



Desenvolvimento de um simulador para cálculo de tubulações industriais

Henrique Luiz Welzel

Projeto de Final de Curso

Orientador

Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Coorientador

Rafael Raoni Lopes de Britto, Eng.

Outubro de 2012

Desenvolvimento de um simulador para cálculo de tubulações industriais

Henrique Luiz Welzel

Projeto Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenharia Química.

Aprovado por:

Evaristo Chalbaud Biscaia Junior, D.Sc.

Eduardo Rocha de Almeida Lima, D.Sc.

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Orientado por:

Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Rafael Raoni Lopes de Britto, Eng.

Rio de Janeiro, RJ-Brasil

Outubro de 2012

Welzel, Henrique Luiz.

Desenvolvimento de um simulador de tubulações industriais / Henrique Luiz Welzel. Rio de Janeiro: UFRJ / EQ, 2012.

xi, 75 p.;il.

(Projeto Final) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2011.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi e Rafael Raoni Lopes de Britto.

1. Simuladores de Processo. 2. Cálculo de Tubulações. 3. Programação. 4. Java. 5. Projeto Final (Graduação – UFRJ/EQ). 6. Argimiro Resende Secchi e Rafael Raoni Lopes de Britto.

Dedico este trabalho a minha esposa
e a todos aqueles que estavam presentes nos momentos difíceis.

"Jamais considere seus estudos como uma obrigação,mas como uma oportunidade invejável (...) para aprender a conhecer a influência libertadora da beleza do reino do espírito, para seu próprio prazer pessoal e para proveito da comunidade à qual seu futuro trabalho pertencer"

Albert Einstein

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela oportunidade de aprender e estudar.

Agradeço aos meus orientadores, que sem dúvida, forneceram toda instrução, dedicação e disponibilidade necessária.

Agradeço à minha família, por todo apoio, incentivo e compreensão durante toda a vida.

Agradeço também a todos os amigos, que colocaram a disposição seus conselhos e conhecimento, fornecendo a força e confiança para seguir em frente, independente das dificuldades.

Por fim, agradeço à banca de projeto final pela disponibilidade e interesse.

Resumo do Projeto Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Desenvolvimento de um simulador para cálculo de tubulações industriais

Henrique Luiz Welzel

Outubro de 2012

Orientadores: Argimiro Resende Secchi, D.Sc.
 Rafael Raoni Lopes de Britto, Eng.

Cálculos de redes são de grande importância para a engenharia por serem extremamente necessárias em indústrias, para prever o escoamento de produtos e utilidades necessárias à produção, abastecimento de água e gás combustível a cidades, entre outros. Neste trabalho foi desenvolvido um software, totalmente escrito em linguagem Java, capaz de realizar cálculos de rede utilizando equipamentos como misturadores, separadores e tubulações. Para possibilitar a previsão do comportamento de diferentes fluidos durante o escoamento em tubulações, também foram empregados alguns modelos termodinâmicos de substâncias puras. Com o auxílio de métodos numéricos específicos foram implementadas equações referentes às operações unitárias necessárias aos cálculos a fim de resolver o problema de forma sequencial. O trabalho teve como objetivo também o desenvolvimento de um ambiente amigável, onde o usuário é capaz de criar e simular uma rede de forma fácil e rápida. A partir do desenvolvimento deste software, espera-se que seja possível a simulação de qualquer tipo de rede, que demande apenas cálculos sequenciais, com uso de pacotes termodinâmicos.

ÍNDICE

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO II - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
II.1 Simuladores de processos	3
II.1.1 EMSO	4
II.1.2 HySys	4
II.2 Linguagem Java	5
II.3 Cálculo de Tubulações	6
II.3.1 Equação da Quantidade de Movimento	6
II.3.2 Equações de perda de carga	7
II.3.2.1 Perdas Localizadas	8
II.3.2.2 Equações Darcy-Weisbach	10
II.3.2.2.1 Fator de Atrito de Darcy	10
II.3.2.2.2 Regime Laminar	12
II.3.2.2.3 Região de Transição	12
II.3.2.2.4 Regime Turbulento	13
II.3.2.3 Equação de Hazen-Williams.....	14
II.3.2.4 Características das tubulações.....	15
II.3.3 Balanço de Energia aplicado a Tubulações	17
II.4 Princípios Termodinâmicos	18
II.4.1 Regra de fases.....	19
II.4.2 Propriedades termodinâmicas	19
II.4.2.1 Propriedades de gases ideais	21
II.4.2.2 Propriedades residuais	22
II.4.3 Equações de Estado Cúbicas para substâncias puras	23

II.4.3.1	Pressão de vapor por equações de estado cúbicas	26
II.5	Métodos Numéricos	27
II.5.1	Newton-Raphson	27
II.5.2	Método da Secante	28
II.5.3	Método da Seção Áurea	28
II.5.4	Função de Regularização	29
II.5.5	Equação de terceiro grau	30
II.5.6	Equação de quarto grau	31
CAPÍTULO III	- METODOLOGIA	33
III.1	Implementação	33
III.1.1	Estrutura do Programa	33
III.1.2	Estrutura da classe Corrente	35
III.1.2.1	Corrente com densidade especificada	36
III.1.2.2	Corrente com Equação de Estado	37
III.1.2.2.1	Análise da Densidade	38
III.1.2.2.2	Análise da Pressão de Vapor	40
III.1.2.2.3	Análise da Variação de Entalpia	45
III.1.3	Estrutura da classe Tubulação	46
III.1.3.1	Tubulação com densidade especificada	47
III.1.3.2	Tubulação com Equações de Estado	48
III.1.3.3	Análise do Fator de Atrito	49
III.1.4	Estrutura da classe Nó	50
III.2	Cálculo Sequencial	53
CAPÍTULO IV	- RESULTADOS	54
IV.1	Tubulação	54
IV.1.1	Por densidade	54
IV.1.2	Por Equação de estado	55

