Anilina no ultimo prato n

$$W.X_{n-1} - W.X_n - (S).Y_n = (S).Y_0$$

%b) Escrevendo um Script em Matlab, deixando em função de n e nf

```
n = 10;
nf = 7;
W = 100;
F = 13;
S = 10;
X0 = 0.05;
Y0 = 0;
nf0 = 0.003;
m = 9;
A = zeros(2*n,2*n);
b = zeros(2*n,1);
for j = 1:n
    if j == 1
        A(j,j) = -W;
        A(1,n+j) = -(S+F);
        A(1,n+j+1) = +(S+F);
        b(j,1) = -W*X0;
    elseif j < nf
        A(j,j-1) = W;
        A(j,j) = -W;
        A(j,j+n) = -(S+F);
        A(j,j+n+1) = +(S+F);
    elseif j == nf
        A(j,j-1) = W;
        A(j,j) = -W;
        A(j,j+n) = -(S+F);
        A(j,j+n+1) = S;
        b(j,1) = -F*nf0;
    elseif j > nf && j < n
        A(j,j-1) = W;
        A(j,j) = -W;
        A(j,j+n) = -(S);
        A(j,j+n+1) = S;
    else j = n;
        A(j,j-1) = W;
        A(j,j) = -W;
        A(j,n+j) = -(S);
        b(j,1) = -S*Y0;
    end
end
for k = n+1:2*n
    A(k,k-n) = m;
    A(k,k) = -1;
end

x = A\b
```

x =

0.0243  
0.0118  
0.0058  
0.0029  
0.0015  
0.0009  
0.0005  
0.0004  
0.0003  
0.0002  
0.2184  
0.1065  
0.0525  
0.0264  
0.0138  
0.0077  
0.0047  
0.0037  
0.0026  
0.0014

Testando o resultado, realizando um balanço total da Anilina na Coluna:

$$W.X_0 + F.Nf + S.Y_0 = (S + F).Y_1 + W.X_{10}$$

$$W.X_0 + F.Nf + S.Y_0 = 100 * 0.05 + 13 * 0,003 + 10 * 0 = 5.039$$

$$(S + F).Y_1 + W.X_{10} = (10 + 13) * 0.2184207477520 + 100 * 0.0001532280170$$

$$(S + F).Y_1 + W.X_{10} = 5.039$$

4) No estudo de reações químicas simultâneas, Aris (1965) desenvolveu uma técnica para descrever essas reações na forma de um sistema linear de equações. Por exemplo, as seguintes reações químicas:



poderiam ser rearranjadas e escritas como:

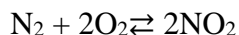
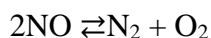
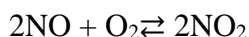
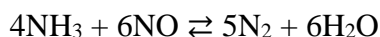
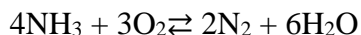
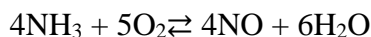
$$A_1 + A_2 - A_4 = 0$$

$$A_1 + 2A_3 - 2A_4 = 0$$

Nessas expressões,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  e  $A_4$  representam respectivamente o  $\text{C}_2\text{H}_4$ , o  $\text{H}_2$ , o  $\text{CH}_4$  e o  $\text{C}_2\text{H}_6$ . Esse raciocínio pode ser generalizado para um sistema com  $R$  reações entre  $S$  espécies químicas por um conjunto de equações representado por:

$$\sum_{j=1}^S \alpha_{ij} A_j = 0, \text{ com } i = 1, 2, \dots, R$$

No somatório definido,  $\alpha_{ij}$  corresponde aos coeficientes estequiométricos de cada espécie  $A_j$  em cada reação  $i$ . Aris demonstrou que o número de reações químicas independentes num conjunto de  $R$  reações é igual ao posto da matriz de coeficientes estequiométricos  $\alpha_{ij}$ . A partir dessas informações, determine o número de reações químicas independentes no seguinte sistema reacional:



```

%Relacionando as Espécies Químicas
%NH3 -> A1
%O2 -> A2
%NO -> A3
%H2O -> A4
%N2 -> A5
%NO2 -> A6
%Montando a Matriz
A = [-4,-5,4,6,0,0;-4,-3,0,6,2,0;-4,0,-6,6,5,0;0,-1,-2,0,0,2;0,1,-
2,0,1,0;0,-2,0,0,-1,2];
%Cálculo do posto da Matriz A

