

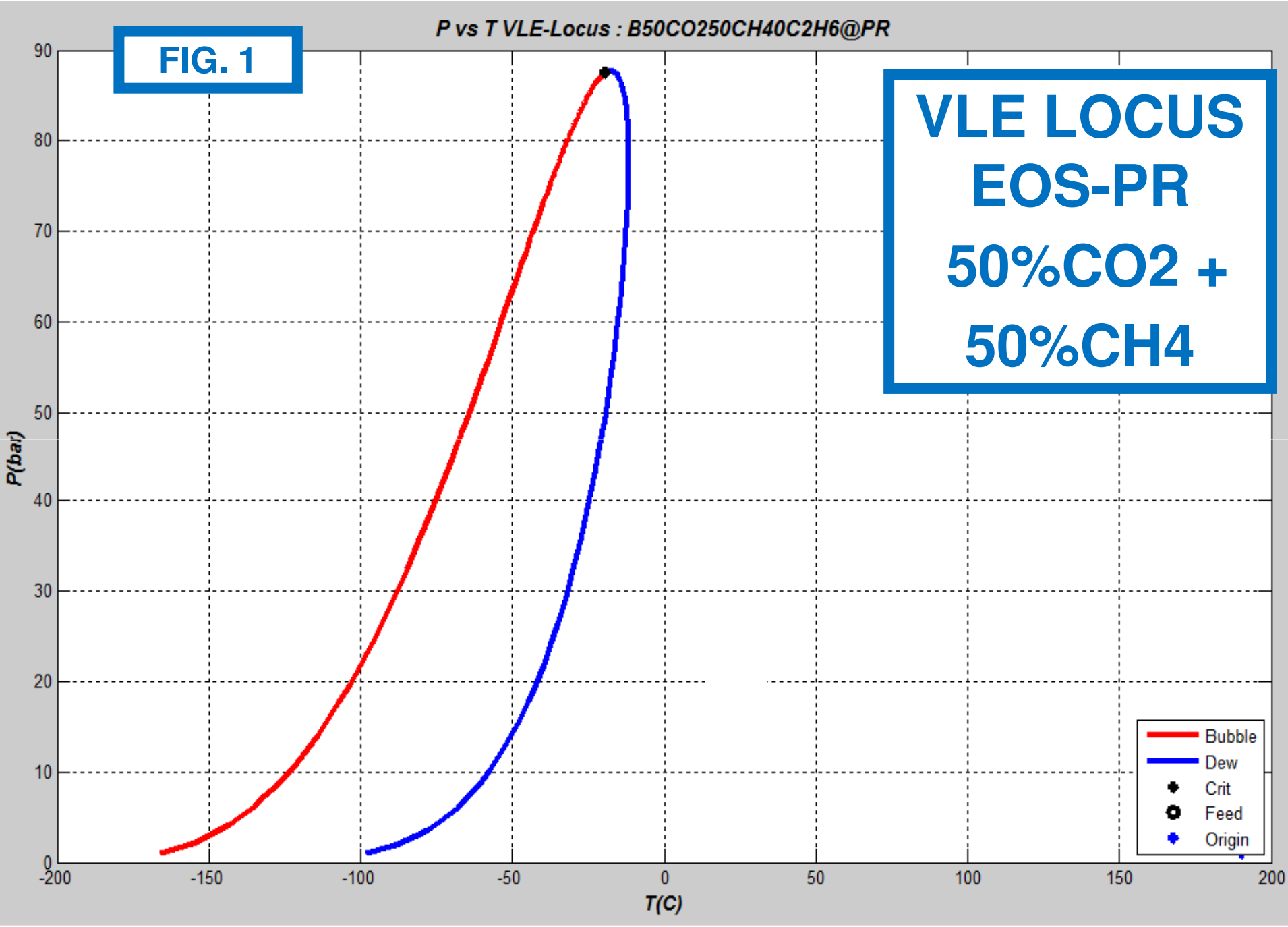
Trabalho 2 :

Traçar Envelope VLE no Plano T X P, para Sistema NG (CH₄+CO₂) com Composição Total Constante (CTC). EOS e CTC's já foram definidos na aula anterior p/ cada Grupo. O Envelope deverá constar de:

- **Bubble Locus** : Curva de Bolha
- **Dew Locus** : Curva de Orvalho
- **CRIT** : Pto Crítico (obtido por aproximação)

Observações sobre Resolução (Sugestões):

