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):

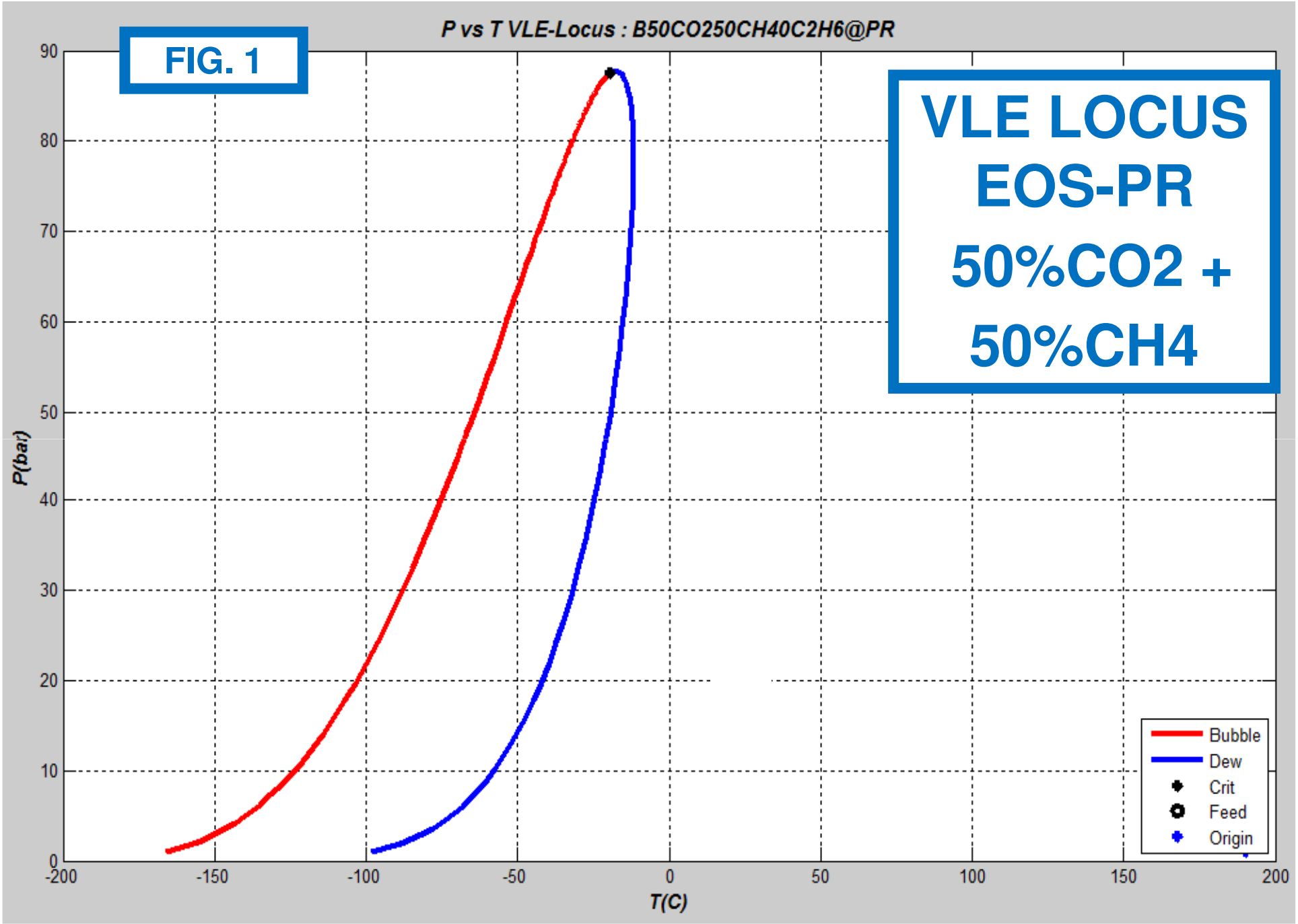
- **Criar 2 Resolvedores : BUBBLE e DEW**

- **BUBBLE opera com *X* = CTC necessitando de Especificação de 1 GL (Grau de Lib.) p/ varrer o Bubble Locus. Variáveis a buscar: *T, P, Y***

- **DEW opera com *Y* = CTC, necessitando de Especificação de 1 GL p/ varrer Dew Locus. Variáveis a buscar: *T, P, 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.**

FIG. 1


P vs T VLE-Locus : B50CO250CH40C2H6@PR
VLE LOCUS
EOS-PR
50%CO2 +
50%CH4
P(bar)
T(C)
0
10
20
30
40
50
60
70
80
90
-200
-150
-100
-50
0
50
100
150
200
Bubble
Dew
Crit
Feed
Origin