```

A =

-4	-5	4	6	0	0
-4	-3	0	6	2	0
-4	0	-6	6	5	0
0	-1	-2	0	0	2
0	1	-2	0	1	0
0	-2	0	0	-1	2

rank(A)

ans =

3

%Logo, se o número de reações químicas independentes é igual ao posto da Matriz A, o conjunto de reações possui 3 reações independentes

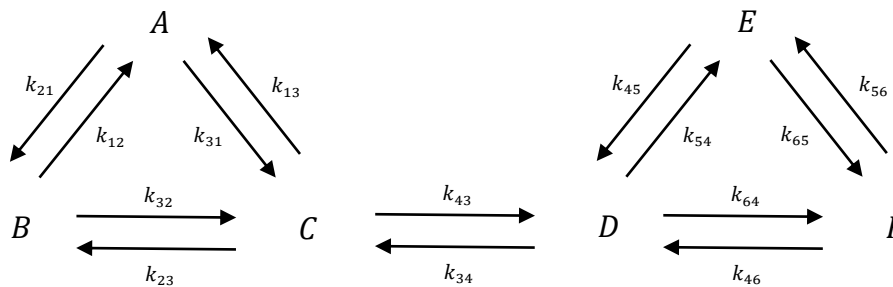
5) O sistema de reações químicas acoplado indicado no esquema a seguir acontece num reator batelada. As condições de pressão e de temperatura no reator são tais que as constantes de velocidade assumem os valores dados abaixo, expressos em  $s^{-1}$ :

$$\begin{array}{lllllll} k_{21} = 0,20 & k_{31} = 0,10 & k_{32} = 0,10 & k_{34} = 0,10 & k_{54} = 0,05 & k_{64} = 0,20 & k_{65} = 0,10 \\ k_{12} = 0,10 & k_{13} = 0,05 & k_{23} = 0,05 & k_{43} = 0,20 & k_{45} = 0,10 & k_{46} = 0,20 & k_{56} = 0,10 \end{array}$$

O reator batelada é carregado com os reagentes  $A$  e  $E$ , com concentrações iniciais  $c_{Ao} = c_{Eo} = 1$  mol/L. Esse tipo de reator, no qual estão ocorrendo reações múltiplas, é modelado pela seguinte equação (Fogler, 2009), na qual  $N_j$  é o número de mols do componente  $j$ ,  $t$  o tempo,  $r_j$  a velocidade de reação de  $j$  e  $V$  é o volume do reator.

$$\frac{dN_j}{dt} = r_j V$$

Sabendo-se que o volume do reator é constante, calcule a concentração de todos os componentes quando se atingir regime permanente. Assuma que todas as reações sejam de primeira ordem.



$$\frac{dN_A}{dt} = -(K_{21} + K_{31}) * C_A * V + K_{12} * C_B * V + K_{13} * C_C * V$$

$$\frac{dN_B}{dt} = -(K_{12} + K_{32}) * C_B * V + K_{21} * C_A * V + K_{23} * C_C * V$$

$$\frac{dN_C}{dt} = -(K_{23} + K_{13} + K_{43}) * C_C * V + K_{31} * C_A * V + K_{32} * C_B * V + K_{34} * C_D * V$$

$$\frac{dN_D}{dt} = -(K_{34} + K_{64} + K_{54}) * C_D * V + K_{43} * C_C * V + K_{46} * C_F * V + K_{45} * C_E * V$$

$$\frac{dN_E}{dt} = -(K_{45} + K_{65}) * C_E * V + K_{54} * C_D * V + K_{56} * C_F * V$$

$$\frac{dN_F}{dt} = -(K_{56} + K_{46}) * C_F * V + K_{64} * C_D * V + K_{65} * C_E * V$$

$$\frac{dV.N_i}{dt} = V.\frac{dC_i}{dt} \quad V \text{ constante}$$

$$\frac{dC_i}{dt} = 0 \quad \text{Ao atingir o regime permanente}$$

```

k21=0.2;
k12=0.1;
k31=0.1;
k13=0.05;
k32=0.1;
k23=0.05;
k34=0.1;
k43=0.2;
k54=0.05;
k45=0.1;
k64=0.2;
k46=0.2;
k65=0.1;
k56=0.1;
A=zeros(6,6);
A(1,1)=-(k21+k31);
A(2,1)=k21;
A(3,1)=k31;
A(1,2)=k12;
A(2,2)=-(k12+k32);
A(3,2)=k32;
A(1,3)=k13;
A(2,3)=k23;
A(3,3)=-(k23+k13+k43);
A(4,3)=k43;
A(3,4)=k34;
A(4,4)=-(k34+k64+k54);
A(5,4)=k54;
A(6,4)=k64;
A(4,5)=k45;
A(5,5)=-(k45+k65);
A(6,5)=k65;
A(4,6)=k46;
A(5,6)=k56;
A(6,6)=-(k56+k46);
A
B=det(A)
b=[0;0;0;0;0;0];