IV.2	Misturador	56
IV.3	Rede	56
IV.3.1	Por densidade	57
IV.3.2	Por Equação de Estado.....	58
CAPÍTULO V - CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS		60

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1. Valores de K de alguns acidentes encontrados em tubulações, Fox et al., 2006.....	8
Tabela 2. Valores de L_{eq} de alguns acidentes encontrados em tubulações, Fox et al., 2006.....	9
Tabela 3. Valores típicos para o fator de complexidade, PRJ-TEC.....	9
Tabela 4. Constantes de Hazen-Williams, Macintture et al., 2010.....	15
Tabela 5. Valores de rugosidade para alguns materiais comuns na engenharia, Macintture et al., 2010.	16
Tabela 6. Diâmetro Nominal x Schedule x Diâmetro Interno. Diâmetros em polegadas.	17
Tabela 7. Parâmetros para equações de estado cúbicas (29), Smith et al., 2007.....	25
Tabela 8. Comparação de densidade a 300K e 1bar por Peng-Robinson. Valores em kg/m^3	38
Tabela 9. Comparação de densidade a 300K e 10bar por Peng-Robinson. Valores em kg/m^3	38
Tabela 10. Comparação de densidade a 500K e 10bar por Peng-Robinson. Valores em kg/m^3	38
Tabela 11. Comparação de densidade a 300K e 1bar. Valores em kg/m^3	39
Tabela 12. Comparação de densidade a 300K e 10bar. Valores em kg/m^3 . .	39
Tabela 13. Comparação de densidade a 500K e 10bar. Valores em kg/m^3 . .	39

Tabela 14. Comparação de pressão de vapor a 300K por Peng-Robinson. Valores em bar.	42
Tabela 15. Comparação de pressão de vapor a 350K por Peng-Robinson. Valores em bar.	43
Tabela 16. Comparação de pressão de vapor a 400K por Peng-Robinson. Valores em bar.	43
Tabela 17. Comparação de pressão de vapor a 300K. Valores em bar.	43
Tabela 18. Comparação de pressão de vapor a 350K. Valores em bar.	44
Tabela 19. Comparação de pressão de vapor a 400K. Valores em bar.	44
Tabela 20. Comparação de entalpia de vaporização a 300K por Peng- Robinson. Valores em J/mol.	45
Tabela 21. Comparação de entalpia de vaporização a 350K por Peng- Robinson. Valores em J/mol.	45
Tabela 22. Comparação de entalpia de vaporização a 400K por Peng- Robinson. Valores em J/mol.	45
Tabela 23. Dados para Simulação de Tubulação por Densidade.....	54
Tabela 24. Resultado da Simulação de Tubulação por Densidade	54
Tabela 25. Dados para Simulação de Tubulação por Equação de Estado....	55
Tabela 26. Resultado da Simulação de Tubulação por Equação de Estado .	55
Tabela 27. Análise de mistura de duas correntes de butano a 0,1 bar. Saídas em Kelvin.	56
Tabela 28. Condições dos Equipamentos da Rede por Densidade.....	57
Tabela 29. Resultados da simulação da Rede por Densidade.	58
Tabela 30. Condições dos Objetos da Rede por Equação de Estado.	58
Tabela 31. Resultados da simulação da Rede por Equação de Estado.	59

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Gráfico de Moody.	11
Figura 2. Janela do menu principal.....	33
Figura 3. Janela de conversão de unidades.....	34
Figura 4. Janela de inserção de dados. Densidade especificada.....	36
Figura 5. Janela de inserção de dados. N-butano por Peng-Robinson.....	37
Figura 6. Curva Pressão x Volume de uma equação de estado cúbica.....	40
Figura 7. Janela de Tubulação / Detalhes.....	46
Figura 8. Função Regularizada. Rugosidade Relativa = 0,05.....	49
Figura 9. Função Regularizada. Rugosidade Relativa = 0.....	50
Figura 10. Janela Nó.....	51
Figura 11. Rede para Simulação.....	57

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO

Redes de distribuição de fluidos são compostas por inúmeras tubulações interligadas formando malhas e anéis. Uma malha pode ser definida como um circuito formado por dois tubos que se interligam em dois nós por caminhos diferentes e um anel definido como um circuito de tubulações que envolve determinada região onde existem outras tubulações ou até mesmo malhas. Os cálculos dessas redes são muito importantes para prever o abastecimento de um fluido a diferentes pontos. Um caso comum é o abastecimento de água em redes urbanas, prediais ou industriais.

É preciso saber se o fluido em questão alimentará os pontos determinados com condições pré-estabelecidas de pressão e vazão. Esses cálculos se tornam muito trabalhosos em redes grandes por apresentarem muitas equações e muitas variáveis. Para redes sem anéis e com condições de entrada conhecidas, é possível o cálculo de forma sequencial, em que o resultado da saída de um equipamento é entrada do equipamento seguinte, obtendo assim as condições de saída do escoamento.