- **Criar 2 Resolvedores : BUBBLE e DEW**
- **BUBBLE opera com $\underline{X} = \text{CTC}$ necessitando de Especificação de 1 GL (Grau de Lib.) p/ varrer o Bubble Locus. Variáveis a buscar: T, P, \underline{Y}**
- **DEW opera com $\underline{Y} = \text{CTC}$, necessitando de Especificação de 1 GL p/ varrer Dew Locus. Variáveis a buscar: T, P, \underline{X}**
- **Faixa de Varredura : Ambos os Loci saindo de baixa pressão (1 bar) até próximo ao Pto Crítico. A Figura Típica deverá ser como na Fig. 1.**



- **Equações de 1 pto BUBBLE :**

Vars : T, P, \underline{Y} (nc+2 ao todo)

Eqs : ELV, Normalização Y , Especificação (nc+2 ao todo)

Parâmetro de Passo Angular (rd) de Varredura do Locus : θ

$$\ln \hat{\phi}_i^V + \ln Y_i - \ln \hat{\phi}_i^L - \ln X_i = 0 \quad (i = 1..nc)$$

$$\sum_{i=1}^{nc} Y_i - 1 = 0$$

$$E(T, P, \theta) = 0$$

- **Equações de 1 pto DEW :**

Vars : T, P, \underline{X} (nc+2 ao todo)

Eqs : ELV, Normalização X , Especificação (nc+2 ao todo)

Parâmetro de Passo Angular (rd) de Varredura do Locus : θ

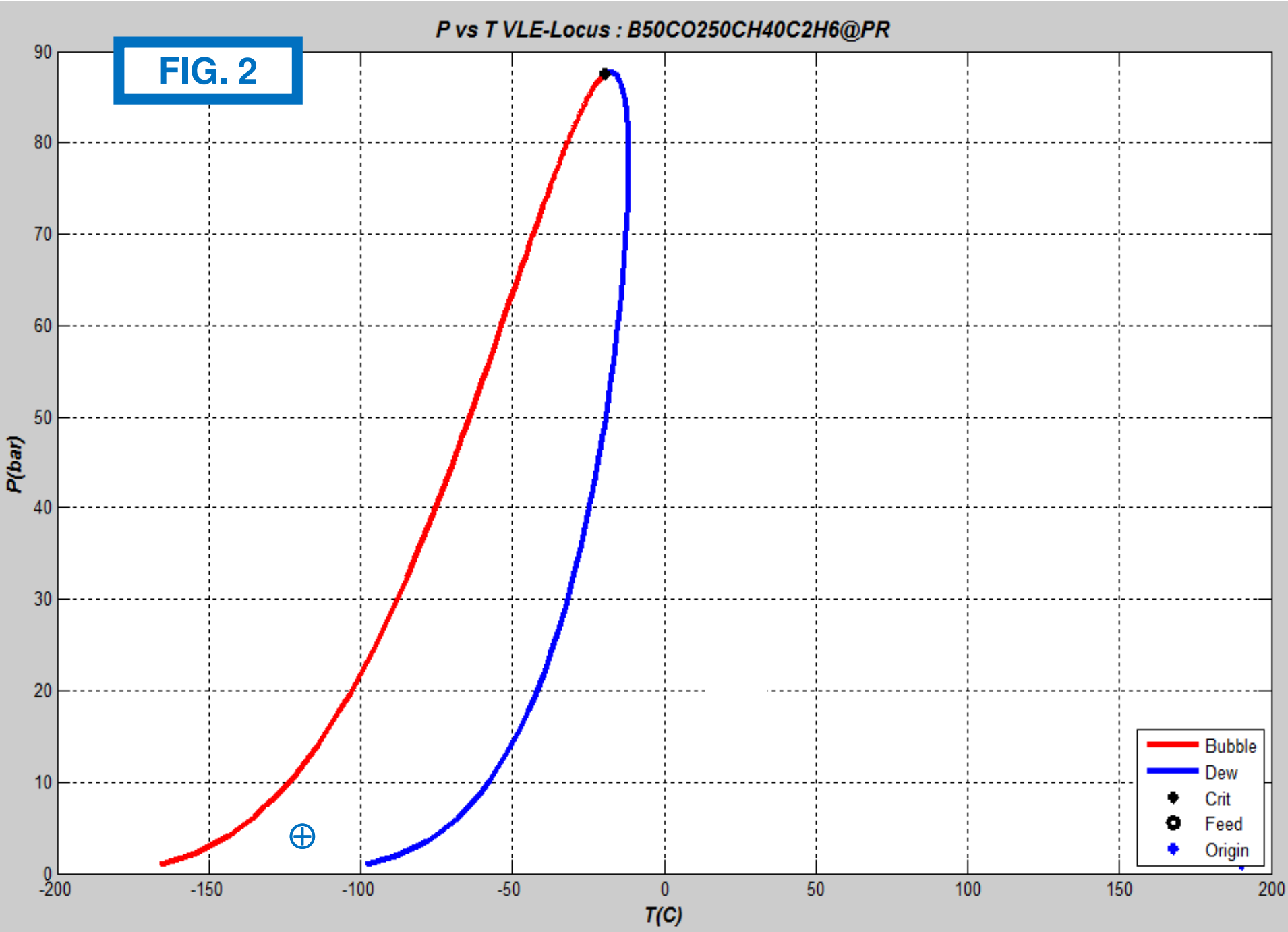
$$\ln \hat{\phi}_i^L + \ln X_i - \ln \hat{\phi}_i^V - \ln Y_i = 0 \quad (i = 1..nc)$$