```

A =

```

-0.3000    0.1000    0.0500         0         0         0
 0.2000   -0.2000    0.0500         0         0         0
 0.1000    0.1000   -0.3000    0.1000         0         0
         0         0    0.2000   -0.3500    0.1000    0.2000
         0         0         0    0.0500   -0.2000    0.1000
         0         0         0    0.2000    0.1000   -0.3000

```

B =

```

3.1175e-20

```

ans =

```

1.5430e+16

```



A Matriz A é Linearmente Dependente. Se retiramos a 1 linha e adicionar a seguinte relação

$$C_A + C_B + C_C + C_D + C_E + C_F = C_{A0} + C_{E0}$$

Logo, a matriz A, irá se chamar matriz C, com a linha 1 recebendo em todos os elementos o valor 1. Logo a mesma fica:

```
C=A;
C(1,:)=1
D=det(C)
b(1)=2
cond(C)
x=C\b
```

C =

1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
0.2000	-0.2000	0.0500	0	0	0
0.1000	0.1000	-0.3000	0.1000	0	0
0	0	0.2000	-0.3500	0.1000	0.2000
0	0	0	0.0500	-0.2000	0.1000
0	0	0	0.2000	0.1000	-0.3000

D =

-0.0014

b =

2  
0  
0  
0  
0  
0

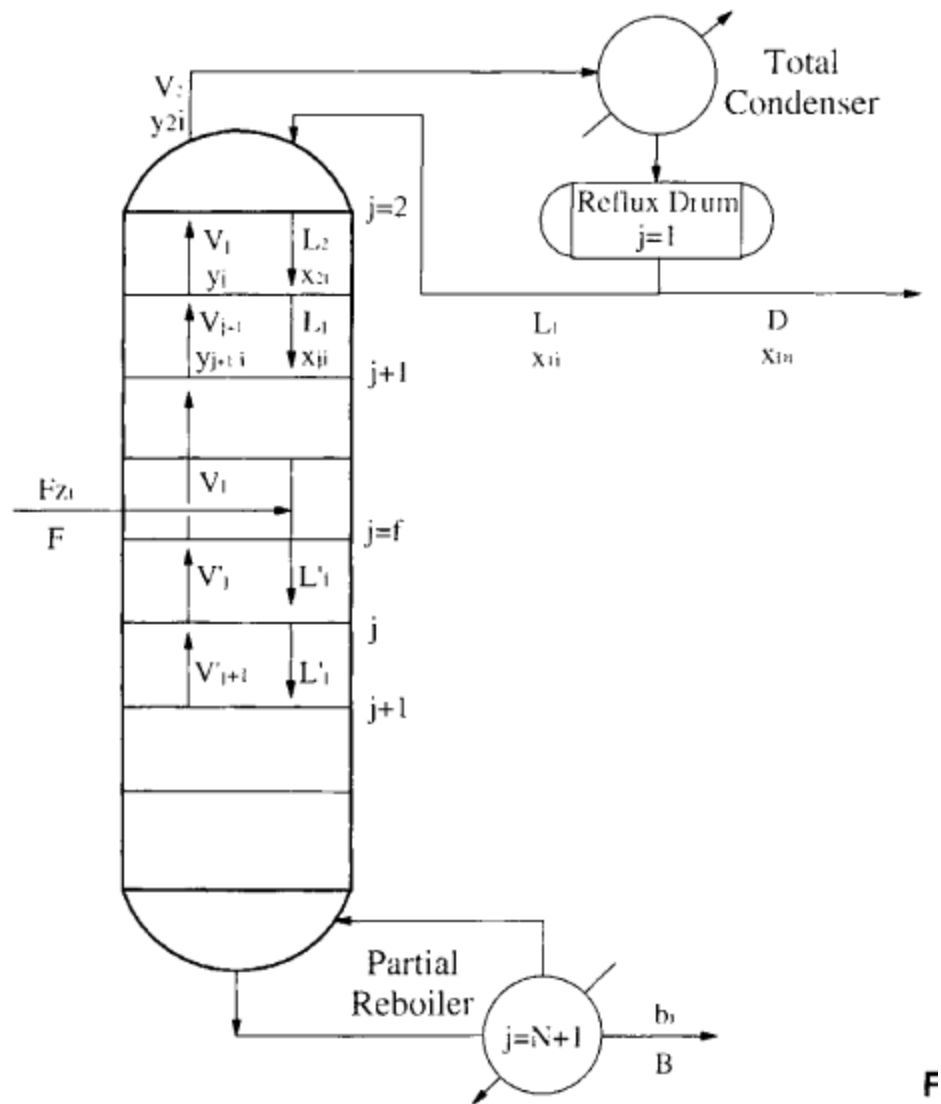
ans =

58.7092

x =

0.1042  
0.1736  
0.2778  
0.5556  
0.3889  
0.5000

6) Resolver o exercício 2.5, página 137, do livro de Constantinides e Mostoufi (1999). Discuta a respeito de como o perfil de temperaturas nos pratos da coluna afeta o erro dos balanços materiais, calculando a soma das frações molares dos componentes no topo e no fundo. A Coluna possui 10 estágios em equilíbrio, incluindo o refeedor, isso é,  $N=10$  e  $j=11$



The feed to the column has a flow rate  $F = 1000$  mol/h. It is a saturated liquid, and it enters the column on equilibrium stage 5 ( $j = 6$ ). It contains five components ( $n = 5$ ) whose mole fractions are

$$z_1 = 0.06 \quad z_2 = 0.17 \quad z_3 = 0.22 \quad z_4 = 0.20 \quad z_5 = 0.35$$

It is desired to recover a distillate product at a rate of 500 mol/h.