Alguns métodos foram especialmente desenvolvidos para resolução de sistemas representativos de redes com anéis como o método de Krope e Trop, Shacham, Dejan e Hardy-Cross, sendo esse último o método mais consagrado e utilizado atualmente, que consiste em um processo iterativo governado pelo atendimento do balanço de massa em cada nó e pela lei que diz que a soma algébrica da perda de carga em qualquer círculo de tubulações da rede deve ser zero, Raoni et al., 2012

A motivação para este trabalho se originou na importância dos cálculos de rede, simulação e dimensionamento para o Engenheiro Químico. Muitas vezes nos encontramos em frente a cálculos que necessitam do uso de métodos de resolução que podem ser tediosos e sujeitos a erros de cálculo. Para que esses cálculos sejam feitos de forma rápida e precisa é necessário o uso do computador e métodos numéricos apropriados.

O trabalho desenvolvido neste projeto de final de curso teve como objetivo o desenvolvimento de um software capaz de realizar cálculos de rede sequenciais

utilizando equipamentos como misturadores, separadores e tubulações através do uso de modelos termodinâmicos de substâncias puras e com o auxílio de métodos numéricos específicos.

O objetivo inicial foi o desenvolvimento de um ambiente amigável para que fosse possível criação de um fluxograma representativo da rede a ser simulada, sendo este fluxograma responsável por fornecer as informações necessárias para a resolução do problema.

A partir do desenvolvimento deste software, espera-se que seja possível a resolução de qualquer tipo de simulação de redes sequenciais com uso de pacotes termodinâmicos.

Este trabalho encontra-se dividido em cinco capítulos, ao longo dos quais são apresentados todos os conceitos envolvidos no desenvolvimento do software. No CAPÍTULO II, é feita uma revisão bibliográfica, onde é apresentada uma breve introdução sobre simuladores e o ambiente de desenvolvimento de software utilizado. Ainda nesse capítulo, são revisados conceitos de escoamento de fluidos em tubulações, conceitos termodinâmicos, equações de estado e são apresentados os métodos numéricos utilizados.

No CAPÍTULO III, é apresentado como o software foi desenvolvido e como o programa gera os resultados. É mostrada brevemente a estrutura visual do programa e discutido como cada equipamento realiza seus cálculos.

Em seguida, os resultados obtidos a partir das informações dos capítulos anteriores são apresentados e discutidos no CAPÍTULO IV. Os resultados encontram-se divididos de acordo com alguns casos particulares analisados.

Por fim, no CAPÍTULO V, encontram-se as conclusões deste trabalho e as sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO II - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

II.1 Simuladores de processos

Os simuladores de processo são indispensáveis no atual cenário de desenvolvimento tecnológico, pois são ferramentas fundamentais para qualquer análise de processo. Consequentemente são essenciais na indústria química e foco de muita pesquisa e desenvolvimento.

Simuladores de processos são programas computacionais que possibilitam a reprodução do comportamento de um processo em uma determinada condição, sendo basicamente divididos em: dimensionamento, que é utilizado para o cálculo das dimensões principais dos equipamentos e do consumo de utilidades e demais insumos, de modo a atender às metas do projeto; e simulação, onde o modelo é utilizado para reproduzir o comportamento de um processo já dimensionado quando operado em condições outras que não as do projeto, Perlingeiro et al., 2005.

Para a utilização de um simulador, seus modelos devem conter as equações matemáticas ou sequências lógicas de cálculos que representem um equipamento ou fenômeno de acordo com as hipóteses adotadas. O modelo deve ser capaz de gerar respostas a partir de dados de entrada fornecidos pelo usuário.

As equações dos modelos devem ser resolvidas a partir de métodos numéricos apropriados, Secchi et al., 2012. Estes devem ser adequados para obter a convergência das diversas equações provenientes de diferentes tipos de modelagens implementadas na rotina do simulador ou no próprio modelo.

Simuladores de processos vêm ganhando, cada vez mais, um significativo espaço na área de engenharia, pois apresentam grandes vantagens, tais como:

- Contenção de despesas;
- Possibilidade de implementação de processos fortemente integrados com diversos ciclos de massa e energia;
- Necessidade de maior compreensão de processos cada vez mais complexos;
- Otimização e construção de processos otimizados;

- Possibilidade de construções de protótipos virtuais, verificação de projetos, etc.

Atualmente, diversos tipos de simuladores são disponibilizados, tais como HySys, AspenPlus, EMSO, DWSim, etc.

II.1.1 EMSO

EMSO é a sigla para *Environment for Modeling Simulation and Optimization*, sendo este um software de simulação de processos do projeto ALSOC. Sua construção foi iniciada em 2001 por Rafael de Pelegrini Soares. ALSOC é a sigla utilizada para identificar o projeto de um Ambiente Livre para Simulação, Otimização e Controle de Processos, que é o resultado de um esforço da aproximação universidade-indústria através da padronização e distribuição sem custo de especificações e ferramentas de *software* entre universidades e empresas consorciadas, Projeto Alsoc et al., 2012.

No EMSO tem-se um ambiente gráfico onde o usuário pode representar processos complexos simplesmente selecionando e conectando os modelos dos equipamentos. Na maioria dos casos, os modelos disponíveis na biblioteca de modelos do EMSO (EML - *EMSO Modeling Library*) podem ser utilizados sem modificações. Mas o usuário pode ainda desenvolver seus próprios modelos utilizando a linguagem de modelagem do sistema.

A linguagem de modelagem do EMSO se apresenta na forma orientada a objetos e baseada em equações, não envolvendo a programação dos métodos numéricos associados à resolução do modelo. Com isso, é facilitada a elaboração de novos modelos de equipamentos e processos.

