

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROJETO DE GRADUAÇÃO**

**FELIPE SANTOS RIBEIRO
WANDERSON LUIS RANGEL TEIXEIRA**

**MODELAGEM MATEMÁTICA PARA GASES REAIS APLICADA A
ESCOAMENTO EM DUTOS**

VITÓRIA
2008

FELIPE SANTOS RIBEIRO
WANDERSON LUIS RANGEL TEIXEIRA

**MODELAGEM MATEMÁTICA PARA GASES REAIS APLICADA A ESCOAMENTO
EM DUTOS**

Projeto de Graduação apresentado
ao Programa de Graduação em
Engenharia Mecânica da Universidade
Federal do Espírito Santo, como requisito
parcial para obtenção do Grau em
Bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Dr. Juan Sergio
Romero Saenz

VITÓRIA
2008

**FELIPE SANTOS RIBEIRO
WANDERSON LUIS RANGEL TEIXEIRA**

**MODELAGEM MATEMÁTICA PARA GASES REAIS APLICADA A ESCOAMENTO
EM DUTOS**

Projeto de Graduação apresentado ao Programa de Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau em Bacharel em Engenharia Mecânica.

Aprovado em 01 de dezembro de 2008.

COMISSÃO EXAMINADORA

Dr. Juan Sergio Romero Saenz
Universidade Federal do Espírito Santo
Orientador

Dr. João Luiz Marcon Donatelli
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Danilo de A. Barbosa
Universidade Federal do Espírito Santo

RESUMO

Este projeto tem como objetivo a modelagem do escoamento de gases reais em dutos de seção transversal constante. A partir do conhecimento das condições de entrada da tubulação foi possível calcular pressão, temperatura, volume específico e velocidade do gás em qualquer ponto ao longo do duto. Para a modelagem do escoamento utilizou-se o método iterativo de Newton-Raphson e a linguagem de programação FORTRAN. Antes, porém, foi feita uma análise do desvio de comportamento do gás real com relação ao gás ideal, quando submetido a condições pré-estabelecidas de pressão e temperatura. Observou-se que o aumento da pressão do gás provocou seu afastamento da condição de idealidade, enquanto que o aumento da temperatura o aproximou dela. Analisou-se também a exatidão das principais equações de estado para gases reais, comparando o volume específico com os dados experimentais. Para as equações de estado estudadas (Van der Waals, Redlich-Kwong e Beattie-Bridgeman), foi constatado que os desvios com relação aos dados experimentais foram bem pequenos.

Palavras chave: Modelagem. Gás real. Gás ideal. Equações de estado.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Isotermas para diversos gases	4
Figura 2 Seção transversal de um duto.....	11
Figura 3 Diagrama $P \times v$ para o desvio da equação de Van der Waals em relação a equação de estado de gás ideal.....	22
Figura 4 Diagrama $P \times v$ para o desvio da equação de Redlich-Kwong em relação a equação de estado de gás ideal.....	22
Figura 5 Diagrama $P \times v$ para o desvio da equação de Beattie Bridgeman em relação a equação de estado de gás ideal.....	23
Figura 6 Variações para o fator de Compressibilidade (Z) do gás ideal e do gás real utilizando a equação de Van der Waals.....	24
Figura 7 Variações para o fator de Compressibilidade (Z) do gás ideal e do gás real utilizando a equação de Redlich-Kwong.....	24
Figura 8 Variações para o fator de Compressibilidade (Z) do gás ideal e do gás real utilizando a equação de Beattie-Bridgeman.....	25
Figura 9 Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 275 K.....	26
Figura 10 Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 300K.....	26
Figura 11 Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 350 K.....	27
Figura 12 Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 400 K.....	27
Figura 13 Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 275 K.....	28

LISTA DE FIGURAS

Figura 14 Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 300K.....	28
Figura 15 Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 350 K.....	29
Figura 16 Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 400 K.....	29
Figura 17 Pressão em função do comprimento – Modelagem para gás ideal, considerando pressão de entrada de 2MPa.....	40
Figura 18 Massa específica em função do comprimento - Modelagem para gás ideal, considerando pressão de entrada de 2MPa.....	41
Figura 19 Velocidade em função do comprimento - Modelagem para gás ideal, considerando pressão de entrada de 2MPa.....	41
Figura 20 Pressão em função do comprimento - Modelagem para gás real, considerando pressão de entrada de 10MPa.....	42
Figura 21 Massa específica em função do comprimento - Modelagem para gás real, considerando pressão de entrada de 10MPa.....	43
Figura 22 Velocidade em função do comprimento - Modelagem para gás real, considerando pressão de entrada de 10MPa.....	43

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 Constantes Críticas de Van der Waals para vários gases.....	8
Tabela 2 Constantes para a equação de Beattie-Bridgeman.....	9
Tabela 3 Volume Específico (m^3/kg), para a equação de estado de Gás Ideal...	20
Tabela 4 Volume Específico (m^3/kg), Van der Waals.	20
Tabela 5 Volume Específico (m^3/kg), Redlich-Kwong.....	21
Tabela 6 Volume Específico (m^3/kg), Beattie Bridgeman.....	21
Tabela 7 Metano Superaquecido - Volume Específico (m^3/kg).....	25
Tabela 8 Modelagem utilizando a equação de estado de gás ideal.....	40
Tabela 9 – Modelagem utilizando a equação de estado de Beattie-Bridgeman.....	42

SUMÁRIO

1 Introdução.....	1
2 Fundamentos Teóricos.....	2
2.1 Gás ideal e gás real.....	2
2.2 Equações de estado.....	2
2.3 Equação de estado para gás ideal.....	3
2.4 Fator de compressibilidade.....	6
2.5 Equações de estado para gases reais.....	6
2.5.1 Equação de estado de Van der Waals.....	7
2.5.2 Equação de estado de Redlich-Kwong.....	9
2.5.3 Equação de estado de Beattie-Bridgeman.....	9
2.5.4 Equação de estado na forma virial.....	10
2.6 Escoamento com atrito em dutos com seção constante.....	11
2.6.1 Hipóteses.....	12
2.6.2 Equações físicas governantes.....	12
2.6.2.1 Equação da energia.....	12
2.6.2.2 Equação da continuidade.....	13
2.6.2.3 Conservação do momento.....	13
2.6.2.4 Balanço total da energia mecânica.....	14
2.6.3 Fluxos adiabáticos.....	15
3 Análise do desvio de comportamento entre o gás real e o ideal....	17
3.1 Metodologia.....	17
3.1.2 Método de Newton-Raphson.....	17
3.2 Cálculo do volume específico	18
3.3 Análise das equações de estado.....	25
4 Modelagem matemática para escoamento em dutos.....	31
4.1 Modelagem do escoamento utilizando a equação de estado de gás ideal.....	31
4.2 Modelagem do escoamento utilizando a equação de estado de Beattie-Bridgeman.....	34
4.3 Resultados da modelagem	39
5 Conclusão.....	44
6 Referências.....	45

1 INTRODUÇÃO

O escoamento de gás compressível em dutos de seção transversal constante é importante em vários campos da engenharia, entre eles podemos citar plantas de potência estacionárias, motor de propulsão de aeronaves, transporte de fluidos em plantas de processos químicos, transporte de gás natural em dutos longos e outros tipos de fluxos em equipamentos.

Quando o escoamento de gás natural é feito em dutos longos e enterrados, seu comportamento possui características adiabáticas, pois a terra ao redor dos dutos atua como isolante térmico.

No escoamento compressível as variações de massa específica não são desprezíveis, $\frac{\partial \rho}{\partial x} \neq 0$, ou seja, ao longo do escoamento compressível a massa específica não é constante.

Em escoamentos incompressíveis, as variações de massa específica do fluido são pequenas em todos os pontos do escoamento. Isso significa que a modelagem do escoamento de um fluido em dutos é bastante simplificada.

Na presença de variações de massa específica não desprezíveis, como ocorre nos escoamentos compressíveis, considerando o atrito na parede dos dutos, decorre que necessitamos da equação da continuidade, da conservação do momento, da equação da energia total e das equações de estado para modelar o escoamento (pressão, temperatura, volume, entalpia).

Este trabalho vai se concentrar na análise do escoamento compressível, adiabático, com atrito, para o transporte de gás em dutos de seção transversal constante.

2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 GÁS IDEAL E GÁS REAL

Um gás ideal pode ser caracterizado pelas seguintes propriedades: possui um número muito grande de moléculas, consideradas esferas rígidas de diâmetro d ; as partículas possuem massa m maior que zero e volume individual desprezível, quando comparado ao volume do recipiente que as contêm; as interações intermoleculares, de atração e de repulsão, são desprezíveis, exceto quando ocorrem colisões mútuas e com as paredes do recipiente; a energia interna encontra-se na forma de energia cinética translacional; as moléculas se propagam em linha reta; e as colisões são perfeitamente elásticas – a energia cinética não é conversível à outra forma de energia – e de curto tempo de duração (Kauzmann, 1970). Dessa forma, as propriedades macroscópicas evidentes de um gás ideal são conseqüências principalmente do movimento independente da molécula (Mahan & Myers, 2000).

Quando submetido a altas pressões o gás desvia-se da idealidade, ou seja, apresenta um comportamento não ideal. À temperatura ambiente e baixa pressão praticamente não ocorre desvios da idealidade, porém, à medida que a pressão aumenta o comportamento desses gases divergem (Castellan, 1978).

Um gás real existe sob a maioria das condições de temperatura e pressão e é constituído por partículas materiais dotadas de movimento caótico, sujeitas às forças de atração à longa distancia e forças de repulsão à curta distancia (Kauzmann, 1970). Portanto o gás real é formado por partículas que possuem massa $m > 0$, volume $V > 0$ e força de interação entre partículas $\vec{f} \neq 0$.

2.2 EQUAÇÕES DE ESTADO

A equação de estado expressa uma relação entre duas ou mais propriedades termodinâmicas. Em sistemas de um componente e de uma fase, a equação de estado incluirá sempre três propriedades, duas das quais podem ser adaptadas

como variáveis independentes. Embora, em princípio, poderiam resultar em relações funcionais envolvendo três propriedades termodinâmicas quaisquer (tais como temperatura T , pressão P , volume V , energia interna U e entropia S), as expressões analíticas das relações entre propriedades têm sido limitadas quase que completamente a P , T e V . Devido à dificuldade de compreensão das interações que ocorrem entre as moléculas, têm sido utilizados métodos empíricos para desenvolver muitas das equações de estado $P - V - T$ de uso geral (Balzhiser, Samuels, Eliassen, 1979).

Visto que a pressão, o volume e a temperatura podem ser medidos diretamente, os dados necessários para avaliar as constantes em tais equações podem ser obtidos experimentalmente. Propriedades tais como energia interna e entropia não são diretamente medidas e devem ser calculadas a partir de outras propriedades por meio de relações termodinâmicas apropriadas.

Uma equação de estado pode ser extensa e complicada, incluindo às vezes até 15 termos ou curtas e simples como no caso da equação de estado de gás ideal. A eleição de qual equação se usar em uma determinada aplicação depende principalmente da precisão desejada. Dado que os coeficientes de quase todas as equações de estado devem ser avaliados ajustando ou adaptando as equações a diversos dados experimentais $P - V - T$.

2.3 EQUAÇÃO DE ESTADO PARA GÁS IDEAL

Uma equação de estado é genericamente definida como:

$$f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

Segundo (Balzhiser, Samuels, Eliassen, 1979), medindo as seguintes propriedades P (pressão), v' (volume específico molar) e T (temperatura) para diversos gases em experiências e plotando o gráfico do produto $\frac{P v'}{T}$ teremos:

- cada temperatura tem uma curva própria chamada isoterma;
- todas as isotermas de cada gás tendem ao mesmo ponto para $P = 0$;
- todos os gases tendem ao mesmo valor limite para $P = 0$;

Que pode ser comprovado através da figura 1.

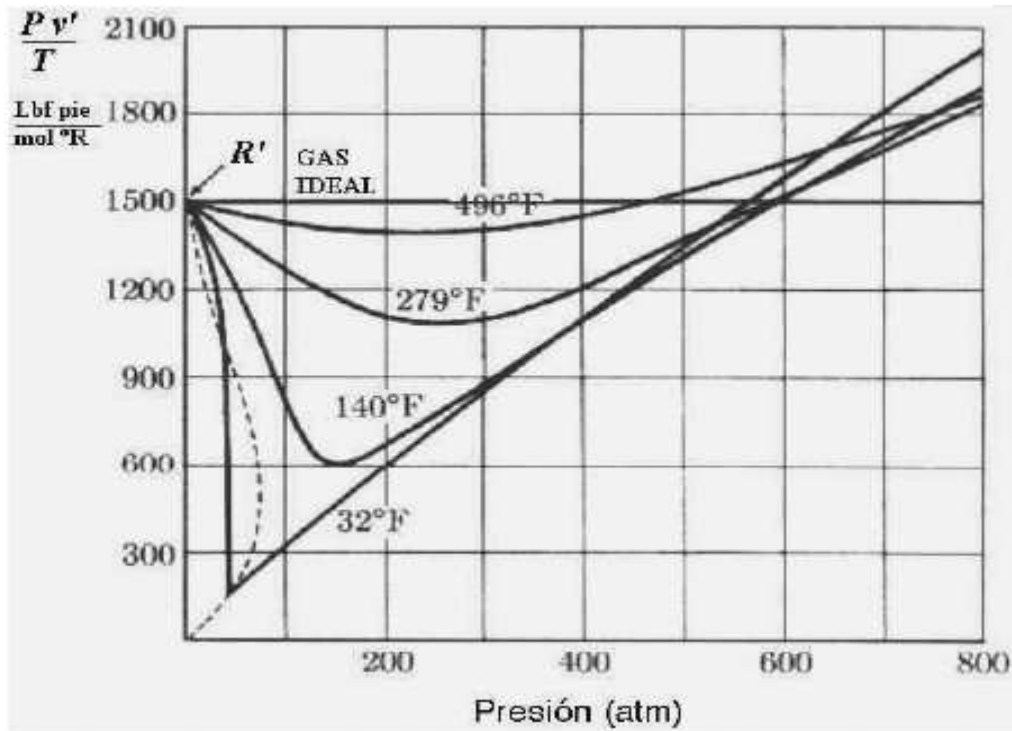


Figura 1 – Isotermas para diversos gases (retirado de Balzhiser, Samuels, Eliassen, 1979).