Develop all the material balances for component  $i$  for all 10 equilibrium stages and for the condenser. For this problem make the following assumptions:

1. The external reflux ratio is

$$\frac{L_1}{D} = 2.5$$

2. Constant molal overflow occurs in each section of the tower.
3. The initial guesses of the temperatures corresponding to the equilibrium stages are  $T_2 = 140^\circ\text{F}$ ,  $T_3 = 150^\circ\text{F}$ ,  $T_4 = 160^\circ\text{F}$ ,  $T_5 = 170^\circ\text{F}$ ,  $T_6 = 180^\circ\text{F}$ ,  $T_7 = 190^\circ\text{F}$ ,  $T_8 = 200^\circ\text{F}$ ,  $T_9 = 210^\circ\text{F}$ ,  $T_{10} = 220^\circ\text{F}$ , and  $T_{11} = 230^\circ\text{F}$ .
4. The equilibrium constant  $K_{ji}$  can be approximated by the following equation:

$$K_{ji} = \alpha_i \cdot \beta_i T_i + \gamma_i T_j^2$$

where the temperatures are in degrees Fahrenheit and the coefficients for each individual component are listed in Table P2.5 [10].

Solve the resulting set of equations in order to determine the following:

- (a) The molal flow rates of all vapor and liquid streams in the tower
- (b) The mole fraction of each component in the vapor and liquid streams

Note that the mole fractions in each stage do not add up to unity, because the above solution is only a single step in the solution of multicomponent distillation problem. Assumptions 2 and 3 are only initial guesses that must be subsequently corrected from energy balances and bubble point calculations.

**Table P2.5**

Component $i$	$\alpha_i$	$\beta_i$	$\gamma_i$
1	0.70	$0.30 \times 10^{-2}$	$0.65 \times 10^{-4}$
2	2.21	$1.95 \times 10^{-2}$	$0.90 \times 10^{-4}$
3	1.50	$-1.60 \times 10^{-2}$	$0.80 \times 10^{-4}$
4	0.86	$-0.97 \times 10^{-2}$	$0.46 \times 10^{-4}$
5	0.71	$-0.87 \times 10^{-2}$	$0.42 \times 10^{-4}$