II.1.2 HySys

O HySys é uma ferramenta de simulação de processos comercializada pela empresa AspenTech, Aspen et al., 2012. Esse software é bastante usado em

projetos conceituais na área de produção de óleo e gás, processamento de gás, refinamento de petróleo e processos de separação.

Uma das grandes vantagens do HySys é a sua facilidade de uso e treinamento. Seu simulador é muito intuitivo e mesmo pessoas com pouco conhecimento prévio de simuladores podem aprender a simular por conta própria. Além disso, o HySys apresenta uma vasta gama de substâncias e pacotes termodinâmicos em seus bancos de dados e apresenta diversos equipamentos comumente encontrados em indústrias prontos para serem usados. Com isso, o HySys se tornou uma forte ferramenta para cálculos de simulação de processos.

II.2 Linguagem Java

Java, Deitel et al., 2005, é uma linguagem de programação de alto nível desenvolvido na década de 90 e baseada em C++, Deitel et al., 2006. A linguagem de alto nível foi desenvolvida de modo a acelerar o processo de programação uma vez que ela se aproxima do inglês cotidiano e contém funções matemáticas comumente usadas.

A linguagem de alto nível não é a linguagem natural de um computador. Esta é chamada de linguagem de máquina e consiste basicamente em instruções na forma de números 0 e 1. Para que a linguagem de alto nível desenvolvida por um programador, possa ser entendida pelo computador, é necessário traduzi-la para linguagem de máquina. Os programas que fazem essa tradução são chamados de compiladores e estão presentes em diversos ambientes de desenvolvimento de software (IDE) dedicados a auxiliar o desenvolvimento da programação.

A linguagem Java se distancia de seu predecessor (C++) principalmente por se tratar de uma linguagem totalmente orientada a objetos. A linguagem orientada a objetos modela os softwares de forma semelhante ao que as pessoas usam para descrever objetos do mundo real. Esses objetos são definidos por classes e cada classe implementa diversos métodos que definem o que cada objeto pode fazer, por exemplo, uma classe “Sapo” provavelmente implementaria um método “Saltar” e uma classe “Ave” um método “Voar”. Outra vantagem da programação orientada a

objetos está no proveito dos relacionamentos de herança, ou seja, uma classe derivada pode herdar os métodos de classes existentes. Dessa forma classes novas podem ser criadas a partir de classes já existentes, aperfeiçoando-as.

A programação deste trabalho foi totalmente desenvolvida em linguagem Java utilizando o IDE Eclipse, Eclipse et al., 2012.

II.3 Cálculo de Tubulações

Os cálculos de tubulações são necessários em instalações industriais, prediais e urbanas para prever a queda de pressão gerada pelo atrito durante o escoamento de um determinado fluido em tubulações. Estes cálculos se tornam necessários para prever, por exemplo, a potência necessária de uma bomba ou compressor para que se consiga transferir um fluido ao longo de uma tubulação sob determinadas condições de temperatura e pressão, transportando o fluido ao seu destino nas condições requeridas pelos seus recebedores.

Para a realização destes cálculos, alguns princípios físicos e termodinâmicos devem ser levados em consideração, sendo estes explicados mais detalhadamente a seguir.

II.3.1 Equação da Quantidade de Movimento

Neste trabalho, para realizar cálculos de perda de carga ao longo de tubulações partiu-se da equação da conservação de quantidade de movimento dos fluidos na sua forma diferencial, as equações de Navier-Stokes. Considerando-se um regime permanente de um líquido ideal (invíscido) e escoamento unidimensional sujeito à ação da gravidade, a equação pode ser escrita da seguinte forma, Fox et al., 2006:

$$\frac{dP}{dz} + \frac{d}{dz} \left(\frac{\rho V^2}{2} \right) + \rho g = 0 \quad (1)$$

que é conhecida como Equação de Bernoulli, que representa o princípio da conservação de energia cinética ($\rho v^2/2$), energia de pressão (P) e energia potencial

gravitacional (ρg), que quando aplicada em dois pontos de uma tubulação, e ao ser considerada a densidade constante, pode ser escrita da seguinte forma:

$$\left(\frac{P_1}{\rho g} + \frac{V_1^2}{2g} + z_1\right) = \left(\frac{P_2}{\rho g} + \frac{V_2^2}{2g} + z_2\right) \quad (2)$$

Quando a equação é aplicada para líquidos reais (fluidos viscosos), um termo deve ser acrescentado na equação para o cômputo da perda de carga devido ao atrito, resultando na seguinte equação:

$$\left(\frac{P_1}{\rho g} + \frac{V_1^2}{2g} + z_1\right) - \left(\frac{P_2}{\rho g} + \frac{V_2^2}{2g} + z_2\right) = hl_T \quad (3)$$

em que hl_T representa a perda de carga total no escoamento, P a pressão, ρ a massa específica, g a aceleração da gravidade, V velocidade e z a elevação, entre o ponto inicial e final da linha.

Para o cômputo da perda de carga (hl_T) de um escoamento em uma tubulação, são utilizadas equações empíricas, sendo algumas mais importantes apresentadas a seguir. Para facilitar a conexão da equação da quantidade de movimento com a equação de perda de carga, estas serão apresentadas na forma em que a perda de carga será medida por unidade de comprimento, assim como na equação (3).

II.3.2 Equações de perda de carga

A perda de carga total em um escoamento é considerada como a soma entre perdas distribuídas (hl) e perdas localizadas (hl_m). Perdas distribuídas são causadas pelo atrito no escoamento ao longo do comprimento reto de um tubo e perdas localizadas são causadas por entradas, acessórios, variações de área entre outros acidentes encontrados em uma tubulação.