Este limite para todos os gases se denomina constante universal dos gases:

$$R' = \lim_{p \rightarrow 0} \frac{P v'}{T}$$

Essa equação pode ser simplificada (para pressão moderada e baixas massa específicas) por:

$$P v' = R' T \quad (1)$$

onde o valor da constante é $R' = 8,3145 \frac{KJ}{Kmol K}$ (Balzhiser, Samuels, Eliassen, 1979).

Se dividirmos a constante universal dos gases pelo peso molecular de uma substância - PM , obtemos a constante para um gás particular:

$$R = \frac{R'}{PM}$$

Considerando o v (volume específico), n (número de mols), m (massa) e ρ (massa específica), temos as seguintes relações:

$$V = v m$$

$$V = v' n$$

$$n = \frac{m}{PM}$$

$$\rho = \frac{1}{v}$$

logo:

$$P v' = R' T \Rightarrow \frac{P V}{n} = R P M T \Rightarrow P v \frac{m}{n} = R \frac{m}{n} T$$

e finalmente:

$$P v = R T \tag{2}$$

que é a equação de estado para gases ideais. Esta relação válida a baixa pressão, baixa massa específica e quando a interação entre as moléculas é considerada desprezível. Quando as massas específicas são altas as moléculas se encontram relativamente cercadas entre si e começam a ter influência às interações mútuas: atração, repulsão, efeitos elétricos por momento dipolar elevado e etc. que tornam mais complexo seu comportamento de modo que o modelo simples, como a equação de gases ideais não seja mais adequado.

2.4 FATOR DE COMPRESSIBILIDADE:

É de suma importância o conhecimento da faixa de massa específica em que a equação dos gases ideais pode prever o comportamento de um gás real com boa precisão e, também, o quanto o comportamento de um gás real desvia-se daquele do gás ideal, a uma dada pressão e temperatura. Segundo van Wylen et al. (2003) essas informações podem ser esclarecidas a partir do conceito de fator de compressibilidade Z , o qual é definido como:

$$Z = \frac{Pv}{RT} \quad (3)$$

Verifica-se por meio da equação (3) que, quando se trata de um gás ideal $Z = 1$, e o afastamento de Z , em relação a unidade, é uma medida do desvio de comportamento do gás real em relação ao previsto pela equação de estado dos gases ideais.

Segundo Russel (1994), o desvio do comportamento do gás ideal é mais evidente a altas pressões e baixas temperaturas. O valor do fator de compressibilidade de um gás real pode ser maior ou menor que 1,0 a altas pressões.

2.5 EQUAÇÕES DE ESTADO PARA GASES REAIS

É desejável que se tenha em lugar do modelo de gás ideal, uma equação de estado que represente com precisão o comportamento $P - V - T$ de um dado gás em toda região de vapor superaquecido, ou seja, onde a pressão e massa específica podem possuir valores elevados.

Existem inúmeras equações de estado propostas e utilizadas para correlacionar o comportamento dos gases reais, podendo ser simples ou complexas, dentre as quais podemos citar:

- Van der Waals
- Berthelot
- Clausius
- Redlich-Kwong
- Beattie-Bridgeman
- Peng-Robison
- Benedict-Webb-Rubin
- Equação Virial

Neste trabalho foram analisadas as equações de estado de Van der Waals, Redlich-Kwong, Beattie-Bridgeman.

2.5.1 EQUAÇÃO DE ESTADO DE VAN DER WAALS

Em 1873, Van der Waals propôs uma modificação na equação de gás ideal. Introduziu dois fatores não considerados, as forças intermoleculares e o volume ocupado pelas moléculas. Segue abaixo a equação de Van der Waals:

$$\left(P + \frac{a}{v^2}\right) (v - b) = R \quad (4)$$

O termo $\frac{a}{v^2}$ é responsável pelas forças intermoleculares e o termo b é responsável pelo volume ocupado pelas moléculas.

Os termos a e b são chamados coeficientes de Van der Waals, e são determinados experimentalmente pelo ajuste de isotermas de Van der Waals com dados experimentais.

Tabela 1 - Constantes Críticas de Van der Waals para vários gases

Gás	P_c, atm	T_c, °R	a, atm.pés⁶/(mol_{lb})²	b, pés³/(mol_{lb})
O ₂	50,1	278,6	349	0,510
N ₂	33,5	227,1	346	0,618
H ₂ O	218,3	1165,3	1400	0,486
CO	34,5	240	374	0,630
CO ₂	72,9	547,5	924	0,685
CH ₄	45,8	343,9	579	0,684
C ₂ H ₆	48,2	549,8	1410	1,04
C ₃ H ₈	42,0	665,9	2370	1,45
C ₄ H ₁₀	37,5	765,2	3670	1,94
NH ₃	111,3	729,8	1080	0,598
H ₂	12,8	59,9	63	0,427

Fonte: K. A. Kobe e R. E. Lynn, Jr., Chem (1953).

Também é possível determinar as constantes a e b sem recorrer a dados $P - V - T$ específicos, levando-se em conta a seguinte observação geral: os dados experimentais $P - V$ de todas as substâncias reais em sua temperatura crítica indicam que a isotérmica $P - V$ passa por um ponto de inflexão horizontal na pressão crítica da substância.

Então, a 1ª e 2ª derivada, neste ponto, de P relativamente a v são zero:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_T = 0$$

quando $P = P_c$ (pressão crítica) e $T = T_c$ (temperatura crítica).

Assim obtemos os valores das constantes de Van der Waals: (Balzhiser, Samuels, Eliassen, 1979).

$$a = \frac{27}{64} R^2 \frac{T_c^2}{P_c}$$

$$b = \frac{R T_c}{8 P_c}$$

2.5.2 EQUAÇÃO DE ESTADO DE REDLICH-KWONG:

Infelizmente, a equação de Van der Waals não representa muito bem os dados $P - V - T$ experimentais, exceto a pressões muito baixas (onde não é muito ruim a equação de gás ideal). Obviamente qualquer equação de estado com duas constantes pode representar melhor os dados experimentais. Foram propostas muitas formas de equações com duas constantes, mas a equação de Redlich-Kwong (REDLICH e KWONG, 1949) é possivelmente a mais exata a pressões elevadas. Segue abaixo a equação de Redlich-Kwong:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{T^{0,5} v (v + b)} \quad (5)$$

onde a e b são as constantes de Redlich-Kwong. Assim como mostrado na equação de Van der Waals, ao impormos a condição de que a isoterma possui uma inflexão horizontal num ponto crítico, é possível expressar a e b em função somente da pressão e temperatura críticas do fluido:

$$a = 0,42748 \frac{R^2 T_c^{5/2}}{P_c}$$

$$b = 0,08664 \frac{RR_c}{R_c}$$

A equação de Redlich-Kwong é considerada por muitos como a melhor equação de estado com duas constantes, mas não se pode esperar, que descreva precisamente os dados $P - V - T$ em grandes intervalos de pressão e temperatura. (Balzhiser, Samuels, Eliassen, 1979).

2.5.3 EQUAÇÃO DE ESTADO DE BEATTIE-BRIDGEMAN

Esta equação (1928) é resultado da idéia de que um aumento da quantidade de constantes integrantes de uma equação de estado deverá significar uma melhor precisão para descrever o comportamento dos gases reais em condições extremas.

$$Pv^2 = RT \left[v + B_0 \left(1 - \frac{b}{v} \right) \right] \left(1 - \frac{C}{vT^3} \right) - A_0 \left(1 - \frac{a}{v} \right) \quad (6)$$

Como podemos ver se trata de uma equação com cinco constantes: A_0 , B_0 , a , b e C . Seu emprego obriga a usar algoritmos mais complexos dos que os requeridos para equações cúbicas.

Tabela 2 – Constantes para a equação de Beattie-Bridgeman

Gás	A_0	a	B_0	b	$C \cdot 10^{-4}$
Hélio	0,0216	0,05984	0,01400	0,0	0,0040
Neônio	0,2125	0,02196	0,02060	0,0	0,101
Argônio	1,2907	0,02328	0,03931	0,0	5,99
Hidrogênio	0,1975	-0,00506	0,02096	-0,04359	0,0504
Nitrogênio	1,3445	0,02617	0,05046	-0,00691	4,20
Oxigênio	1,4911	0,02562	0,04624	0,004208	4,80
Ar	1,3012	0,01931	0,04611	-0,001101	4,34
CO ₂	5,0065	0,07132	0,10476	0,07235	66,00
(C ₂ H ₅) ₂	31,278	0,1246	0,45446	0,11954	33,33
C ₂ H ₄	6,152	0,04964	0,12156	0,03597	22,68
Amoníaco	2,3930	0,17031	0,03415	0,19112	476,87
CO	1,3445	0,02617	0,05046	-0,00691	4,20
N ₂ O	5,0065	0,07132	0,10476	0,07235	66,0
CH ₄	2,2769	0,01855	0,05587	-0,01587	12,83
C ₂ H ₆	5,8800	0,05861	0,09400	0,01915	90,00
C ₃ H ₈	11,9200	0,07321	0,18100	0,04293	120
n-C ₄ H ₁₀	17,794	0,12161	0,24620	0,09423	350

Fonte: Fundamentals of Classical Thermodynamics, John Wiley & Sons.(1965)
Pressão em atmosferas, volume em litros/mol, temperatura em K

2.5.4 EQUAÇÃO DE ESTADO NA FORMA VIRIAL

Em 1901, Kamerlingh Onnes sugeriu a equação de estado virial:

$$Pv = RT + \frac{B(T)}{v} + \frac{C(T)}{v^2} + \frac{D(T)}{v^3}$$

As funções $B(T)$, $C(T)$, $D(T)$,... são chamadas coeficientes viriais e dependem somente da temperatura. Pode-se demonstrar que os coeficientes viriais estão relacionados diretamente com as forças moleculares que existem entre grupos

de moléculas. Por exemplo, $B(T)$ descreve interações entre pares de moléculas, $C(T)$ descreve interações entre grupos de três moléculas e assim sucessivamente. Estas interações são denominadas viriais e podem ser expressas como complicadas integrais das forças intermoleculares. Assim conhecendo-se as forças intermoleculares entre quaisquer combinações de moléculas em função das separações moleculares, será possível efetuar as integrações requeridas e obter expressões para os coeficientes viriais sem recorrer a dados experimentais. Infelizmente, estes cálculos são extremamente complexos e não tem sido completado com êxito, exceto para certos potenciais de força intermoleculares simplificados (Balzhiser, Samuels, Eliassen, 1979).

Por isso, embora a equação virial ofereça a possibilidade de descrever o comportamento $P - V - T$ sem decorrer a dados experimentais, a dificuldade de cálculos nos impede de calcular os coeficientes viriais. Além disso, a forma particular da equação virial torna a sua adaptação a dados experimentais uma tarefa difícil.

Por conseguinte, a equação virial não é utilizada com freqüência em aplicações de engenharia. Mas muitas das equações de estado comumente usadas podem ser reduzidas a uma forma que é idêntica ou quase similar a forma virial.

Desta forma as equações de estado são particularmente convenientes e, portanto, é muito útil reduzir a forma virial uma equação de estado dada neste trabalho.

2.6 ESCOAMENTO COM ATRITO EM DUTOS COM SEÇÃO CONSTANTE

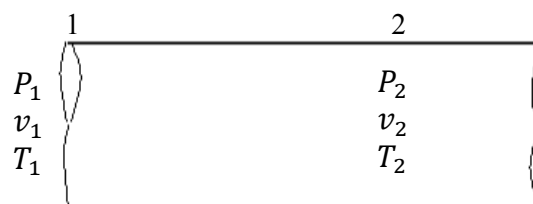


Figura 2 – Seção transversal de um duto

2.6.1 HIPÓTESES

Para a modelagem do escoamento de gás em dutos consideraremos as seguintes hipóteses:

- Escoamento unidimensional;
- Escoamento em regime permanente;
- Não há transferência de calor (dutos enterrados),
- Não há trabalho de eixo externo;
- Duto de seção transversal constante;
- Considerando escoamento com atrito
- A diferença na elevação produz mudanças desprezíveis quando comparadas com o efeito do atrito.

2.6.2 EQUAÇÕES FÍSICAS GOVERNANTES

2.6.2.1 EQUAÇÃO DA ENERGIA

A equação da energia para um escoamento permanente pode ser escrita:

$$d\left(h + \frac{V_e^2}{2}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad dh = -V_e dV_e$$

ou

$$h + \frac{V_e^2}{2} = h_0 \tag{7}$$

onde h e V_e são os valores correspondentes da entalpia e velocidade respectivamente em uma seção arbitraria do duto, e h_0 (entalpia de estagnação) tem um valor constante para todas as seções do duto. Fisicamente, h_0 é a entalpia na seção onde a velocidade é zero.

2.6.2.2 EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE

A equação da continuidade pode ser escrita:

$$\frac{\dot{m}}{A} = \rho V_e = G \quad (8)$$

onde ρ é a massa específica na seção onde V_e e h são medidos, e G (velocidade de massa) tem um valor constante para todas as seções do duto.

Combinando as equações (7) e (8), temos uma equação em termos da entalpia e massa específica:

$$h = \frac{h_0 - G^2}{2 \rho^2}$$

Como h_0 e G são constante para um dado escoamento, a equação acima define uma relação entre a entalpia local e a densidade local.

2.6.2.3 CONSERVAÇÃO DO MOMENTO

A conservação do momento na seção transversal do duto pode ser escrita da seguinte forma:

$$(-A dP) - (\tau_w dA_w) = m dV_e \quad (9)$$

onde A é a área da seção transversal, τ_w a tensão cisalhante exercida nas paredes do duto, e A_w é a área molhada onde atua τ_w .