- **Equações de 1 pto BUBBLE :**

  Vars : *T, P, Y* (nc+2 ao todo)

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

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

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

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

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

- **Equações de 1 pto DEW :**

  Vars : *T, P, X* (nc+2 ao todo)

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

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

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

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

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

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

FIG. 2

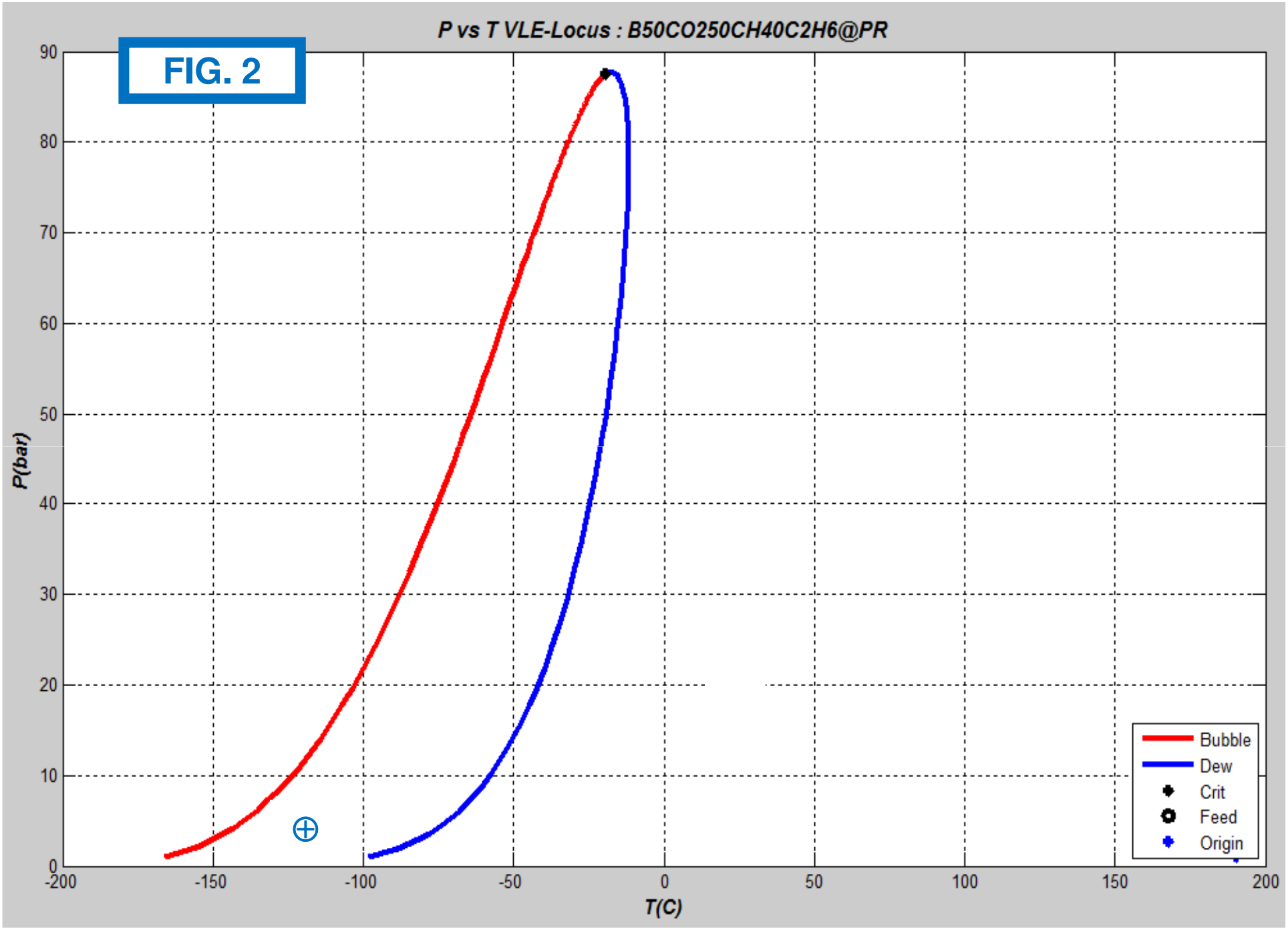
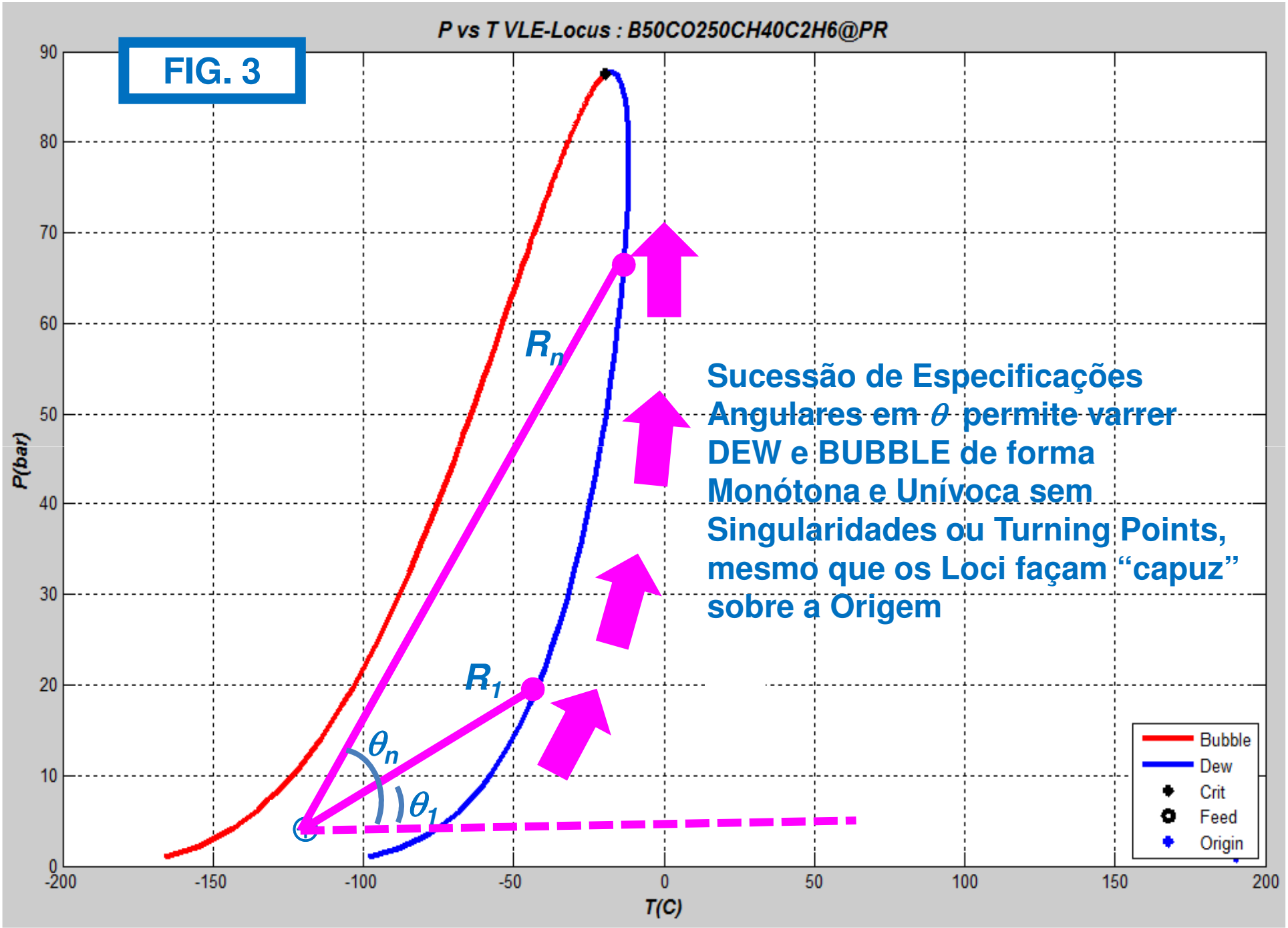

P vs T VLE-Locus : B50CO250CH40C2H6@PR
P(bar)
T(C)
90
80
70
60
50
40
30
20
10
0
-200
-150
-100
-50
0
50
100
150
200
Bubble
Dew
Crit
Feed
Origin

FIG. 3



Sucessão de Especificações Angulares em θ permite varrer DEW e BUBBLE de forma Monótona e Unívoca sem Singularidades ou Turning Points, mesmo que os Loci façam "capuz" sobre a Origem

• Equação de Especificação *E(T,P,θ)=0* Proposta:

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

- 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):

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

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

• 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 $\ln \underline{\hat{\phi}}^{V}, \ln \underline{\hat{\phi}}^{L}$

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

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

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

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