II.3.2.1 Perdas Localizadas

Para o cálculo das perdas localizadas, é adotada uma equação genérica que se faz uso de um coeficiente de perda (K), que é utilizado para representar o tipo de acidente da tubulação. A equação é representada da seguinte maneira, Fox et al., 2006:

$$hl_m = K \frac{\bar{V}^2}{2g} \quad (4)$$

em que hl_m é a perda de carga do acidente, K é o coeficiente específico do acidente, V é a velocidade do escoamento e g a aceleração da gravidade.

Os valores de K são valores obtidos experimentalmente e estão espalhados em diversas fontes bibliográficas. Alguns destes valores são listados na Tabela 1.

Tabela 1. Valores de K de alguns acidentes encontrados em tubulações, Fox et al., 2006.

Acidente	K
Entrada Reentrante	0,78
Entrada Borda-Viva	0,5
Entrada com Arredondamento	0,04 a 0,28
Contração $A2/A1=0,5$ a 60 graus	0,06
Contração $A2/A1=0,5$ a 120 graus	0,18

Outro meio de calcular perdas de carga localizadas é através do comprimento equivalente. Esse comprimento representa quanta perda de carga um acidente gera quando comparado a um trecho reto da tubulação.

Esta abordagem facilita o computo da perda de carga total, que deve ser calculado a partir da soma dos comprimentos retos (L) e comprimentos equivalentes (L_{eq}) da tubulação, podendo ser representado por L_{tot} , e usado tanto na equação de Darcy, equação (6), quanto na equação de Hazen-Williams, equação (12), apresentadas a seguir.

Os valores de L_{eq} (ou L_{eq}/D) podem ser encontrados tabelados na literatura para diferentes acidentes de tubulações. Alguns desses valores estão apresentados na Tabela 2.

Tabela 2. Valores de L_{eq} de alguns acidentes encontrados em tubulações, Fox et al., 2006.

Acidente	L_{eq}/D
Válvula gaveta (aberta)	8
Válvula globo (aberta)	340
Válvula esfera (aberta)	3
Cotovelo 90°	30
Cotovelo 45°	16
Tê direto	20
Tê ramal	60

Mais um meio utilizado para calcular as perdas localizadas é através do fator de complexidade. Quando não se tem certeza, ou não se sabe quais e quantos são os acidentes na linha, esse fator estima uma perda de carga através da correção do comprimento reto da linha. Esse comprimento pode ser adicionado ao comprimento reto de forma a encontrar um comprimento total para ser usado no cálculo de perda de carga. Uma equação empírica foi desenvolvida e está apresentada a seguir, PRJ-TEC.

$$L_{eq} = L_{reto} \cdot FC \cdot (0,347 \cdot D^{0,5} + 0,216) \quad (5)$$

em que L_{eq} é o comprimento equivalente da tubulação, L_{reto} é o comprimento reto real da tubulação, FC o fator de complexidade e D o diâmetro interno da tubulação (in).

Valores usuais de FC são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3. Valores típicos para o fator de complexidade, PRJ-TEC.

FC	Características da Tubulação
4	Tubos curtos ($\leq 30m$) em sistemas com muitas válvulas, reduções, acessórios, etc.
2	Tubos curtos (próximo a 30m) com diâmetros menores que 3" que acompanham tubos maiores ou conectam equipamentos próximos.
1	Tubos normais (30 a 100m) que interligam equipamentos principais dentro do limite de bateria
0,5	Tubos longos e de razoável comprimento reto (cerca de 150m) que passam pela unidade ou interligam unidades por fora do limite de bateria.
0,25	Tubos de suprimento de utilidades fora do limite de bateria.

Para o cálculo das perdas de carga distribuídas algumas equações são encontradas na literatura a fim de melhor representar o escoamento de um determinado fluido, sendo estas equações dependentes das propriedades físicas do fluido, como densidade e viscosidade, das características da tubulação, como diâmetro interno, comprimento e rugosidade, e da vazão volumétrica do escoamento.

Algumas equações são amplamente utilizadas atualmente, sendo duas das mais importantes a equação de Darcy-Weisbach e a de Hazen-Williams, descritas mais detalhadamente a seguir.

II.3.2.2 Equações Darcy-Weisbach

A equação de Darcy-Weisbach é uma das equações mais utilizadas para o cálculo da perda de pressão devido ao atrito em tubulações durante o escoamento de qualquer fluido. Ela é amplamente utilizada pelos simuladores atuais e é representada da seguinte forma, Fox et al., 2006:

$$hl = f \frac{L \bar{V}^2}{D 2g} \quad (6)$$

em que hl é a perda de carga, f representa o fator de atrito, L o comprimento reto da tubulação, D o diâmetro da tubulação, V a velocidade e g a aceleração da gravidade.

Essa equação tem caráter teórico e pode ser desenvolvida através de uma análise dimensional. Por outro lado, o fator de atrito, o qual relaciona a perda de carga, o número de Reynolds e a rugosidade relativa, deve ser determinado experimentalmente. Ele será melhor explorado na próxima seção.

II.3.2.2.1 Fator de Atrito de Darcy

O fator de atrito da equação de Darcy-Weisbach merece uma atenção especial em função de possíveis dificuldades na hora da programação de um cálculo de perda de carga.

Através de uma análise dimensional é possível provar que o fator de atrito é função do número de Reynolds e da rugosidade relativa da tubulação (rugosidade /diâmetro interno). Sua relação, porém, foi determinada experimentalmente, sendo seus resultados publicados por L. F. Moody, Moody et al., 1944, e representados na Figura 1.

