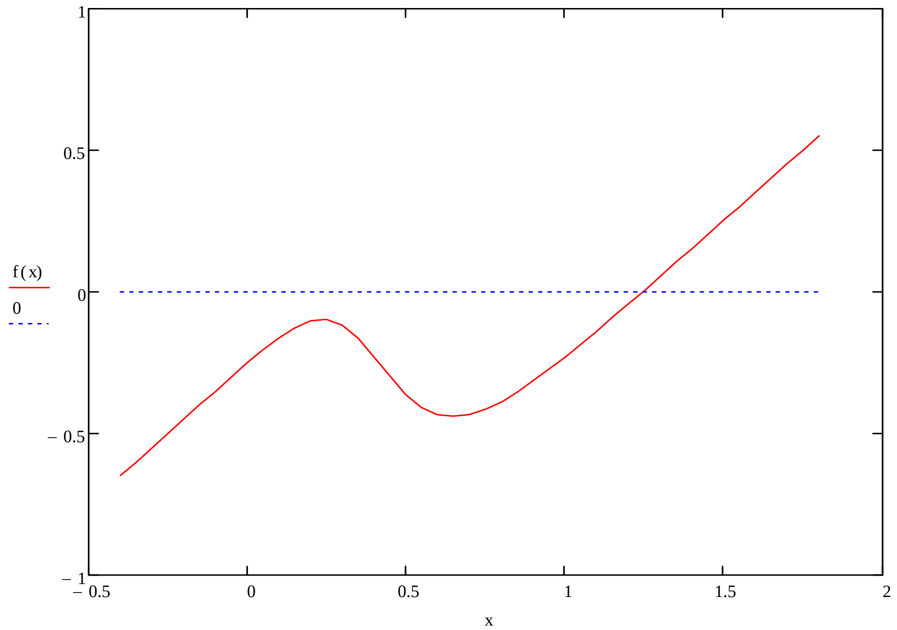
Questões de Testes (equação a uma variável)

1) Em um reator contínuo de tanque agitado, o reagente é alimentado a uma dada temperatura, concentração e vazão. No reator ocorre uma reação exotérmica de primeira ordem com remoção de calor por uma camisa de troca térmica para controlar a temperatura do reator. Para uma determinada condição de operação, o modelo matemático do reator em estado estacionário é descrito pela equação abaixo.

$$f(x) = x - 0,25 - \frac{\exp\left(\frac{20x}{1+x}\right)}{500 + \exp\left(\frac{20x}{1+x}\right)} = 0$$

(a) Encontre a solução estacionária através do método de Newton-Raphson partindo da estimativa inicial $x^{(0)} = 1,0$, admitindo um erro relativo não superior a 1% e apresentando os resultados de cada iteração. (b) Mostre no gráfico abaixo por que o método de Newton-Raphson não converge para a estimativa inicial $x^{(0)} = 0,0$.



2) Uma reação química de segunda ordem, irreversível e em fase líquida é conduzida em um reator tanque operando de forma cíclica. Assim, conduz-se uma batelada por um tempo t e depois de transcorrido este tempo, esvazia-se e se limpa o reator, levando esta última operação um tempo igual a t_c. Após passar pela etapa de esvaziamento/limpeza, conduz-se novamente uma batelada por um tempo t, e assim sucessivamente. Pode-se demonstrar, que o tempo ótimo da fase batelada que maximiza a taxa de produção do processo é obtido através da resolução da equação algébrica não linear:

$$\boxed{\left[1 + k \cdot (t + t_c)\right] \cdot e^{-k \cdot t} - 1 = 0} \quad (1)$$

ou na forma logarítmica:

$$\boxed{k \cdot t - ln\left[1 + k \cdot (t + t_c)\right] = 0} \quad (2)$$

Em que: k: constante de velocidade da reação= 2,0/hora.

t_c: tempo da operação de esvaziamento/limpeza = 1,5 horas.

Para calcular t, dois procedimentos iterativos distintos são aplicados:

(a) de (1) tem-se: $t = \frac{e^{k \cdot t} - 1}{k} - t_c$, dando origem à seguinte forma recursiva:

$\boxed{t^{(j+1)} = \frac{e^{k \cdot t^{(j)}} - 1}{k} - t_c}$ para j=0 , 1, $\cdots$ com $t^{(0)}$: *chute* inicial.

(b) de (2) tem-se: $t = \frac{ln\left[1 + k \cdot (t + t_c)\right]}{k}$, dando origem à seguinte forma recursiva:

$\boxed{t^{(j+1)} = \frac{ln\left[1 + k \cdot \left(t^{(j)} + t_c\right)\right]}{k}}$ para j=0, 1, $\cdots$ com $t^{(0)}$: *chute* inicial.

Na tabela abaixo são mostrados os valores de t obtidos pelos dois procedimentos.

	j	0	1	2	3	4	5	6
Procedimento (a)	t_k	0,5000	0,6409	–1,8612	–1,9879	–1,9906	–1,9907	–1,9907
Procedimento (b)	t_k	0,5000	0,8047	0,8622	0,8724	0,8741	0,8745	0,8745

Explique porque o procedimento (a) converge para um valor sem significado físico (valor negativo do tempo!), enquanto que o procedimento (b) converge para o valor *correto* $(t = 0{,}8745 \text{ h})$.

3) Para o escoamento turbulento de um fluido em um tubo liso, a expressão abaixo pode ser usada para determinar o fator de atrito, f, em função do número de Reynolds, Re. **(a)** Calcule o fator de atrito para Re = 3000, usando o método de Newton-Raphson, com 4 algarismos significativos corretos. Uma boa estimativa inicial para o fator de atrito pode ser obtido pela equação de Blasius: $f = 0{,}316\ Re^{(-0{,}25)}$; **(b)** Verifique se a solução pode ser obtida aplicando o método das substituições sucessivas isolando o f do lado esquerdo da equação, explicando o motivo.

$$\sqrt{f} = f \cdot \left[1{,}74 \cdot \ln\left(Re \cdot \sqrt{f}\right) - 0{,}4\right]$$

4) Modelo de Wagner para o cálculo da pressão de vapor de substâncias puras é dado pela expressão:

$$\ln(Pv/Pc) = (a \cdot x + b \cdot x^{1{,}5} + c \cdot x^3 + d \cdot x^6) / (1 - x)$$

onde $x = 1 - T / Tc$

T: temperatura, em K

Tc: temperatura crítica, em K

Pc: pressão crítica, em bar

Pv: pressão de vapor, em bar

Quando $Pv = P$ (pressão ambiente), T é a temperatura de saturação da substância. **(a)** Usando o método da bisseção, calcule a temperatura de saturação da água para P = 1,2 bar com 2 algarismos significativos corretos, dados:

a = –7,76; b = 1,46; c = –2,78; d = –1,23; Pc = 221,2 bar e Tc = 647,3 K.

(b) Qual é o número máximo de iterações deste método?