Definição do coeficiente de atrito: O coeficiente de arrasto ou coeficiente de atrito como é usualmente chamado para escoamento em dutos, é definido como a razão entre a tensão cisalhante que atua na parede e a pressão dinâmica do fluxo. Assim, temos:

$$f = \frac{\tau_w}{\rho V_e^2 / 2} \quad (10)$$

Definição do diâmetro hidráulico: O diâmetro hidráulico é definido como quatro vezes a razão entre a área da seção transversal e o perímetro molhado

$$D = \frac{4A}{dA_w/dx} = 4 \frac{A}{dA_w} \quad (11)$$

2.6.2.4 BALANÇO TOTAL DA ENERGIA MECÂNICA

Inserindo as equações (10) e (11) e a equação da continuidade (8) na equação de conservação do momento (9), temos:

$$-dp - 4f \frac{\rho V_e^2}{2} \frac{dx}{D} = \frac{\dot{m}}{A} dV_e = \rho V_e^2 \frac{dV_e}{V_e} \quad (12)$$

Dividindo a equação (12) por ρ , temos:

$$\frac{dP}{\rho} + 4f \frac{V_e^2}{2} \frac{dx}{D} + V_e dV_e = 0$$

Dado que a velocidade V_e muda com a distância ao longo da tubulação, a avaliação da integral $4f \frac{V_e^2}{2} \frac{dx}{D}$ exige um conhecimento prévio da relação entre V_e e x . Portanto, é conveniente eliminar do termo V_e^2 antes de realizar a integração. Isto é feito dividindo a equação anterior por V_e^2 .

$$\frac{dP}{\rho V_e^2} + 4f \frac{1}{2} \frac{dx}{D} + \frac{dV_e}{V_e} = 0 \quad (13)$$

Pela equação da continuidade (8) $\rho V_e = G = \text{constante}$. Assim $V_e = \frac{G}{\rho}$ e

$$dV_e = d \frac{G}{\rho} = G \left(d \frac{1}{\rho} \right) = \frac{-G}{\rho^2} d\rho$$

Substituindo a relação anterior na equação (13), logo após multiplicando por G^2 e em seguida integrando ao longo da tubulação, obtemos:

$$\int_{P_1}^{P_2} \rho dP - G^2 \ln \frac{\rho_1}{\rho_2} + \frac{2fLG^2}{D} = 0 \quad (14)$$

Esta expressão é válida para todos os gases e todas as condições térmicas de contorno.

2.6.3 FLUXOS ADIABÁTICOS

No caso de fluxos adiabáticos não é possível estabelecer a priori a relação entre a pressão e a densidade, devido a não se conhecer a temperatura em função da pressão ou da densidade. Por conseguinte, devemos determinar a relação entre P e ρ antes de integrar o balanço de energia mecânica (14).

A entalpia pode ser expressa em função de P , v , T e C_p como

$$dh = C_p dT + \left[v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \right] dP$$

de modo que o balanço energético se converte em

$$C_p dT + \left[v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \right] dP = -V_e dV_e$$

O termo da velocidade pode ser eliminado aplicando a equação da continuidade (8):

$$-V_e dV_e = \frac{G^2}{\rho^3} d\rho$$

de modo que

$$C_p dT + \left[v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \right] dP = \frac{G^2}{\rho^3} d\rho \quad (15)$$

3 ANÁLISE DO DESVIO DE COMPORTAMENTO ENTRE O GÁS REAL E O IDEAL

3.1 METODOLOGIA

O volume específico é calculado utilizando a equação de estado de gás ideal (2) e, também pelas equações de gases reais (4), (5) e (6). Definimos as condições de estado que poderiam ser utilizadas com eficácia na diferenciação desses dois tipos de gases. O gás utilizado no estudo comparativo foi o metano.

Como as equações de gases reais são complexas utilizaremos o método de Newton-Raphson e a linguagem de programação FORTRAN para o cálculo do volume específico.

3.1.2 MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON

Admitamos a equação $f(x) = 0$ de que se pretende obter x tal que $f(x) = 0$. Se tivermos uma estimativa razoável, x_i , do valor correto x , para a qual o valor de $f(x)$ é $f(x_i)$. Podemos escrever então uma expansão em série de Taylor de $f(x)$ em torno do ponto x_i . Se x_{i+1} for a raiz de $f(x)$, então:

$$0 = f(x_{i+1}) = f(x_i) + (x_{i+1} - x_i) \frac{\partial f(x_i)}{\partial x} + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2!} \frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2} + \dots$$

Se x_i for suficientemente próximo da solução, então $(x_{i+1} - x_i)^2$ é muito pequeno. Desprezando os termos em $(x_{i+1} - x_i)$ que estão elevados à segunda potência (e maior) a série de Taylor reduz-se a

$$0 = f(x_{i+1}) = f(x_i) + (x_{i+1} - x_i) \frac{\partial f(x_i)}{\partial x}$$

Resolvendo em ordem a x_{i+1} , obtemos

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{\partial f(x_i) / \partial x}$$

Assim, tendo uma aproximação x_i da solução, podemos obter desta maneira uma melhor aproximação x_{i+1} .

3.2 CÁLCULO DO VOLUME ESPECÍFICO

Aplicando o método de Newton-Raphson para os modelos de gases reais, temos:

$$v_{i+1} = v_i - \frac{f(v_i)}{\partial f(v_i) / \partial v}$$

sendo v_i o valor do volume específico inicial estimado através da equação de gás ideal.

Assim, temos:

para equação de Van der Waals (4),

$$\left(P + \frac{a}{v^2}\right) (v - b) = R T$$

a função $f(v)$ e sua derivada são da seguinte forma:

$$f(v) = 0 = -P + \frac{RT}{(v - b)} - \frac{a}{v^2}$$

$$\frac{\partial f(v)}{\partial v} = \left[-\frac{RT}{(v-b)^2} + \frac{2a}{v^3} \right]$$

para equação de Redlich-Kwong (5),

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{T^{0,5} v (v+b)}$$

a função $f(v)$ e sua derivada são da seguinte forma:

$$f(v) = 0 = -P + \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{T^{0,5} v (v+b)}$$

$$\frac{\partial f(v)}{\partial v} = - \left[\frac{RT}{(v-b)^2} + \frac{a \cdot T^{1/2} \cdot (2v+b)}{(T^{1/2} \cdot (v^2 + vb))^2} \right]$$

e finalmente para equação de Beattie-Bridgeman (6),

$$Pv^2 = RT \left[v + B_0 \left(1 - \frac{b}{v} \right) \right] \left(1 - \frac{C}{vT^3} \right) - A_0 \left(1 - \frac{a}{v} \right)$$

reescrevendo na forma virial:

$$P = \frac{RT}{v} + \frac{\beta}{v^2} + \frac{\gamma}{v^3} + \frac{\delta}{v^4}$$

onde:

$$\beta = RB_0T - \frac{RC}{T^2} - A_0$$

$$\gamma = A_0 a - RbB_0T - \frac{RB_0C}{T^2}$$

$$\delta = \frac{RbB_0C}{T^2}$$

a função $f(v)$ e sua derivada são da seguinte forma:

$$f(v) = 0 = -P + \frac{RT}{v} + \frac{\beta}{v^2} + \frac{\gamma}{v^3} + \frac{\delta}{v^4}$$

$$\frac{\partial f(v)}{\partial v} = -\frac{RT}{v^2} - \frac{2\beta}{v^3} - \frac{3\gamma}{v^4} - \frac{4\delta}{v^5}$$

Os valores dos volumes específicos calculados para gases ideais e reais seguem nas tabelas abaixo.

Tabela 3 – Volume Específico (m³/kg), para a equação de estado de Gás Ideal

Pressão MPa	Temperatura, K						
	225	250	275	300	350	400	450
0,05	2,3372	2,5969	2,8566	3,1162	3,6356	4,155	4,6744
0,10	1,1686	1,2984	1,4283	1,5581	1,8178	2,0775	2,3372
0,50	0,2337	0,2597	0,2856	0,3116	0,3635	0,4155	0,4674
1,00	0,1168	0,1298	0,1428	0,1558	0,1818	0,2077	0,2337
1,50	0,0779	0,0865	0,0952	0,1038	0,1212	0,1385	0,1558
2,00	0,0584	0,0649	0,0714	0,0779	0,0909	0,1038	0,1168
3,00	0,0389	0,0432	0,0476	0,0519	0,0605	0,0692	0,0779
4,00	0,0292	0,032	0,035	0,0389	0,045	0,0519	0,0584
5,00	0,0233	0,0259	0,0285	0,0311	0,0363	0,0415	0,0467
6,00	0,0194	0,0216	0,0238	0,0259	0,0302	0,0346	0,0389
8,00	0,0146	0,0162	0,0178	0,0194	0,0227	0,0259	0,0292
10,00	0,0116	0,013	0,0142	0,01558	0,01817	0,02077	0,02337

Tabela 4 – Volume Específico (m³/kg), Van der Waals

Pressão MPa	Temperatura, K						
	225	250	275	300	350	400	450
0,05	2,3322	2,5927	2,853	3,11321	3,6334	4,1534	4,6732
0,10	1,1636	1,2942	1,4247	1,555	1,8156	2,0759	2,336
0,50	0,2287	0,2554	0,282	0,3086	0,3613	0,4139	0,4663
1,00	0,1117	0,1256	0,1392	0,1527	0,1796	0,2061	0,2326
1,50	0,0727	0,0822	0,0916	0,1008	0,1189	0,1369	0,1547
2,00	0,0531	0,06056	0,0677	0,0748	0,0887	0,1023	0,1157
3,00	0,0334	0,0388	0,0439	0,0488	0,0584	0,0677	0,0768
4,00	0,0234	0,0279	0,032	0,0358	0,0432	0,0504	0,0574
5,00	0,0174	0,0213	0,0248	0,0281	0,0342	0,04	0,0458
6,00	0,0131	0,0169	0,02	0,0229	0,0282	0,0331	0,038
8,00	0,008	0,0114	0,01414	0,01649	0,02071	0,0246	0,0283
10,00	0,0062	0,0084	0,0107	0,01273	0,01628	0,01951	0,02256

Tabela 5 – Volume Específico (m³/kg), Reclich-Kwong

Pressão Mpa	Temperatura K						
	225	250	275	300	350	400	450
0,05	2,3318	2,5926	2,8531	3,1134	3,6338	4,1538	4,6737
0,10	1,1632	1,2941	1,4248	1,5553	1,8159	2,0763	2,3365
0,50	0,2283	0,2554	0,2822	0,3088	0,3617	0,4143	0,4667
1,00	0,1114	0,1255	0,1394	0,1530	0,1799	0,2066	0,2330
1,50	0,0724	0,0823	0,0918	0,1011	0,1194	0,1374	0,1552
2,00	0,0529	0,0606	0,0680	0,0752	0,0891	0,1028	0,1162
3,00	0,0334	0,0398	0,0442	0,0493	0,0589	0,0682	0,0773
4,00	0,0235	0,0282	0,0236	0,0363	0,0438	0,0509	0,0579
5,00	0,0175	0,0217	0,0253	0,0286	0,0348	0,0406	0,0462
6,00	0,0135	0,0174	0,0206	0,0234	0,0287	0,0337	0,0385
8,00	0,0087	0,0121	0,0147	0,0171	0,0213	0,0251	0,0288
10,00	0,0064	0,0091	0,0114	0,0133	0,0169	0,0200	0,0231

Tabela 6 – Volume Específico (m³/kg), Beattie-Bridgeman

Pressão Mpa	Temperatura, K						
	225	250	275	300	350	400	450
0,05	2,3262	2,5862	2,8460	3,1056	3,6246	4,1433	4,6618
0,10	1,1607	1,2911	1,4214	1,5515	1,8114	2,0711	2,3307
0,50	0,2281	0,2550	0,2817	0,3082	0,3609	0,4134	0,4657
1,00	0,1115	0,1255	0,1392	0,1528	0,1796	0,2062	0,2326
1,50	0,0726	0,0823	0,0918	0,1010	0,1192	0,1372	0,1550
2,00	0,0531	0,0607	0,0680	0,0752	0,0891	0,1027	0,1161
3,00	0,0335	0,0391	0,0443	0,0493	0,0589	0,0682	0,0774
4,00	0,0236	0,0282	0,0324	0,0364	0,0438	0,0510	0,0580
5,00	0,0175	0,0217	0,0253	0,0286	0,0348	0,0407	0,0463
6,00	0,0133	0,0173	0,0206	0,0235	0,0288	0,0338	0,0386
8,00	0,0751	0,0119	0,0147	0,0179	0,0213	0,0252	0,0290
10,00	0,0042	0,0087	0,0112	0,0136	0,0169	0,0201	0,0232

E com estes resultados foram geradas isotermas para cada equação de estado.

Observou-se claramente, a partir dos gráficos, que para altos valores de pressão, ocorreu um desvio de desempenho das isotermas do gás real em relação ao ideal. Porém, à medida que a pressão do gás se reduz, acentua-se uma convergência nesse comportamento.