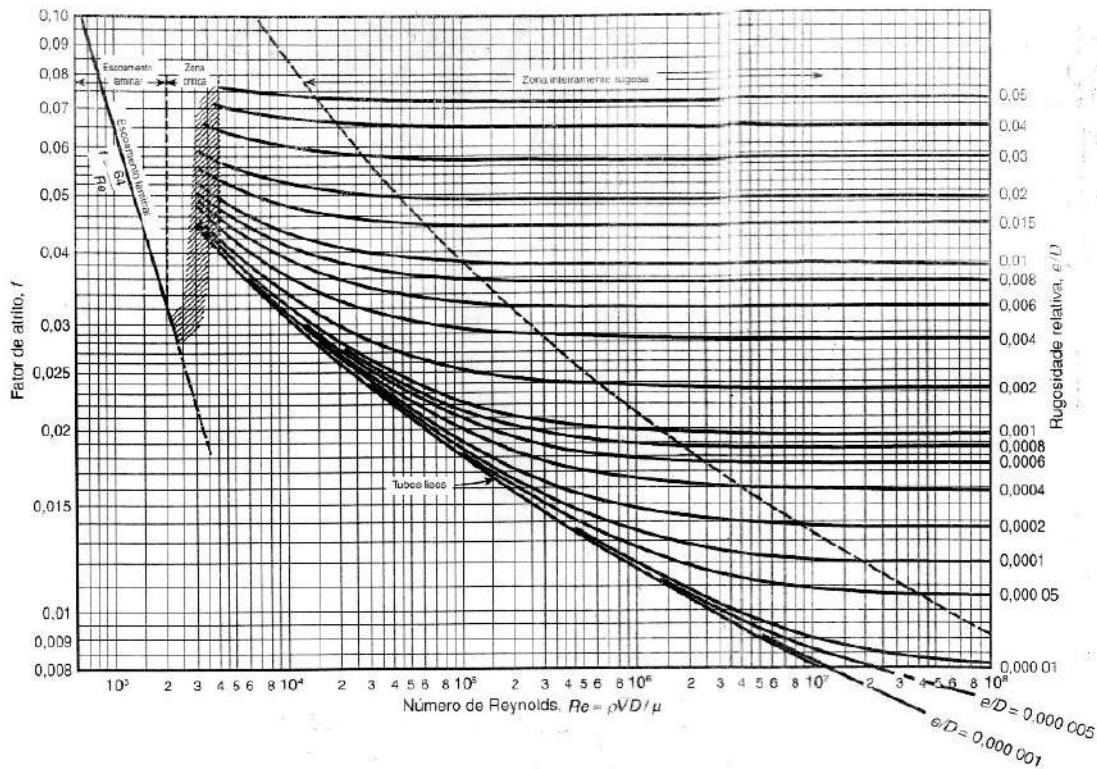


Figura 1. Gráfico de Moody.

Para evitar a necessidade do uso de métodos gráficos na obtenção de f , que se torna impossível durante uma programação, diversas expressões matemáticas foram criadas para o ajuste desses dados experimentais.

Três regiões são de interesse por apresentarem diferentes comportamentos em diferentes faixas do número de Reynolds. Região de regime laminar, região de transição e região de regime turbulento.

II.3.2.2.2 Regime Laminar

É possível observar no gráfico de Moody que a região com números de Reynolds menores que 2300 apresenta uma relação linear entre o logaritmo do fator de atrito e o logaritmo do número de Reynolds. De fato essa relação pode ser provada teoricamente e é válida para qualquer fluido escoando em regime laminar, sendo equacionada da seguinte maneira, Fox et al., 2006:

$$f = \frac{64}{Re} \quad (7)$$

em que Re é o número de Reynolds do escoamento, sendo representado pela seguinte equação:

$$Re = \frac{\rho v D}{\mu} \quad (8)$$

sendo ρ a massa específica, v a velocidade e μ a viscosidade dinâmica do fluido e D o diâmetro interno do tubo.

É interessante notar que essa relação mostra que para um fluido escoando sob regime laminar, o fator de atrito é função somente do número de Reynolds e não da rugosidade do tubo.

II.3.2.2.3 Região de Transição

Na região de transição, ou região crítica (número de Reynolds entre 2300 e 4000), é notado um brusco aumento no valor do fator de atrito com o aumento do número de Reynolds.

Atualmente não há uma relação ou equação que seja totalmente aceita e utilizada na literatura para esta faixa de número de Reynolds, porém, uma correlação foi desenvolvida por Churchill, Churchill et al., 1977, que fornece valores para o fator de atrito sendo função não somente do número de Reynolds, como também da rugosidade relativa.

Essa equação proposta por Churchill foi desenvolvida para varrer não somente a área de transição, mas toda a faixa de número de Reynolds e de rugosidade relativa. Porém, neste trabalho, esta equação foi utilizada somente para prever o comportamento do fator de atrito na faixa de número de Reynolds de 2300 a 4000. A equação é representada a seguir:

$$f = 8 \left(\left(\frac{8}{Re} \right)^{12} + \frac{1}{(A + B)^{1,5}} \right)^{1/12} \quad (9)$$

sendo:

$$A = \left\{ -2,457 \ln \left[\left(\frac{7}{Re} \right)^{0,9} + 0,27 \left(\frac{\varepsilon}{D} \right) \right] \right\}^{16}$$

$$B = \left(\frac{37}{Re} \right)^{16}$$

em que ε é a rugosidade da tubulação, que depende de seu material.