$$\sum_{i=1}^{nc} X_i - 1 = 0$$

$$E(T, P, \theta) = 0$$

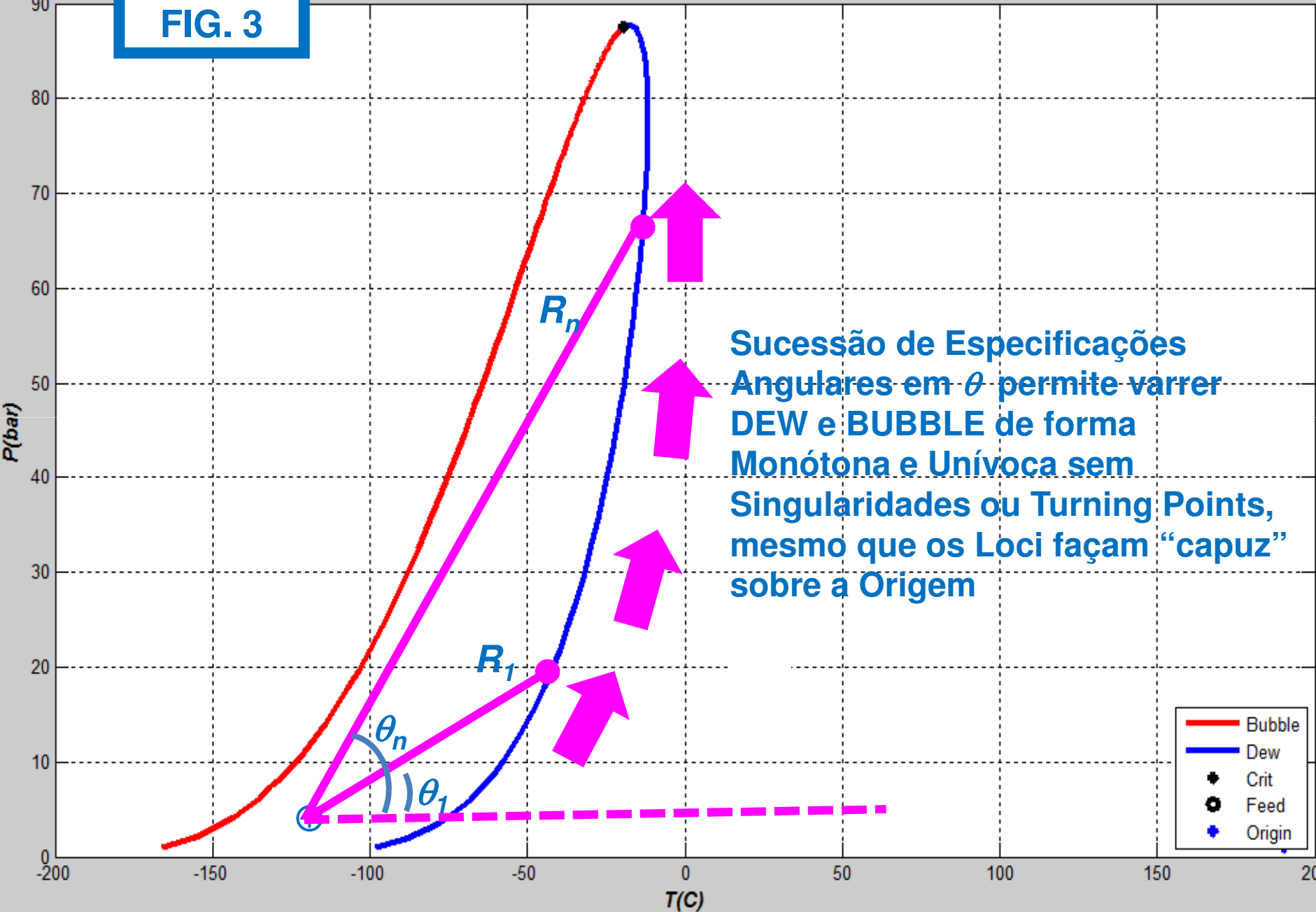
Aplicação da Equação de Especificação de ambos Resolvedores :