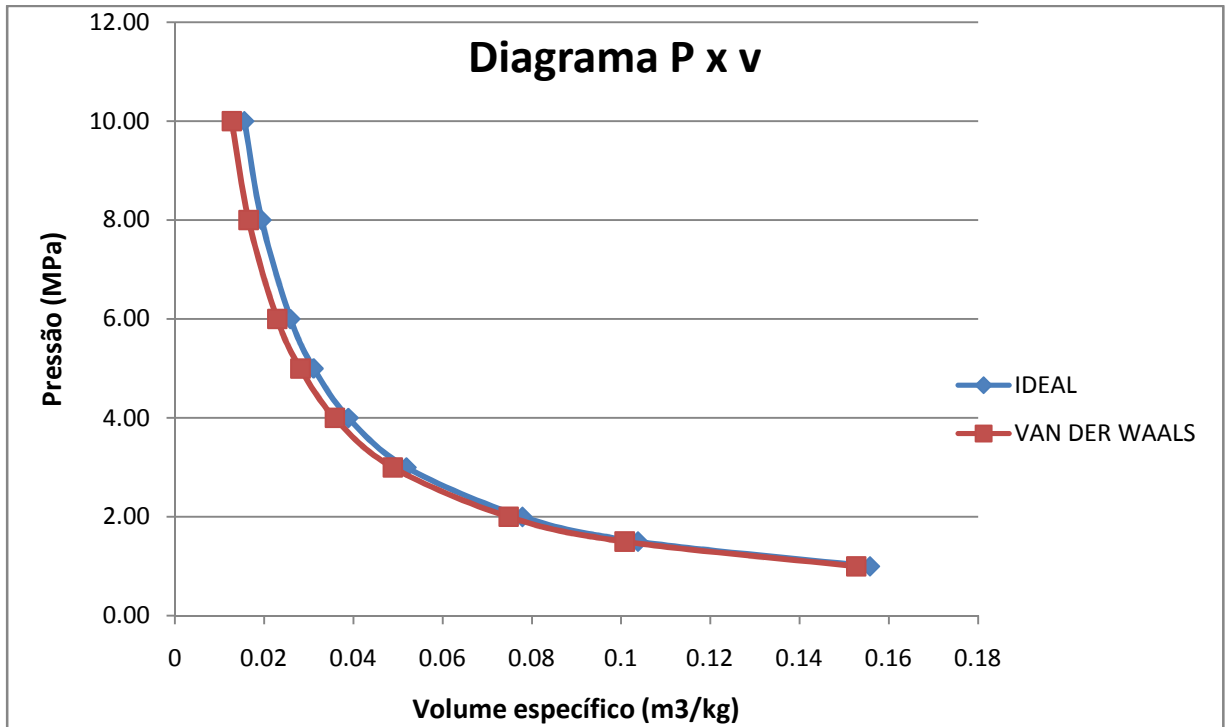


Figura 3: Diagrama P x v para o desvio da equação de Van der Waals em relação a equação de estado de gás ideal.

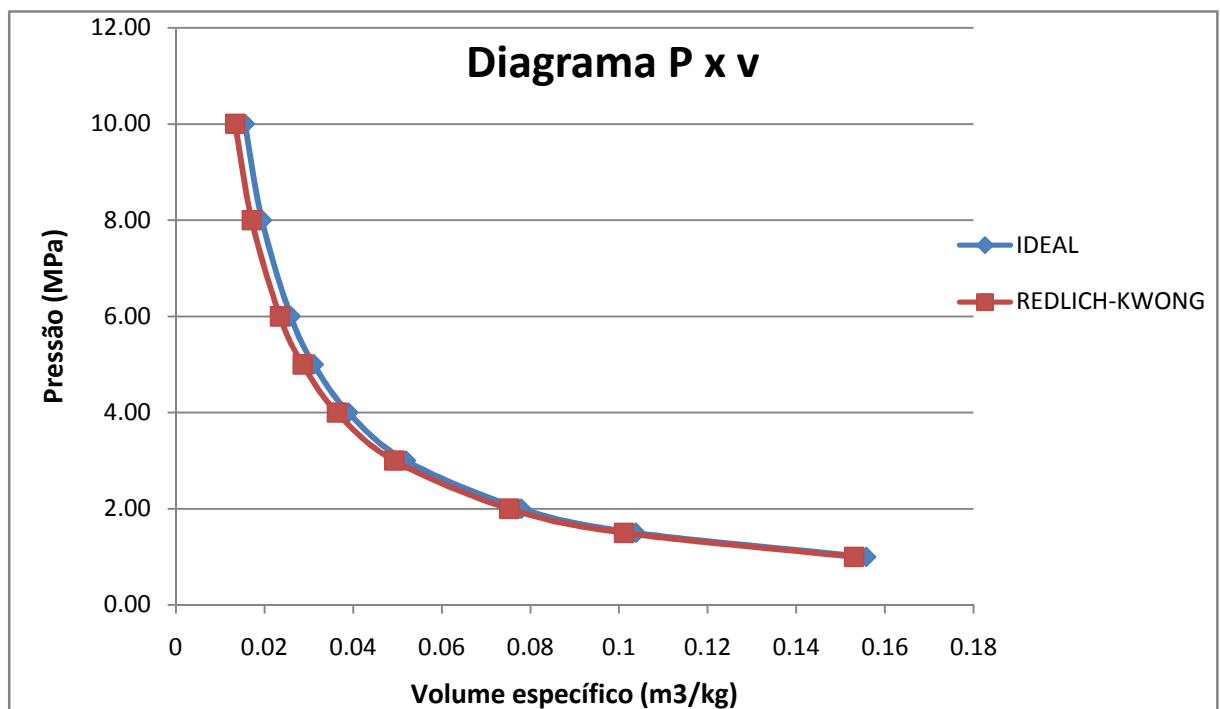


Figura 4: Diagrama P x v para o desvio da equação de Redlich-Kwong em relação a equação de estado de gás ideal.

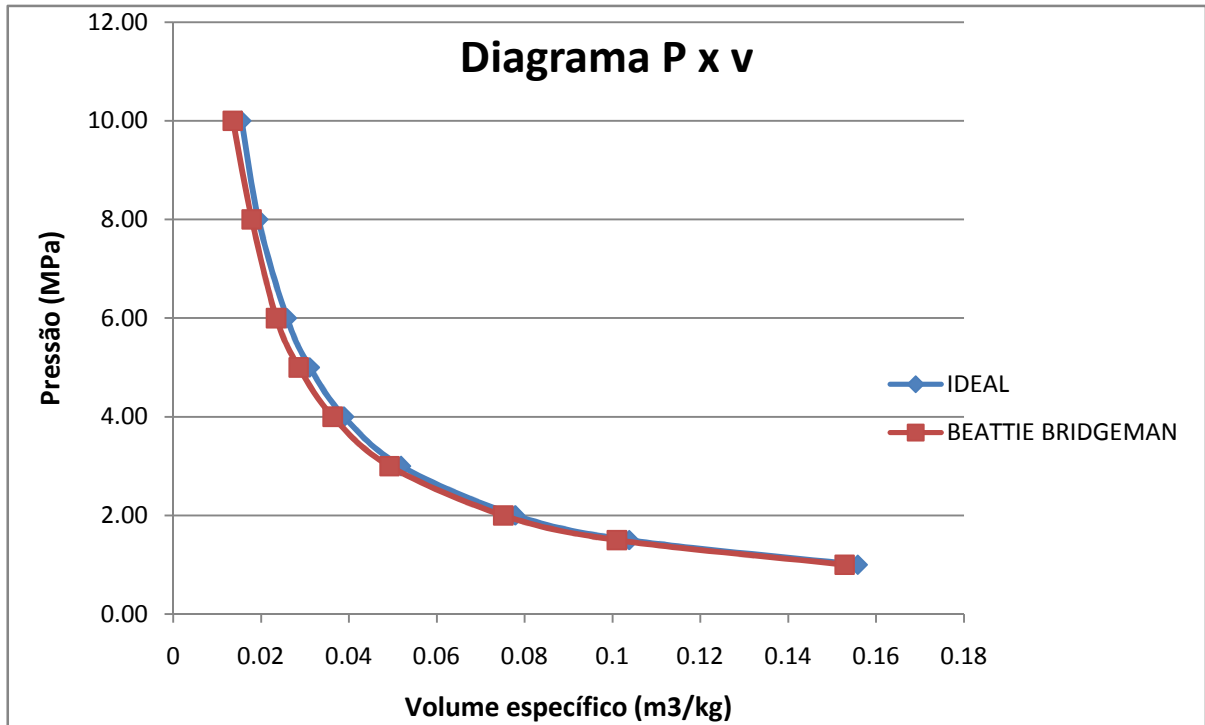


Figura 5: Diagrama P x v para o desvio da equação de Beattie Bridgeman em relação a equação de estado de gás ideal.

Observa-se uma diminuição mais acentuada da pressão do gás real, comparada à do gás ideal. Isso deve-se ao aumento das interações entre as partículas formadoras do gás quando submetidas a altas pressões. Portanto, quando submetido às mesmas condições de temperatura e quantidade de matéria, o gás real exercerá menor pressão que o gás ideal.

Os desvios de características do gás real, para o parâmetro mensurado, foram pouco perceptíveis, nos intervalos de altas pressões, e obtiveram-se magnitudes praticamente idênticas para baixas pressões e à temperatura de 300 K.

A fuga da idealidade de um gás pode ser também observada por meio do fator de compressibilidade Z e, à medida que o valor desse parâmetro se afasta de 1, valor característico do gás ideal, o comportamento do gás real distancia seu comportamento cada vez mais do ideal. Para a condição de alta pressão, o fator de compressibilidade tende a se afastar da unidade, fato esse que provoca o seu afastamento da idealidade. Entretanto, o aumento da temperatura aproxima o valor do fator de compressibilidade do gás real de 1, podendo, ainda, sua magnitude

assumir outros valores que esse, a altas pressões. Este fato pode ser visivelmente observado por meio dos Gráficos abaixo.

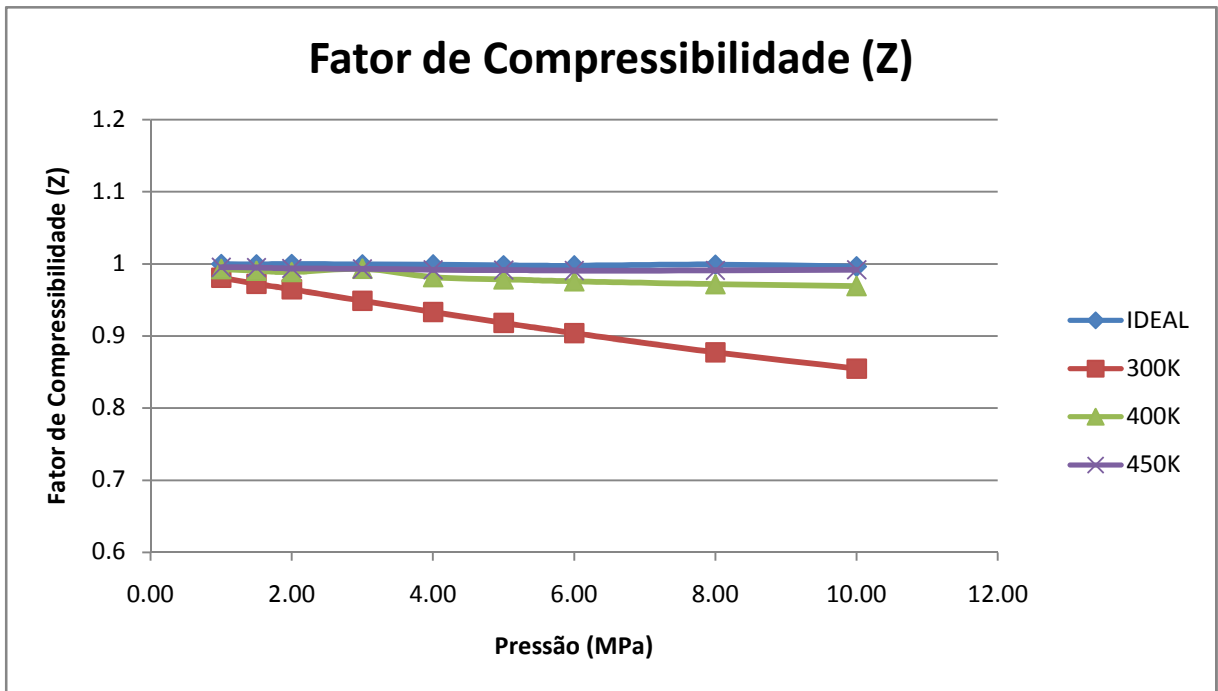


Figura 6: Variações para o fator de Compressibilidade (Z) do gás ideal e do gás real utilizando a equação de Van der Waals.

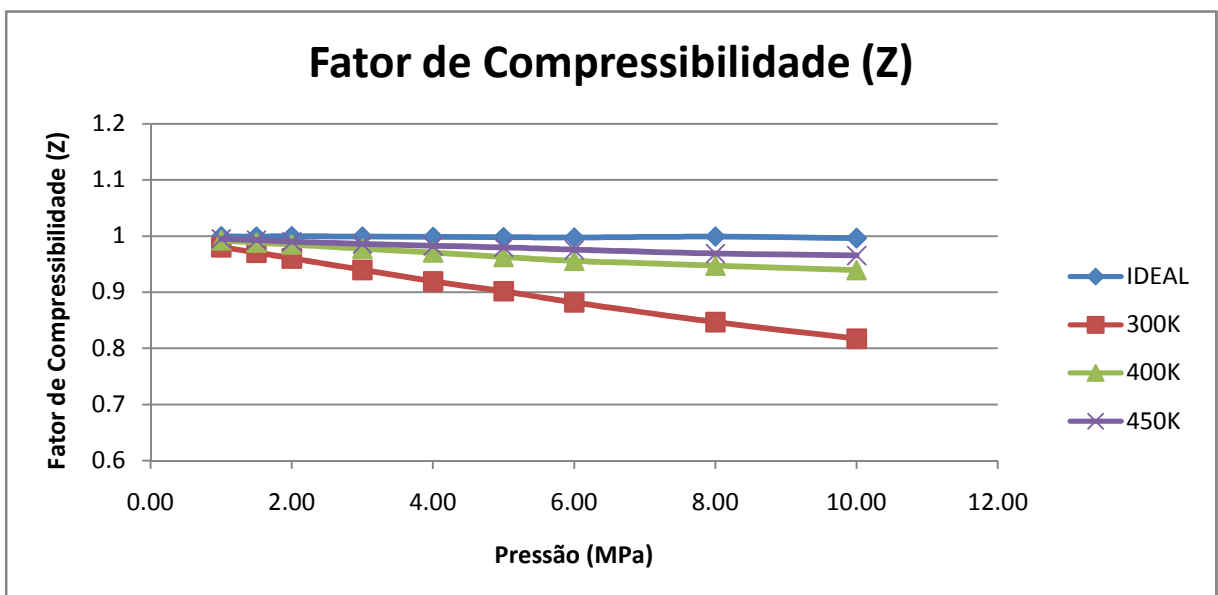


Figura 7: Variações para o fator de Compressibilidade (Z) do gás ideal e do gás real utilizando a equação de Redlich-Kwong