II.3.2.2.4 Regime Turbulento

Na região de regime turbulento (número de Reynolds maiores que 4000) é muito comum o uso da equação de Colebrook, Colebrook et al., 1937, para a obtenção do valor do fator de atrito. A equação está apresentada a seguir:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 0,87 \ln \left[0,27 \left(\frac{\varepsilon}{D} \right) + \frac{2,51}{Re \sqrt{f}} \right] \quad (10)$$

O único inconveniente dessa equação é o fato da equação ser implícita em f , o que requer o uso de um método numérico para sua resolução.

Diversas outras equações também foram desenvolvidas para prever comportamento do fator de atrito nesta região, sendo estas sempre comparadas com a equação de Colebrook para verificar sua qualidade. Em geral tais equações são explícitas em f para facilitar sua resolução sem necessidade de métodos

numéricos iterativos para sua resolução. Uma delas, a equação de Sousa-Cunha-Marques, Souza et al., 1999, é apresentada a seguir.

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2\text{Log}_{10} \left[\frac{\varepsilon}{3,7D} - \frac{5,16}{\text{Re}} \text{Log}_{10} \left(\frac{\varepsilon}{3,7D} + \frac{5,0}{\text{Re}^{0,87}} \right) \right] \quad (11)$$

Seu desvio quando comparada com a equação de Colebrook é pequeno e por isso ela é utilizada nesse trabalho como uma estimativa inicial para a resolução da equação de Colebrook, fazendo com que o método de Newton-Raphson convirja rapidamente.

II.3.2.3 Equação de Hazen-Williams

A equação de Hazen-Williams, Hazen et al., 1933, é uma equação empírica muito utilizada para os cálculos de perda de carga quando o fluido a ser escoado é água a temperatura ambiente. A equação pode ser apresentada de diversas formas dependendo das unidades utilizadas. Aqui está apresentada a equação quando utilizado o Sistema Internacional de Unidades (SI):

$$hf = \frac{10,67 LQ^{1,85}}{C^{1,85}D^{4,87}} \quad (12)$$

em que hf é a perda de carga (m), L o comprimento do tubo (m), Q a vazão volumétrica (m^3/s), D o diâmetro interno do tubo (m) e C a constante de Hazen-Williams (adimensional).

A constante de Hazen-Williams varia normalmente entre valores de 80, para tubos muito rugosos, a 150, para tubos lisos. Alguns valores típicos para diferentes materiais de tubos estão representados na Tabela 4.

Tabela 4. Constantes de Hazen-Williams, Macinttore et al., 2010.

Material	C
Ferro fundido	120 a 130
Ferro fundido usado	90
Cimento	130
Cobre	130
Aço soldado novo	130
Aço soldado com 30 anos de uso	75
Polietileno	140
PVC d=50mm	125
PVC d=100mm	140

Assim como a equação de Darcy-Weisbach, a equação de Hazen-Williams foi formulada para o cálculo das perdas de carga distribuídas. Para o cálculo da perda de carga total, deve-se, com o uso dos coeficientes de perda dos respectivos acidentes, somar as perdas de carga localizadas, obtidas a partir da equação (4) com a perda de carga distribuída, obtida a partir da equação (12), ou através da soma do comprimento equivalente ao comprimento reto do tubo em um comprimento total para uso na equação (12).

II.3.2.4 Características das tubulações

Para o cálculo da perda de carga em tubulações, conforme já mencionado, são necessárias algumas características das tubulações, como a rugosidade, o diâmetro interno e o comprimento reto da tubulação e seus acidentes.

O comprimento reto e os acidentes das tubulações são características que dependem da área em que se deseja instalar as tubulações e da distância entre o ponto de envio e o ponto de recebimento do fluido escoado.

A rugosidade é uma propriedade do material utilizado para a fabricação da tubulação, que pode ser de aço carbono, aço inox, ferro fundido entre outros; e do tempo de uso desta tubulação, como por exemplo, uma tubulação nova de aço carbono apresenta uma rugosidade menor do que uma tubulação com o mesmo

material, porém com alguns anos a mais de uso, isto se dá devido a corrosões e outros fatores que acabam por danificar a parede interna da tubulação.

Com isso, diferentes valores de rugosidade de materiais são encontrados na literatura, sendo alguns deles apresentados na Tabela 5:

Tabela 5. Valores de rugosidade para alguns materiais comuns na engenharia, Macintture et al., 2010.

Material	Rugosidade (mm)
Concreto	0,3-0,8
Ferro Fundido	0,26
Ferro Galvanizado	0,15
Aço comercial	0,046
PVC	0,005
Vidro	0,0015
Polietileno	0,001

A rugosidade dos materiais listados na Tabela 5 é utilizada nos cálculos do fator de atrito da equação de Darcy-Weisbach e em outras equações não apresentadas neste trabalho. A equação de Hazen-Williams apresenta constante C (constante de Hazen-Williams) que é equivalente à rugosidade do material apresentado na tabela, porém adequada para o uso na equação (12).

Para os cálculos de perda de carga, é necessário somente o diâmetro interno da tubulação, que juntamente com a vazão volumétrica, fornece a velocidade do escoamento. Na prática, e conseqüentemente na comercialização de tubulações, as tubulações são fabricadas de acordo com um padrão de diâmetro, denominado diâmetro nominal.

Este diâmetro nominal, juntamente com o termo conhecido como *schedule* fornecem a relação necessária para a obtenção do diâmetro interno da tubulação. Esta relação é encontrada em alguns livros sobre tubulações, Crane et al., 1976, e é apresentada na Tabela 6 a seguir, para alguns diâmetros nominais e internos.

