MS 211 - Turma Y - Projeto

Data de Entrega: 30/04/13

1. Considere o problema seguinte de engenharia quimica. A *lei de gas ideal* dada por:

$$pV = nRT\,,$$

onde p é a pressão absoluta, V é o volume, n é o número de moles, R é a constante universal de gas e T é a temperatura absoluta. Esta lei est sendo comunemente usada por engenheiros e cientistas. Porém, ela é somente precisa num domínio limitado de pressão e temperatura. Além disso, existem gases que não se adequam muito bem à esta lei.

Uma equação alternativa para o estado de gases dada por

$$(p + \frac{a}{v^2})(v - b) = RT\,,$$

conhecida com *equação van der Waals*. Aqui $v = V/n$ é o volume molal e a e b so constantes empíricas que dependem do gas particular.

Suponha que queremos determinar com precisão o volume molal de tanto dióxido de carbono e de oxigênio tal que containers apropriados podem ser escolhidos. Além disso, estamos interessados em saber quanto cada um dos dois gases corresponde ao lei de gas ideal através de uma comparação dos resultados obtidos para os volumes molais em termos das equações de gas ideal e van der Waals. Para ambos os gases, os volumes molais são calculados utilizando $n = 1$.

$$R = 0.082054L \cdot atm/(mol \cdot K)\,.$$

$$\text{dióxido de carbono} \begin{cases} a = 3.592 \\ b = 0.04267\,. \end{cases}$$

$$\text{oxigênio} \begin{cases} a = 1.360 \\ b = 0.03183\,. \end{cases}$$

(a) Verifique que o método de Newton-Raphson pode ser utilizado para estimar com precisão ε os volumes molais de dioxidio de carbono e de oxigłnio através da equação de van der Waals sob uma pressão dada p e numa temperatura dada T. Qual é a vantagem de aplicar o método de Newton-Raphson neste problema invès do método de secante? Como podemos obter um chute inicial apropriado para a aplicação do método de Newton-Raphson neste problema de engenharia quimica?

(b) Implemente o método de Newton-Raphson em Matlab, Scilab ou Octave.

(c) Resolve o problema descrito no item (a) anterior para todos $p \in \{1, 10, 100\}$ atm e $T = (k * c) \mod 500 + 250$ K, onde c é igual a seu RA, para $k = 1, 2$ com precisão $\varepsilon = 10^{-4}$. Explique como você aplicou o método de Newton-Raphsonm e preenche a tabela seguinte (verificando os 2 critérios de parada discutidos na aula) em cada aplicação do método:

k	x_k	$f(x_k)$	$x_k - x_{k-1}$

(d) Compare os seus resultados obtidos através da equação van der Waals com aqueles obtidos diretamente da lei de gas ideal. Interprete os graus de concordância de cada um dos dois gases com a lei de gas ideal.