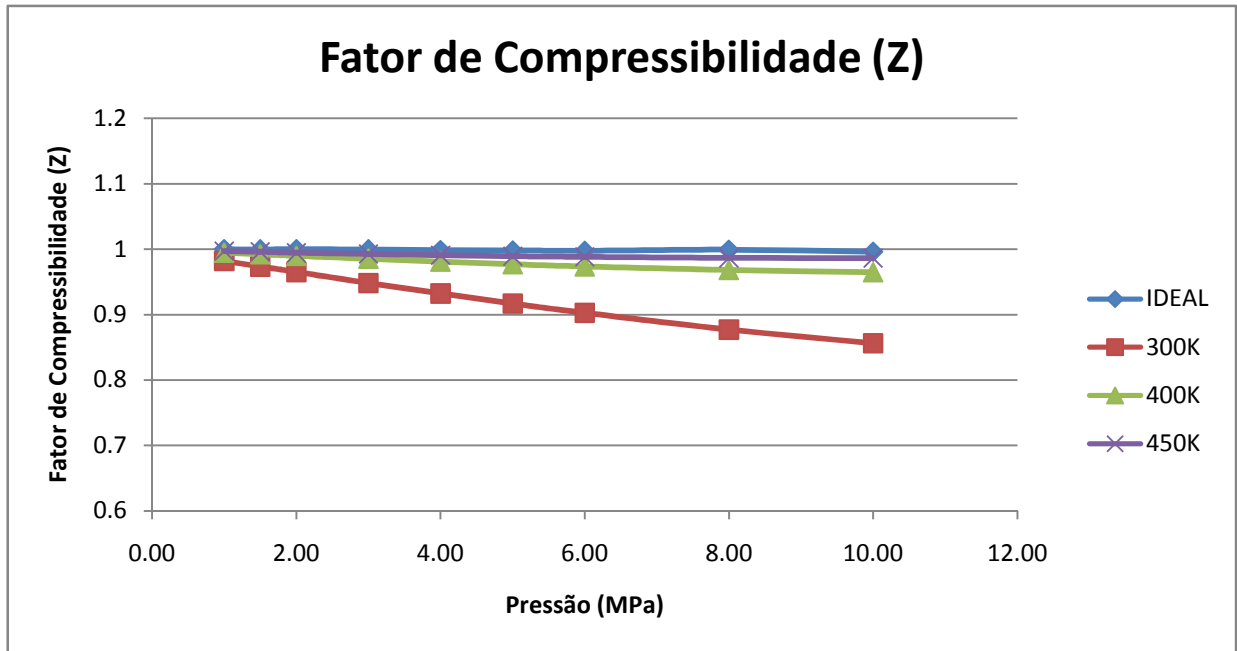


Figura 8: Variações para o fator de Compressibilidade (Z) do gás ideal e do gás real utilizando a equação de Beattie Bridgeman.

3.3 ANÁLISE DAS EQUAÇÕES DE ESTADO

Para avaliar os modelos de equação de estado, comparamos os valores de volume específico obtidos anteriormente com os dados da tabela experimental do metano superaquecido.

Tabela 7 – Metano Superaquecido - Volume Específico (m³/kg)

Pressão MPa	Temperatura, K						
	225	250	275	300	350	400	450
0,05	2,3270	2,5872	2,8472	3,1069	3,6262	4,1451	-
0,10	1,1609	1,2915	1,4219	1,5521	1,8123	2,0721	-
0,50	0,2280	0,2550	0,2817	0,3083	0,3611	0,4137	-
1,00	0,1113	0,1254	0,1392	0,1528	0,1798	0,2064	-
1,50	0,0724	0,0822	0,0917	0,1010	0,1193	0,1373	-
2,00	0,0529	0,0606	0,0680	0,0751	0,0891	0,1027	-
3,00	0,0333	0,0390	0,0442	0,0492	0,0589	0,0682	0,0774
4,00	0,0235	0,0281	0,0324	0,0363	0,0438	0,0510	0,0580
5,00	0,0175	0,0216	0,0252	0,0286	0,0348	0,0406	0,0463
6,00	0,0135	0,0173	0,0205	0,0234	0,0288	0,0338	0,0386
8,00	0,0085	0,0120	0,0147	0,0171	0,0213	0,0252	0,0289
10,00	0,0059	0,0089	0,0113	0,0133	0,0169	0,0201	0,0231

Fonte: Van Wylen – Fundamentos da Termodinâmica, 2003 (adaptado)

Foram elaborados gráficos com os desvios dos volumes específicos calculados para equação de estado de gás ideal e para cada modelo de gás real, em relação aos dados experimentais.

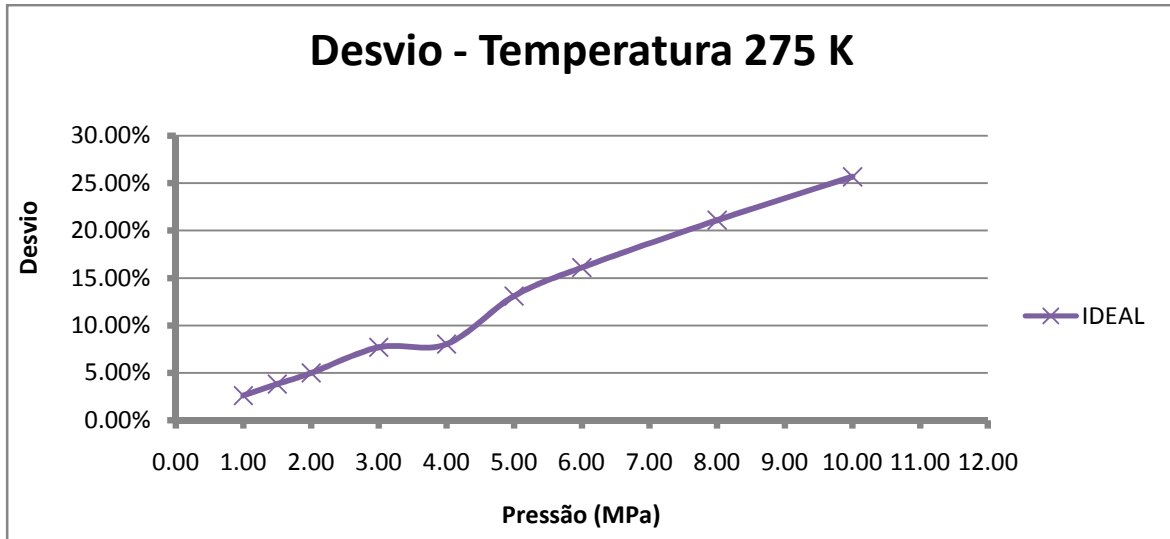


Figura 9: Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 275 K

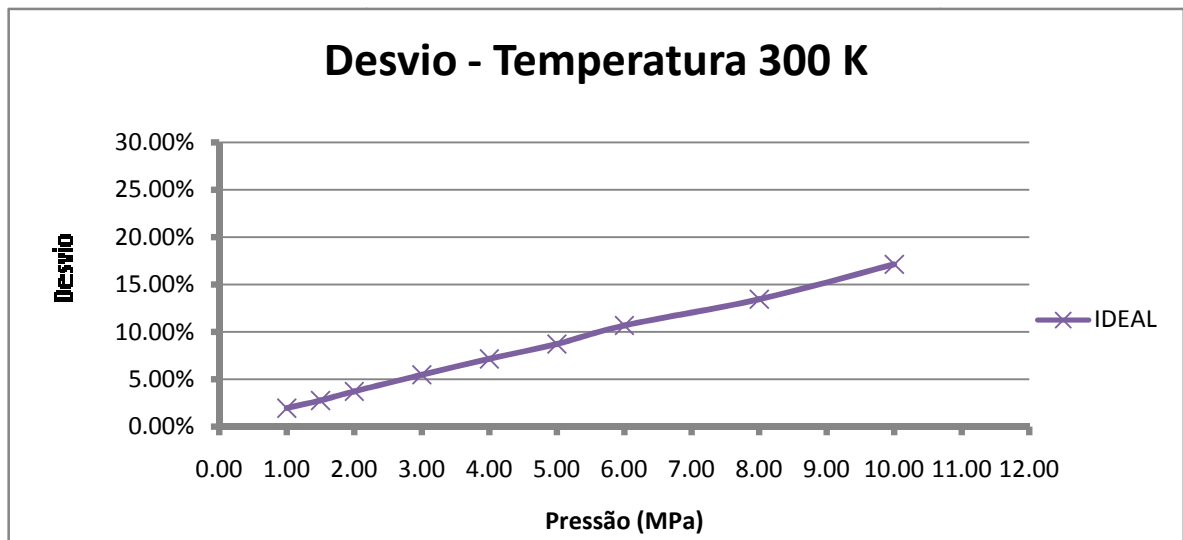


Figura 10: Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 300 K.

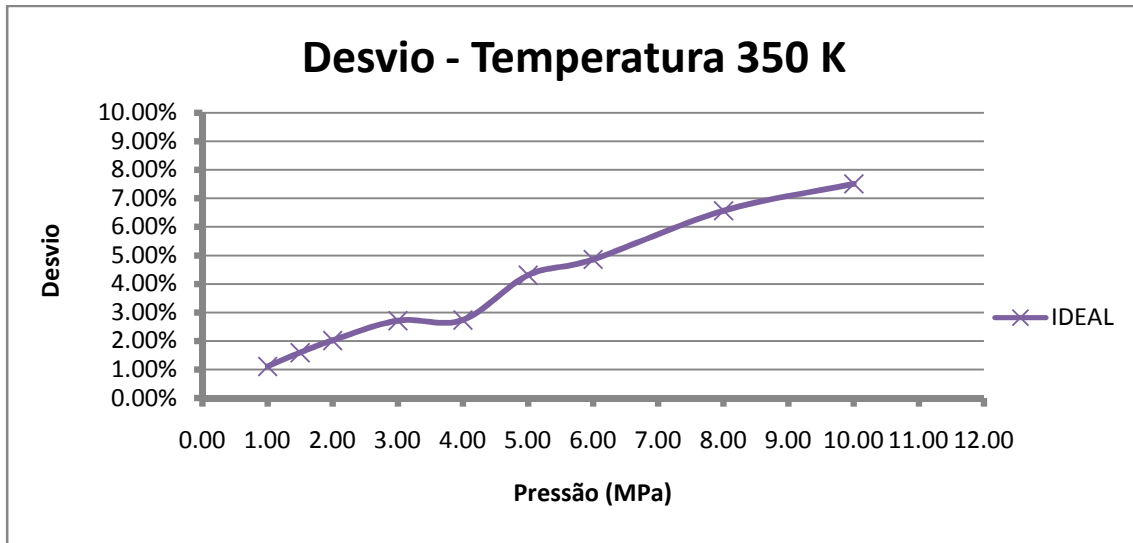


Figura 11: Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 350 K.

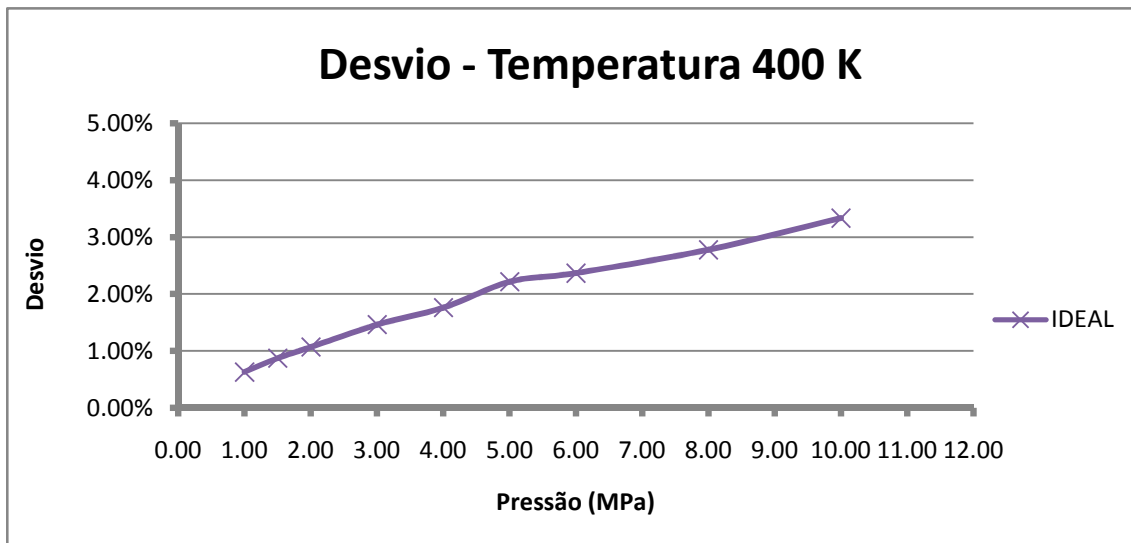


Figura 12: Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 400K.