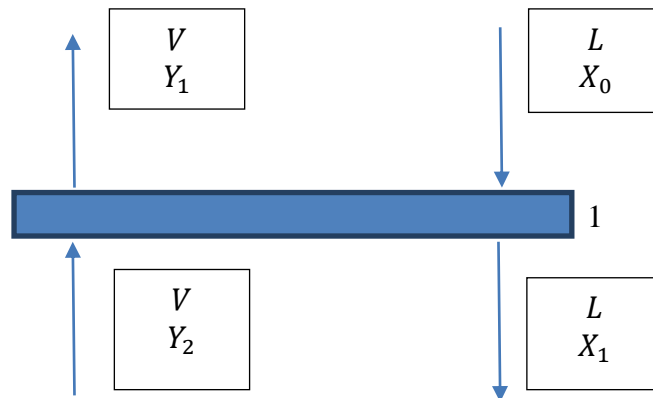
O Número de incógnitas do sistema será:

$$\text{Número de Incógnitas} = 2 * N_C * (N + 1) = 2 * 5 * (10 + 1) = 110$$

Onde  $N_C$  = Número de Componentes

$N$  = Número de Estágios na Coluna

%Balanço 1 Estagio



$$L.X_0 + V.Y_2 = L.X_1 + V.Y_1$$

$$L = r * D$$

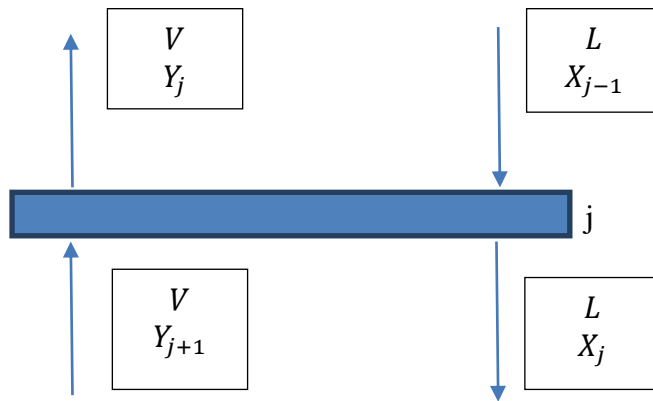
$$V = L + D$$

No Condensador, teremos somente mudança de fase, e não de composição, logo:

$$X_0 = Y_1 = X_D$$

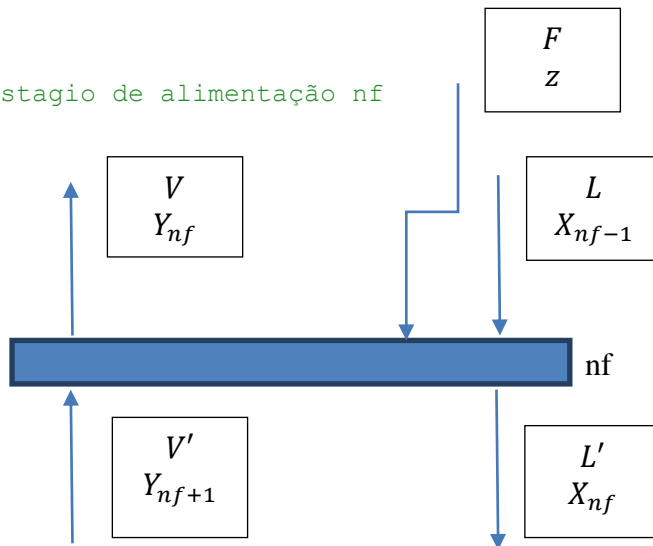
$$-L.X_1 + (L - V).Y_1 + V.Y_2 = 0$$

%Balanço j Estagio, acima do prato de alimentação



$$L.X_{j-1} - L.X_j - V.Y_j + V.Y_{j+1} = 0$$

%Balanço Estagio de alimentação nf

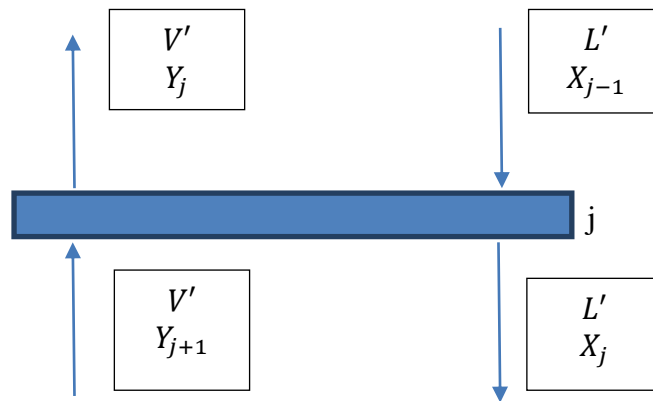


$$L.X_{nf-1} - L'.X_{nf} - V.Y_{nf} + V'.Y_{nf+1} = -F.z$$

$$V = V'$$

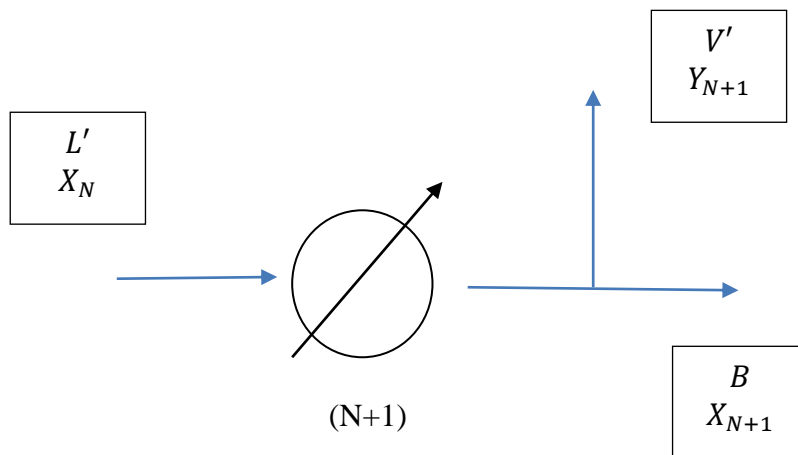
$$F + L = L'$$

%Balanço j Estagio, abaixo do prato de alimentação



$$L'.X_{j-1} - L'.X_j - V'.Y_j + V'.Y_{j+1} = 0$$

%Balanço refeededor, estagio (N+1)



$$L'.X_N - B.X_{N+1} - V'.Y_{N+1} = 0$$

%Balanço Total

$$F = D + B$$

%Relação de Equilíbrio

$$K_{j,i} * X_{j,i} - Y_{j,i} = 0$$

```

nc=5;
N=10;
F = 1000;
D = 500;
B = 500;
L = 1250;
V = 1750;
Llinha=F+L;
A=zeros(2*nc*(N+1),2*nc*(N+1));
b = zeros(2*nc*(N+1),1);
z = [0.06;0.17;0.22;0.2;0.35];
nf = 6;
alfa = [0.7,2.21,1.5,0.86,0.71];
beta = [0.3e-2,1.95e-2,-1.6e-2,-0.97e-2,-0.87e-2];
gama = [0.65e-4,0.9e-4,0.8e-4,0.46e-4,0.42e-4];
temp = linspace(140,230,(N+1));
for j = 1:N+1
    for i = 1:nc
        if j == 1
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-1)+i) = -L;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j-1)+i) = (L-V);
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j)+i) = V;
        elseif j < nf
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-2)+i) = L;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-1)+i) = -L;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j-1)+i) = -V;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j)+i) = V;
        elseif j == nf
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-2)+i) = L;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-1)+i) = -Llinha;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j-1)+i) = -V;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j)+i) = V;
            b(nc*(j-1)+i,1) = -F*z(i,1);
        elseif j > nf && j < N+1
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-2)+i) = Llinha;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-1)+i) = -Llinha;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j-1)+i) = -V;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j)+i) = V;
        else j == N+1
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-2)+i) = Llinha;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(j-1)+i) = -B;
            A(nc*(j-1)+i,nc*(N+1)+nc*(j-1)+i) = -V;
        end
    end
end
for j = 1:N+1
    for i = 1:nc
        A(nc*(N+1)+(nc*(j-1))+i,nc*(j-1)+i) =
        alfa(i)+beta(i)*temp(j)+gama(i)*(temp(j).^2);
        A(nc*(N+1)+(nc*(j-1))+i,nc*(N+1)+nc*(j-1)+i) = -1;
    end
end
x = A\b;
xb = x(nc*(N)+1:nc*(N)+5,1)
xd = x(nc*(N+1)+1:nc*(N+1)+5,1)

```

xb =

0.0000  
0.0000  
0.0501  
0.3846  
0.6931

xd =

0.1200  
0.3400  
0.3899  
0.0154  
0.0069

As Temperaturas de início, são chutes iniciais para o cálculo da constante de equilíbrio. Se mudarmos as temperaturas, mudamos as composições dos produtos. Se quisermos as temperaturas reais, será necessário realizar um balanço energético em cada prato.