- (1) Defina Origem Próximo à base do Locus VLE em 1 bar (Fig.2) com coordenadas ($TORI$, $PORI = 1bar$). Para isto, $TORI$ deve estar entre as Temperaturas de Bolha e de Orvalho a 1bar (estime-as, se necessário, usando outro metodo ou chutando)
- (2) Desta origem, sairá o Raio Vetor R girando o Ângulo de Varredura θ de acordo com o caso (Fig. 3) (o valor de R não importa e irá variar à medida que CRIT é aproximado) :
 - (2a) BUBBLE : de 0 rd com incremento **positivo** até atingir CRIT pouco antes de $\pi/2$ rd (o valor angular exato desta posição depende do Gás e da Origem)
 - (2b) DEW : de π rd com incremento **negativo** até atingir CRIT próximo ao mesmo valor anterior pouco abaixo de $\pi/2$ rd (aprox.)
- (3) Usar tamanho de incrementos pequeno (tipo 0.005rd) de modo que cada Locus tenha pelo menos 100 ou mais ptos



P vs T VLE-Locus : B50CO250CH40C2H6@PR

FIG. 3



• **Equação de Especificação $E(T,P,\theta)=0$ Proposta:**

$$(P - PORI) - tg(\theta) \cdot (T - TORI) = 0$$

- Valores são atribuídos a θ (de acordo com o incremento apropriado a BUBBLE ou a DEW) servindo p/ especificar um novo ponto (Ponto da Vez) do Locus a ser calculado;
- Em seguida, acionar algoritmo Newton-Raphson (com este θ fixo) para resolver o Ponto da Vez e obter novos T, P, \underline{X} (caso DEW) ou novos T, P, \underline{Y} (BUBBLE). Use último pto calc. como estim. inicial.
- Sendo o Sistema de Equações referenciado, por exemplo, como no caso DEW abaixo (θ, \underline{Y} são parâmetros fixos no ponto):

$$\underline{F}(\underline{\eta}, \theta, \underline{Y}) = \underline{0} \quad \left\{ \begin{array}{l} \ln \hat{\phi}_i^L + \ln X_i - \ln \hat{\phi}_i^V - \ln Y_i = 0 \quad (i = 1..nc) \\ \sum_{i=1}^{nc} X_i - 1 = 0 \\ P - PORI - tg(\theta) \cdot (T - TORI) = 0 \end{array} \right.$$

$$\text{onde } \underline{\eta} = \begin{bmatrix} T \\ P \\ \underline{X} \end{bmatrix}$$

• **Algoritmo Newton-Raphson fica exemplificado (para DEW) como:**

1. Entrar $\underline{\eta}^{(0)}, \theta^{DAVEZ}, \underline{Y}, PORI, TORI$

2. $ERRO = 1; n = 0$

3. Enquanto ($ERRO > 10^{-8}$) & ($n \leq 200$)

Com $\underline{\eta}^{(n)}, \underline{Y}$ Calcular $\ln \hat{\phi}^V, \ln \hat{\phi}^L$

Com $\underline{\eta}^{(n)}, \underline{Y}, \theta^{DAVEZ}$ Calcular $\underline{F}^{(n)} = \underline{F}(\underline{\eta}^{(n)}, \theta^{DAVEZ}, \underline{Y})$

Com $\underline{\eta}^{(n)}, \underline{Y}, \theta^{DAVEZ}$ Calcular $\underline{J} = \left[\nabla_{\underline{\eta}} \underline{F}^T \right]^T$

Calcular $\underline{S} = -\underline{J}^{-1} \underline{F}^{(n)}$; $ERRO = \|\underline{S}\|$

Escolher $FREIO \in [0,1]$ com $\|\underline{S}\|$ (se $\|\underline{S}\| \leq 0.1 \Rightarrow FREIO = 1$)

$\underline{\eta}^{(n+1)} = \underline{\eta}^{(n)} + FREIO * \underline{S}$

$n = n + 1;$

4. Solução : $\underline{\eta} = \underline{\eta}^{(n)}$