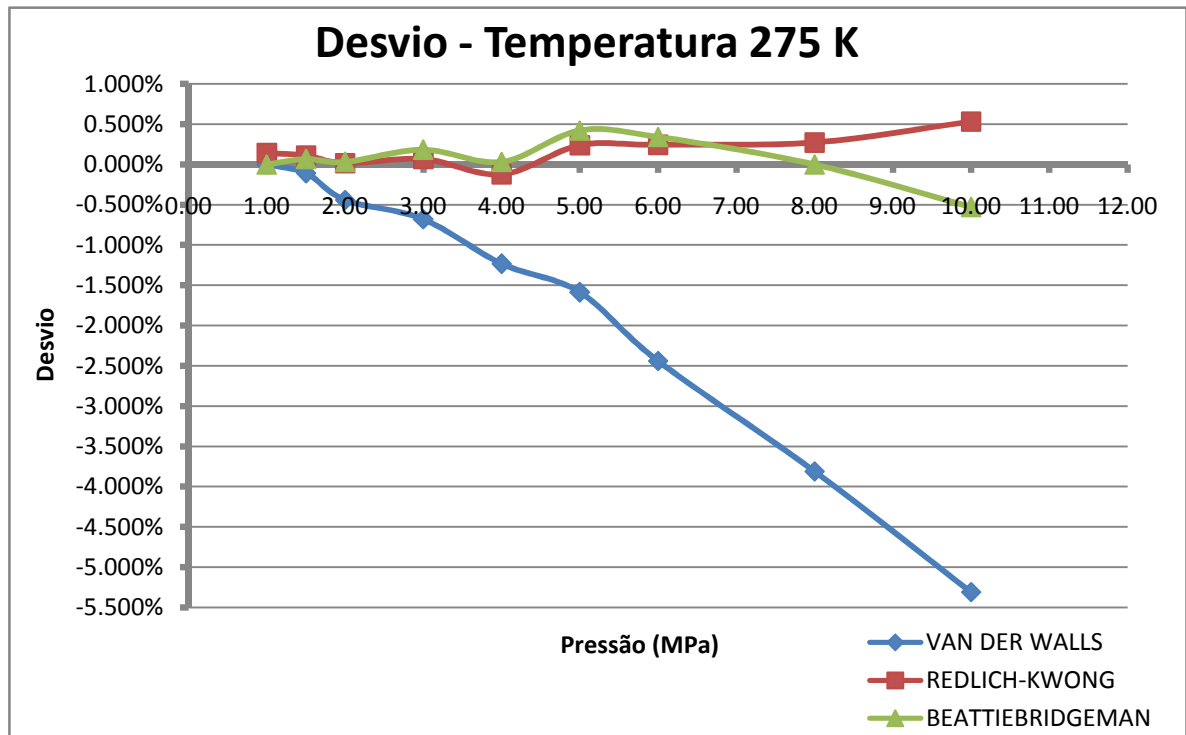


Figura 13: Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 275 K

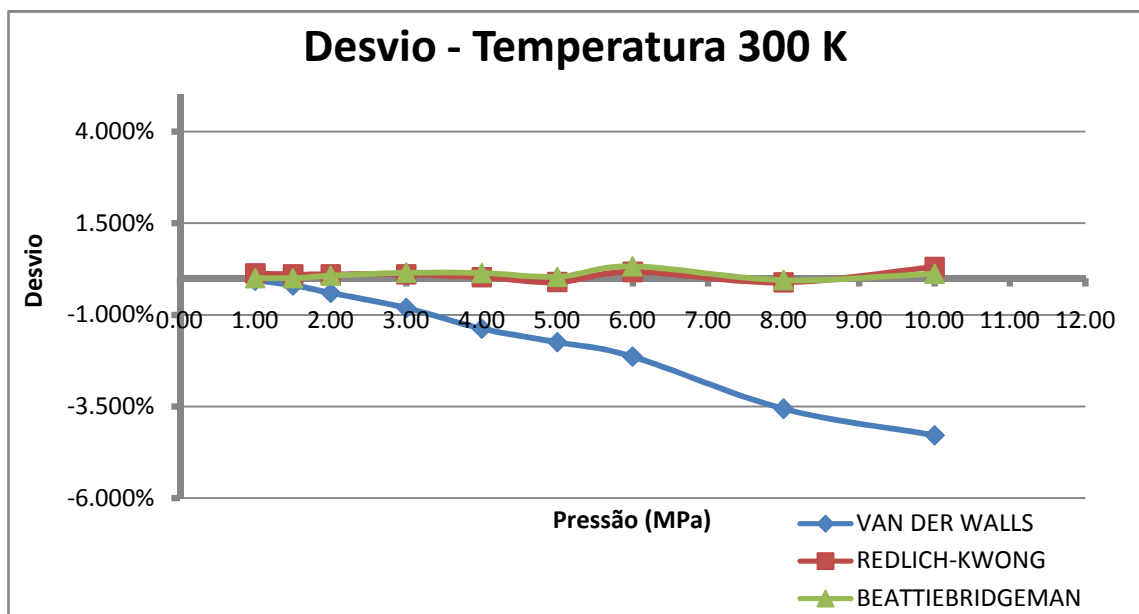


Figura 14: Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 300 K

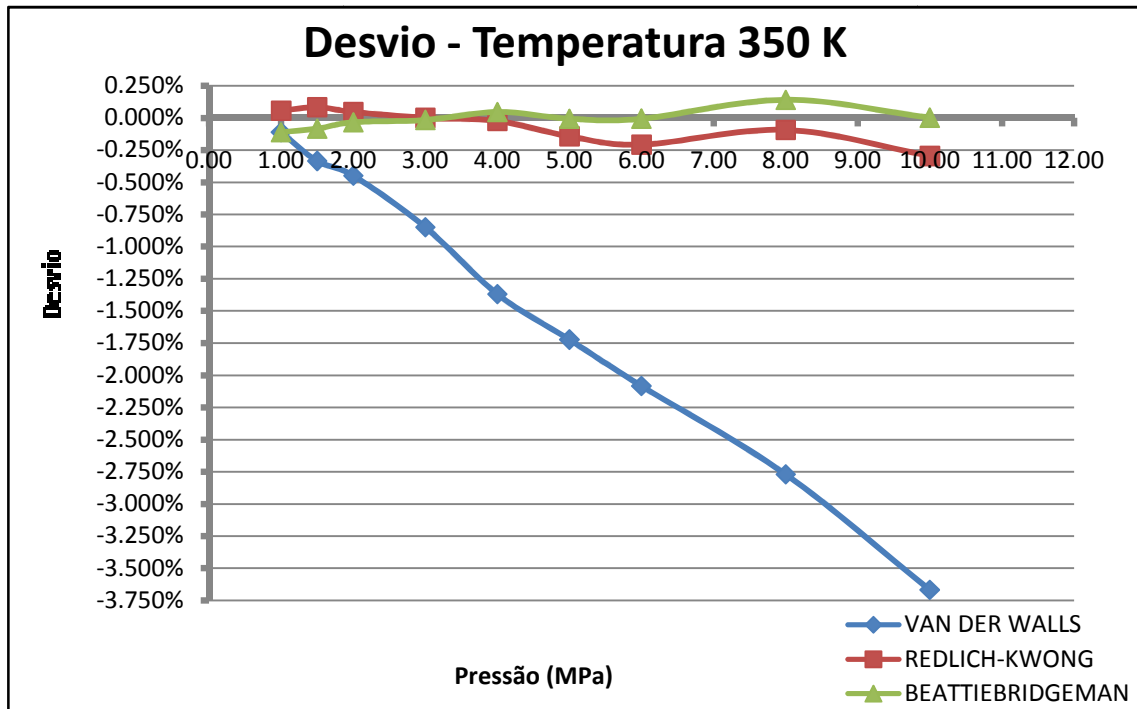


Figura 15: Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 350 K

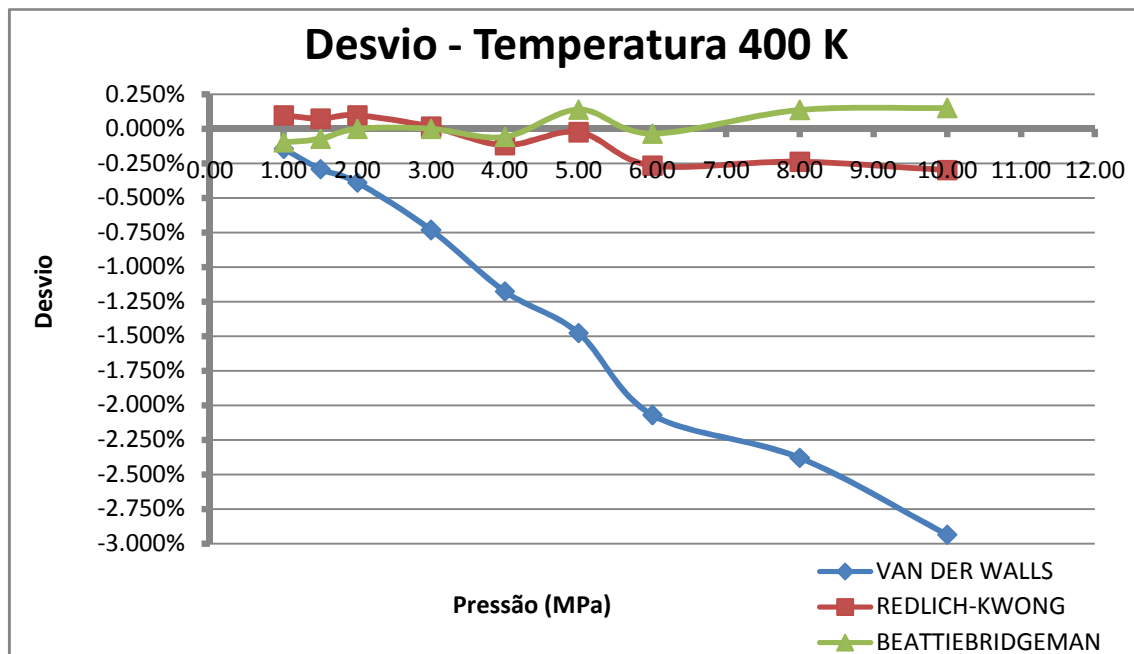


Figura 16: Desvio do Volume Específico em relação aos dados Experimentais, temperatura de 400 K

Observando os gráficos podemos constatar que a altas pressões e baixas temperaturas os desvios do gás ideal são consideráveis em relação aos dados da tabela experimental. Com o aumento da temperatura este desvio se torna menor. É possível verificar também que para todas as equações de estado para gases reais, Van der Waals, Redlich-Kwong e Beattie-Bridgeman, os desvios obtidos são pequenos.

Comparando os modelos de gases reais, o de Van der Waals foi o que apresentou o maior desvio em relação aos dados experimentais, e os modelos de Redlich-Kwong e Beattie-Bridgeman descrevem com maior precisão o comportamento do gás metano quando submetido a altas pressões.

4 MODELAGEM MATEMÁTICA PARA ESCOAMENTO EM DUTOS

A modelagem matemática tem como objetivo obter expressões que relacionem a pressão, a temperatura, densidade ou volume específico com a distancia (comprimento do duto) durante o fluxo adiabático de um gás ao longo de uma tubulação de seção transversal uniforme, dado que as condições de entrada são conhecidas.

Foram consideradas as seguintes hipóteses para a modelagem:

- escoamento unidimensional;
- escoamento compressível
- escoamento em regime permanente;
- Não há transferência de calor (dutos enterrados),
- Não há trabalho de eixo externo;
- Duto de seção transversal constante;
- Considerando escoamento com atrito constante
- A diferença na elevação produz mudanças desprezíveis quando comparadas com o efeito do atrito.
- Gás utilizado: metano.

4.1 MODELAGEM DO ESCOAMENTO UTILIZANDO A EQUAÇÃO DE ESTADO DE GÁS IDEAL

No balanço total da energia mecânica, equação (14), devemos obter a relação entre a massa específica ρ (ou v) e a pressão P antes da integração. De acordo com a figura 2, o ponto 1 refere-se a entrada da tubulação e o ponto 2 é qualquer ponto genérico no interior da tubulação.

$$\int_{P_1}^P \rho \, dP - G^2 \ln \frac{\rho_1}{\rho} + \frac{2fLG^2}{D} = 0$$

A relação entre ρ e P de que precisamos para avaliar a integral $\int_{P_1}^P \rho \, dP$ se obtêm substituindo a equação de estado para gás ideal no balanço energético modificado, equação (15).

$$C_p \, dT + \left[v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \right] dP = \frac{G^2}{\rho^3} d\rho$$

Assim o balanço de energia se reduz a

$$C_p dT = \frac{G^2}{\rho^3} d\rho$$

ao se integrar entre a entrada e qualquer ponto genérico, obtemos:

$$C_p (T - T_1) = -\frac{G^2}{2} \left(\frac{1}{\rho^2} - \frac{1}{\rho_1^2} \right)$$

a temperatura pode ser eliminada substituindo a equação de estado, $T = \frac{P}{R\rho}$ de modo que:

$$C_p \left(\frac{P}{R\rho} - \frac{P_1}{R\rho_1} \right) = -\frac{G^2}{2} \left(\frac{1}{\rho^2} - \frac{1}{\rho_1^2} \right)$$

Isolando P_2 desta equação:

$$P = \frac{P_1 \rho}{\rho_1} - \frac{G^2 R}{2C_p} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{\rho}{\rho_1^2} \right)$$

Por conveniência, definimos $\lambda = \frac{G^2 R}{2C_p}$, de modo que a relação entre P e ρ se converte em:

$$P = \frac{P_1 \rho}{\rho_1} - \lambda \left(\frac{1}{\rho} - \frac{\rho}{\rho_1^2} \right)$$

Dado que a pressão é conhecida diretamente em função da massa específica, eliminamos dP da integral $\int_{P_1}^P \rho dp$ no balanço de energia mecânica. Diferenciando a expressão anterior:

$$dP = \left[\frac{P_1}{\rho_1} + \lambda \left(\frac{1}{\rho^2} + \frac{1}{\rho_1^2} \right) \right] d\rho$$

Portanto, a integral $\int_{P_1}^P \rho dp$ se converte em:

$$\int_{P_1}^P \rho dP = \int_{\rho_1}^{\rho} \rho \left[\frac{P_1}{\rho_1} + \lambda \left(\frac{1}{\rho^2} + \frac{1}{\rho_1^2} \right) \right] d\rho$$

Integrando, substituindo os limites e simplificando, obtemos:

$$\int_{P_1}^P \rho dP = \left[\frac{\rho^2 - \rho_1^2}{2\rho_1^2} \right] [P_1 \rho_1 + \lambda] + \lambda \ln \left(\frac{\rho}{\rho_1} \right)$$

A substituição desta expressão no balanço de energia mecânica, equação (14), resulta em:

$$0,5 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_1} \right)^2 - 1 \right] (P_1 \rho_1 + \lambda) + (\lambda - G^2) \ln \frac{\rho}{\rho_1} + \frac{2fLG^2}{D} = 0$$

Substituindo o valor de λ nesta equação, obtemos a relação entre massa específica, velocidade mássica e distância:

$$0,5 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_1} \right)^2 - 1 \right] \left(P_1 \rho_1 + \frac{G^2 R}{2C_p} \right) + \left(\frac{G^2 R}{2C_p} - G^2 \right) \ln \frac{\rho}{\rho_1} + \frac{2fLG^2}{D} = 0$$

Esta equação expressa a massa específica em função da posição, para uma velocidade mássica dada.

Tendo determinado a massa específica em qualquer ponto, a pressão, a temperatura e a velocidade se calculam a partir de:

$$P = \frac{P_1 \rho}{\rho_1} - \frac{G^2 R}{2C_p} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{\rho}{\rho_1^2} \right) \quad (16)$$

$$T = T_1 - \frac{G^2}{2C_p} \left(\frac{1}{\rho^2} - \frac{1}{\rho_1^2} \right) \quad (17)$$

$$V_e = \frac{G}{\rho} \quad (18)$$

4.2 MODELAGEM DO ESCOAMENTO UTILIZANDO A EQUAÇÃO DE ESTADO DE BEATTIE-BRIDGEMAN

Para a modelagem de gás real devemos recorrer à integração numérica do balanço de energia mecânica, visto que a relação entre ρ e P de que precisamos para avaliar a integral é extremamente complicada.

O modelo utilizado para a modelagem foi o de Beattie-Bridgeman já que este descreve muito bem o comportamento do gás metano a altas pressões, como ficou constatado na análise do desvio em relação aos dados experimentais.

Iniciamos examinando o balanço de energia mecânica que foi deduzido na equação (14):

$$\int_{P_2}^P \rho \, dP - G^2 \ln \frac{\rho_1}{\rho} + \frac{2fLG^2}{D} = 0$$

Aplica-se esta equação a um pequeno trecho da tubulação, ΔL . Aplica-se também o teorema do valor médio para retirar ρ da integral:

$$\frac{2fG^2}{D} \Delta L + \rho_m \Delta P - G^2 \ln \frac{\rho}{\rho_1} = 0$$

Se os incrementos de comprimento são curtos, podemos supor muito razoavelmente que ρ é relativamente constante sobre o elemento de comprimento. Portanto, substituímos ρ_m por ρ_1 (para melhor exatidão poderíamos usar $\frac{\rho_1 + \rho_2}{2}$, mas ρ_1 é uma realidade bastante adequada para os nossos propósitos).

Se substituirmos ρ por $\frac{1}{v}$, o balanço de energia mecânica se converte em:

$$\frac{2fG^2}{D} \Delta L + \frac{P - P_1}{v_m} - G^2 \ln \frac{v_1}{v} = 0$$

A equação acima contém duas incógnitas. Para obter as expressões adicionais que necessitamos para formar um sistema completo de equações devemos agregar as equações de energia, de continuidade e de estado.

Reescrevendo a equação de energia para o fluxo através de um elemento da tubulação:

$$(h - h_1) + \frac{V_e^2 - V_{e1}^2}{2} = 0$$

As velocidades podem ser eliminadas por meio da equação da continuidade (8), de modo que:

$$(h - h_1) + \frac{G^2}{2}(v^2 - v_1^2) = 0$$

Dado que a equação de estado é explícita para a pressão, é mais conveniente trabalhar com energias internas em vez de entalpias. Então:

$$h - h_1 = u - u_1 + (Pv) - (Pv)_1$$

mas,

$$du = C_v dT + \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T dv$$

$$u - u_1 = C_v(T - T_1) + \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T (v - v_1)$$

mas,

$$\left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T = \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v - P\right]$$

Utilizando a equação de estado de Beattie-Bridgeman (xx),

$$\left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T = \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v - P\right] = \frac{3RC}{T^2 v^2} \left[1 + \frac{A_0 T^2}{3RC} \left(1 - \frac{a}{v}\right) + \frac{B_0}{v} \left(1 - \frac{b}{v}\right)\right]$$

O calor específico a volume finito é definido por (Jonh Wiley & Sons, 2002):

$$C_{V,real} = C_{V,ideal} + \int_{\infty}^v T \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_v dv$$

Da equação de estado,

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_v = \frac{6RC}{v^3 T^3} \left(\frac{B_0 b}{v^2} - \frac{B_0}{v} - 1 \right)$$

Substituindo e integrando, se obtém $C_{V,real}$:

$$C_{V,real} = C_{V,ideal} + \frac{6RC}{T^3} \left(\frac{1}{v} + \frac{B_0}{2v^2} - \frac{B_0 b}{3v^3} \right)$$

Por conseguinte, a diferença de entalpia se converte em:

$$(h - h_1) = C_{v,real}(v_1 - T_1)(T - T_1) + \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T (v - v_1) + Pv - P_1 v_1$$

Substituindo a diferença de entalpia e a equação de estado (para P e v) no balanço de energia e P no balanço de energia mecânica, obtemos duas equações com duas incógnitas que podem ser empregadas para calcular T e v no ponto final de cada incremento de comprimento da tubulação.

Substituindo a P pela equação de estado de Beattie-Bridgeman (xx), temos :

Balanço de energia:

$$c_{v,real}(v_1, T_1) (T - T_1) + \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T (v - v_1) + \left[RT + \frac{\beta}{v} + \frac{\gamma}{v^2} + \frac{\delta}{v^3} - P_1 v_1 \right] + \frac{G^2}{2} (v^2 - v_1^2) \quad (19)$$

Balço de energia mecânica:

$$\frac{2fG^2}{D}\Delta L + \frac{1}{v_1}\left[\frac{RT}{v} + \frac{\beta}{v^2} + \frac{\gamma}{v^3} + \frac{\delta}{v^4} - P_1\right] + G^2 \ln \frac{v}{v_1} = 0 \quad (20)$$

Dado que estas equações não são lineares, usaremos a técnica de Newton-Raphson para resolvê-las. Escrevemos as equações (19) e (20), respectivamente como:

$$E(T, v) = 0$$

$$F(T, v) = 0$$

Se tivermos uma solução aproximada T^k, v^k destas equações, podemos obter outra aproximação T^{k+1}, v^{k+1} que esperamos ser melhor, mediante as relações:

$$T^{k+1} = T^k + \frac{E_{(T^k, v^k)} \frac{\partial F_{(T^k, v^k)}}{\partial v} - F_{(T^k, v^k)} \frac{\partial E_{(T^k, v^k)}}{\partial v}}{D}$$

$$v^{k+1} = v^k + \frac{F_{(T^k, v^k)} \frac{\partial E_{(T^k, v^k)}}{\partial T} - E_{(T^k, v^k)} \frac{\partial F_{(T^k, v^k)}}{\partial T}}{D}$$

Onde

$$D = \frac{\partial E_{(T^k, v^k)}}{\partial v} \frac{\partial F_{(T^k, v^k)}}{\partial T} - \frac{\partial E_{(T^k, v^k)}}{\partial T} \frac{\partial F_{(T^k, v^k)}}{\partial v}$$

As derivadas parciais de E e F podem ser calculados como:

$$\frac{\partial F(T_2, v_2)}{\partial v_2} = \frac{1}{v_1} \left[-\frac{RT_2}{v_2} - \frac{2\beta}{v_2^3} - \frac{3\gamma}{v_2^4} - \frac{4\delta}{v_2^5} \right] + \frac{G^2}{v_2 g_c}$$

$$\frac{\partial F(T_2, v_2)}{\partial T_2} = \frac{1}{v_1} \left[\frac{R}{v_2} + \frac{\beta'}{v_2^2} + \frac{\gamma'}{v_2^3} + \frac{\delta'}{v_2^4} \right]$$

$$\frac{\partial E(T_2, v_2)}{\partial v_2} = \frac{\partial U(T_1, v_1)}{\partial v} + \left[-\frac{\beta}{v_2^2} - \frac{2\gamma}{v_2^3} - \frac{3\delta}{v_2^4} \right] + \frac{G^2 v_2}{g_c}$$

$$\frac{\partial E(T_2, v_2)}{\partial T_2} = C_v(v_1, T_1) + \left[R + \frac{\beta'}{v_2} + \frac{\gamma'}{v_2^2} + \frac{\delta'}{v_2^3} \right]$$

Com valores iniciais de temperatura e volume específico no final do incremento de comprimento, usamos simplesmente os valores de T e v no começo de outro incremento. Tendo calculado os valores de T e v no final dos incrementos de comprimento, calculamos a pressão por meio da equação de estado e velocidade mediante equação da continuidade. Estamos então na condição de iniciar o cálculo no elemento de incremento seguinte, que usa como condições de entrada as condições de saída do último incremento. Desde modo avançando ao longo da tubulação, calculando pressão, temperatura, massa específica e velocidade em todo seu comprimento.

4.3 RESULTADOS DA MODELAGEM

Com a modelagem apresentada e com o auxílio da linguagem de programação FORTRAN foi possível calcular o perfil de pressão, temperatura, massa específica e velocidade para o fluxo adiabático de um gás que obedece a equação de estado de Beattie-Bridgeman em um gasoduto com perdas produzidas por atrito.

Como já foi constatado anteriormente a equação de estado para gás ideal diverge dos dados experimentais quando o gás é submetido a altas pressões, portanto nesta situação devemos utilizar a modelagem para gás real.

A seguir temos os resultados da modelagem, em função do comprimento da tubulação, de acordo com as condições iniciais pré-estabelecidas.

Tabela 8 – Modelagem utilizando a equação de estado de gás ideal

	PRESSÃO (MPa)	TEMPERATURA (K)	VAZÃO MÁSSICA (kg/s)	FATOR DE ATRITO	MASSA ESPECÍFICA (kg/m ³)	VELOCIDADE (m/s)
Condições de Entrada – Ideal	2	300	31,75	0,003	12,8359	33,89
	4	300	31,75	0,003	25,6718	16,94
Resultados em função Comprimento do duto						
1 km	1,99	299,99	31,75	0,003	12,806	33,97
	2,99	299,99	31,75	0,003	25,657	16,96
10 km	1,95	299,99	31,75	0,003	12,534	34,71
	3,98	299,99	31,75	0,003	25,52	17,05
50 km	1,75	299,99	31,75	0,003	11,246	38,69
	3,88	299,99	31,75	0,003	24,915	17,46
100 km	1,46	299,99	31,75	0,003	9,392	25,37
	3,76	299,99	31,75	0,003	24,135	14,09

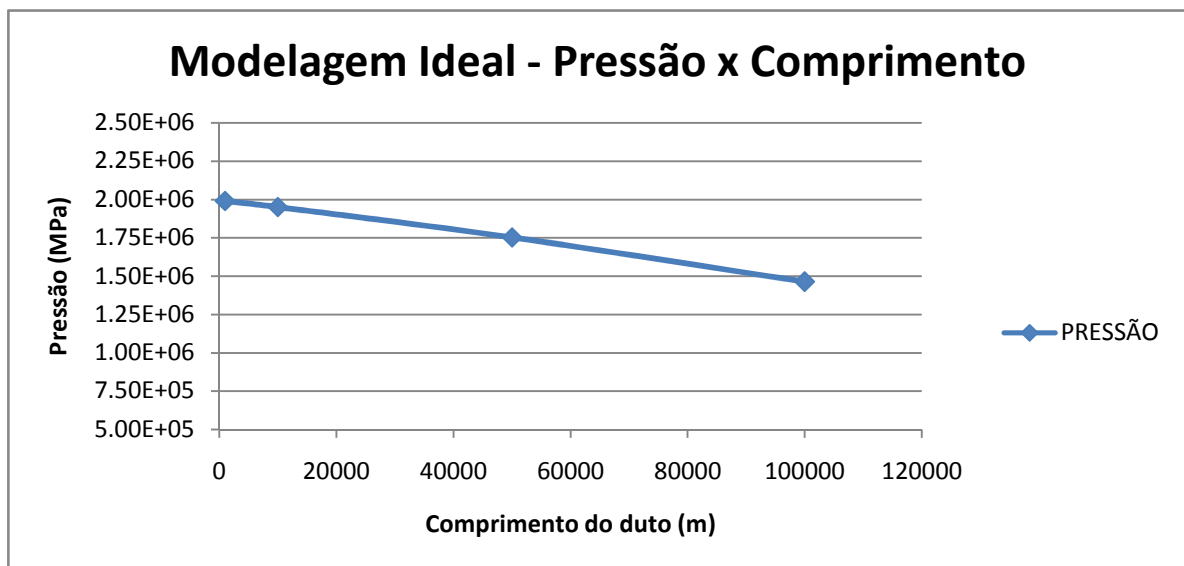


Figura 17: Pressão em função do comprimento – Modelagem para gás ideal, considerando pressão de entrada de 2MPa.

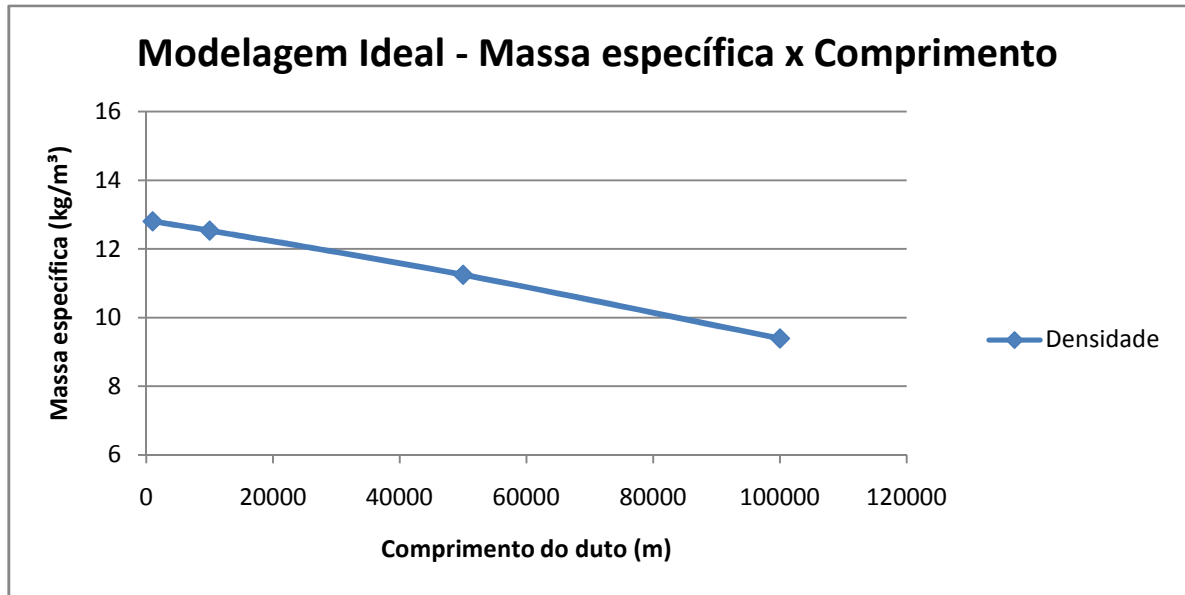


Figura 18: Massa específica em função do comprimento - Modelagem para gás ideal, considerando pressão de entrada de 2MPa.

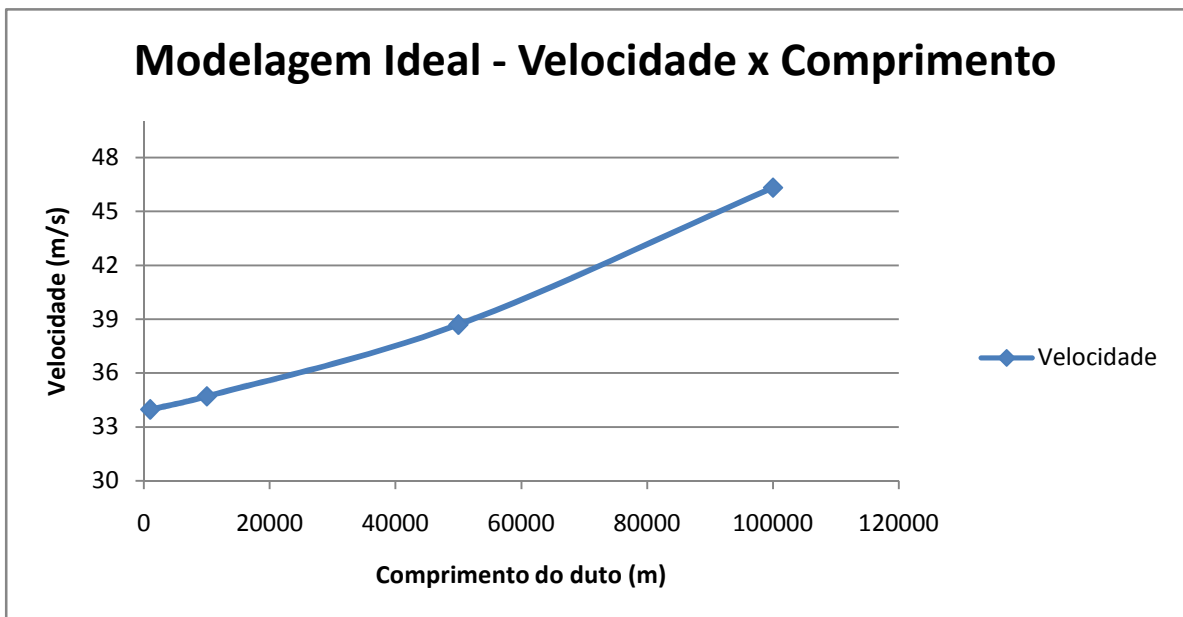


Figura 19: Velocidade em função do comprimento - Modelagem para gás ideal, considerando pressão de entrada de 2MPa.

Tabela 9 – Modelagem utilizando a equação de estado de Beattie-Bridgeman

	PRESSÃO (MPa)	TEMPERATURA (K)	VAZÃO MÁSSICA (kg/s)	FATOR DE ATRITO	MASSA ESPECÍFICA (kg/m ³)	VELOCIDADE (m/s)
Condições de Entrada - Real	10	300	31,75	0,003	74,85	1,19
	16	300	31,75	0,003	125,64	0,71
Resultados em função Comprimento do duto						
1 km	9,95	299,99	31,75	0,003	74,6	1,19
	16	299,87	31,75	0,003	125,52	0,71
10 km	9,54	296,00	31,75	0,003	72,27	1,23
	15,8	298,61	31,75	0,003	124,35	0,72
50 km	7,72	279,75	31,75	0,003	61	1,46
	14,8	293,00	31,75	0,003	118,94	0,75
100 km	5,34	258,66	31,75	0,003	44,41	2,01
	13,5	285,71	31,75	0,003	111,66	0,798

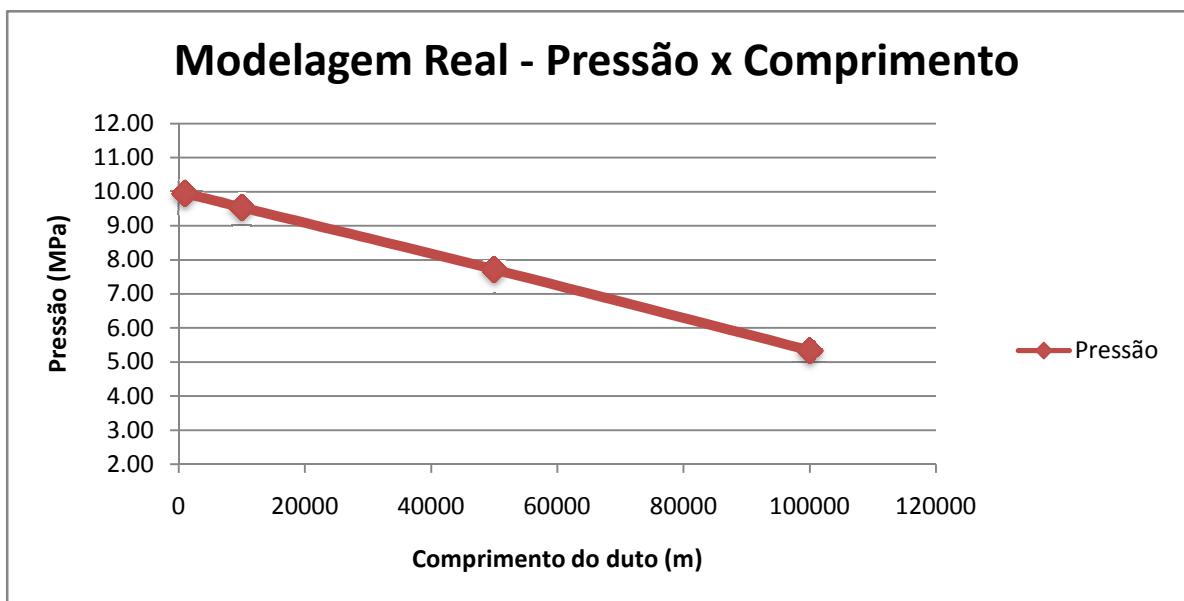


Figura 20: Pressão em função do comprimento - Modelagem para gás real, considerando pressão de entrada de 10MPa.

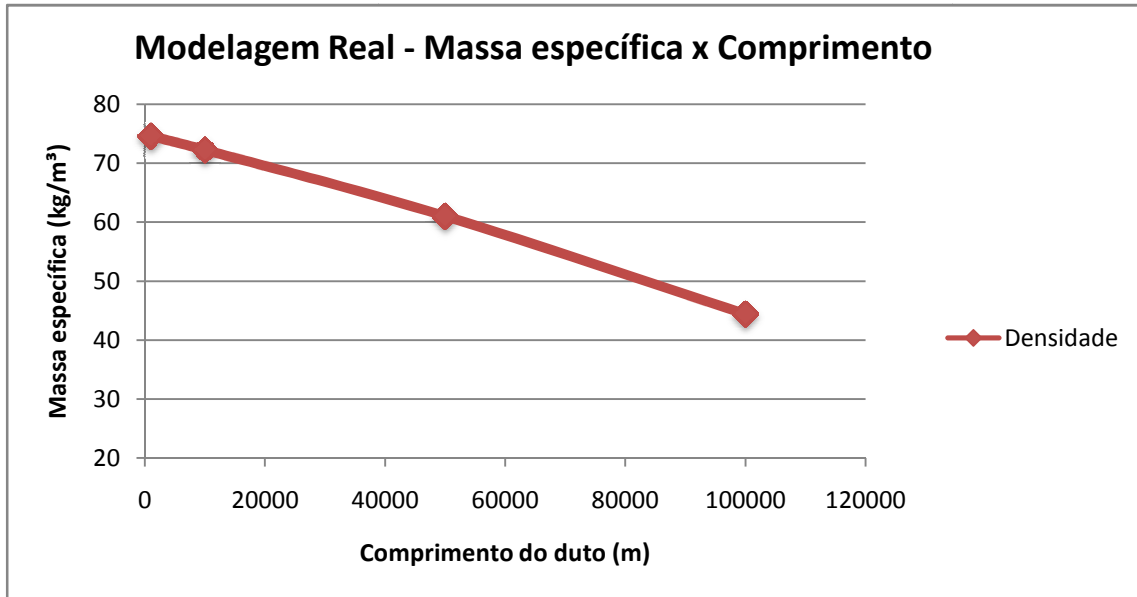


Figura 21: Massa específica em função do comprimento - Modelagem para gás real, considerando pressão de entrada de 10MPa.

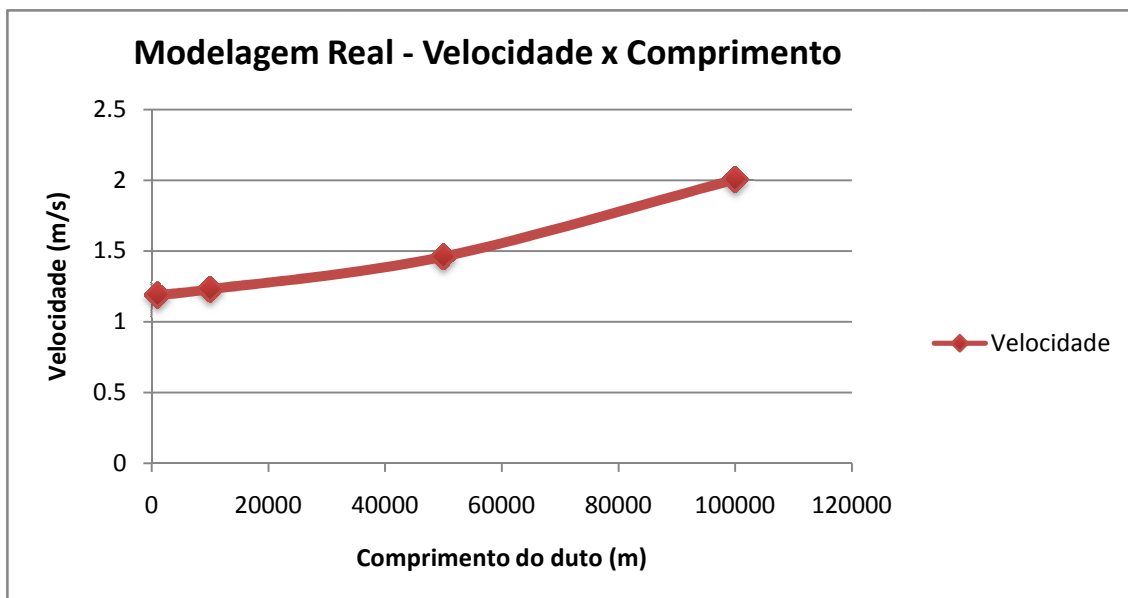


Figura 22: Velocidade em função do comprimento - Modelagem para gás real, considerando pressão de entrada de 10MPa.

5 CONCLUSÃO

Os gases quando submetido a altas pressões apresentam comportamento divergente em relação ao modelo de gás ideal. Além disso, quando o fator de compressibilidade para o gás se afasta da unidade, mais distante da idealidade se encontra o gás.

Os parâmetros do gás ideal e real foram calculados utilizando as equações de estado de Clayperon, Van der Waals, Redlich-Kwong e Beattie-Bridgeman. O gás utilizado para os cálculos foi o metano. Analisou-se a exatidão dessas equações comparando os resultados obtidos (volumes específicos) com os dados experimentais do gás metano superaquecido. Observou-se que o gás ideal a altas pressões apresenta um desvio muito grande em relação aos dados experimentais. Observou-se também que todas as equações de estado para gases reais estudadas apresentaram exatidão satisfatória, porém as equações de Redlich-Kwong e Beattie-Bridgeman foram as mais precisas.

Portanto ao modelar o escoamento de gases em dutos devemos considerar o gás como sendo real, já que o transporte destes gases ocorre normalmente a altas pressões.

Na modelagem, utilizando como condições de entrada do gás (P, T, v, G, f) , foi possível calcular os parâmetros termodinâmicos do gás, ou seja, o seu estado, em qualquer ponto ao longo do duto. Podemos observar que pressão, temperatura e massa específica diminuem em função do comprimento do duto, enquanto a velocidade aumenta.

6 REFERÊNCIAS

1 KAUZMANN, W., Teoria cinética de los Gases, Editorial Reverté, S. A, Barcelona, 1970.

2 MAHAN, B.M.; MYERS, R.J. Química, um curso universitário. Tradução da 4ª edição americana. Editora Edgard Blucher Ltda. São Paulo, 2000.

3 CASTELLAN, G.W. Físico-Química; tradução de Luiz Carlos Guimarães, Livros Técnicos e Científicos, v1. Rio de Janeiro, 1978.

4 BALZHISER, R.E., SAMUELS, M. R., ELIASSEN, J.D. – Termodinâmica Química para Ingenieros, Editorial Prentice/Hall Internacional, Madrid, 1980.

5 van WYLEN, G.; SONNTAG, R.; BORGNAKKE, C. Fundamentos da Termodinâmica Clássica. Tradução da 4ª edição Americana. Editora Edgard Blucher Ltda. São Paulo, 2003.

6 RUSSEL, J. B. Química Geral. Tradução e revisão técnica: Márcia Guekezian... [et. Al] - volume 1. 2ª ed.-São Paulo: Pearson Education do Brasil, 1994.