Tabela 6. Diâmetro Nominal x Schedule x Diâmetro Interno. Diâmetros em polegadas.

Diâmetro Nominal	10S	20	40	80
1	1,097	n/a	1,049	0,957
2	2,157	n/a	2,067	1,939
5	5,295	n/a	5,047	4,813
8	8,329	8,125	7,981	7,625
14	13,624	13,376	13,124	12,5
24	23,5	23,25	22,624	21,562

A partir destes dados das tubulações, é possível obter as informações necessárias para o cálculo da perda de carga de um determinado escoamento.

II.3.3 Balanço de Energia aplicado a Tubulações

Para a maioria dos cálculos de tubulações, é normalmente considerado um regime isotérmico de escoamento. Quando os efeitos térmicos são consideráveis deve-se recorrer a uma equação para prever mudanças de temperatura que podem gerar mudanças em propriedades como densidade e viscosidade, mudando assim, o regime de escoamento. O balanço de energia em sua forma geral é representado a seguir, Poling et al., 2008.

$$\frac{d(mU)}{dt} + \Delta \left[\left(H + \frac{1}{2} v^2 + zg \right) \dot{m} \right] = \dot{Q} + \dot{W} \quad (13)$$

em que U é a energia interna, \dot{m} a vazão mássica, H a entalpia, v a velocidade, z a elevação, g a aceleração da gravidade, \dot{Q} a taxa de calor trocada e \dot{W} a taxa de trabalho trocado.

Para o caso de um processo de escoamento em estado estacionário em uma tubulação e com a ausência de trabalho entrando ou saindo do sistema, essa equação se reduz a forma:

$$\Delta \left[\left(H + \frac{1}{2} v^2 + zg \right) \dot{m} \right] = \dot{Q} \quad (14)$$

O balanço de energia escrito dessa forma pode então ser usado junto com a equação da quantidade de movimento para descrever o escoamento em um tubo de forma a encontrar as duas propriedades, pressão e entalpia, que descreverão o sistema através de alguma equação de estado conforme será apresentado na Seção II.4 a seguir.

II.4 Princípios Termodinâmicos

Para a realização de cálculos de perda de carga em tubulações, são necessárias propriedades físicas do fluido a ser escoado, como densidade e viscosidade. Estas propriedades podem ser fornecidas inicialmente, como uma variável de entrada do problema, ou calculadas com o uso de pacotes termodinâmicos.

Durante o escoamento de um determinado fluido, as propriedades físicas deste podem sofrer alterações devido à queda de pressão e/ou mudanças de temperatura. Caso seja considerado um escoamento isotérmico de um fluido incompressível, estas alterações são desconsideradas, o que gera uma simulação mais simplificada. Entretanto, caso seja desejado uma simulação mais precisa, o uso de um pacote termodinâmico é necessário para o computo de tais propriedades.

Um pacote termodinâmico nada mais é do que um programa que, com o uso de equações de estado, a partir da especificação de algumas propriedades do fluido, como pressão, temperatura e composição, é capaz de fornecer todas as demais propriedades termodinâmicas deste, como densidade, entalpia, entropia, entre outras.

Neste projeto, foi elaborado um pacote termodinâmico simplificado a fim de calcular as propriedades físicas de alguns fluidos durante o escoamento, para diminuir as simplificações utilizadas e melhorar os cálculos do escoamento. Algumas características implementadas no pacote termodinâmico são apresentadas a seguir.

II.4.1 Regra de fases

O estado de um fluido puro é determinado sempre que duas propriedades termodinâmicas intensivas são fixadas. Por outro lado, se duas fases estão em equilíbrio, o sistema é definido quando somente uma propriedade é especificada. Em um sistema multifásico em equilíbrio, o número de variáveis independentes que devem ser especificadas para estabelecer o seu estado intensivo é dado pela regra das fases, Smith et al., 2007:

$$F = 2 - \pi + N \quad (15)$$

em que π é o número de fases, N o número de espécies químicas e F é o grau de liberdade do sistema.

Para substâncias puras, N é igual a 1 e a equação se reduz a:

$$F = 3 - \pi$$

Vemos então, que para uma fase homogênea ($\pi = 1$), a regra das fases nos manda estabelecer duas variáveis para especificar o sistema. Essas variáveis devem ser quaisquer propriedades intensivas como, por exemplo: pressão, temperatura, entalpia ou energia interna.

II.4.2 Propriedades termodinâmicas

A regra das fases mostra que um número de propriedades intensivas são suficientes para especificar todas as outras propriedades intensivas. Entretanto, esta regra não informa como que os valores dessas propriedades serão calculados.

Esses valores são essenciais para diversos cálculos industriais. A seguir serão mostradas as relações fundamentais entre essas propriedades.

A combinação da primeira e da segunda lei da termodinâmica fornece:

$$dU = TdS - PdV$$

em que U é a energia interna, T a temperatura, S a entropia, P a pressão e V o volume.

Apesar de esta fórmula ter sido desenvolvida para o caso particular de um processo reversível, suas propriedades são todas relativas ao sistema e, portanto, não dependem do processo, mas sim do seu próprio estado. As únicas exigências são que o sistema seja fechado e que uma mudança ocorra entre estados em equilíbrio.

Por conveniência três propriedades adicionais são definidas. São elas entalpia, energia de Gibbs e energia de Helmholtz, Smith et al., 2007:

$$H \stackrel{\text{def}}{=} U + PV \qquad A \stackrel{\text{def}}{=} U - TS \qquad G \stackrel{\text{def}}{=} H - TS \qquad (16)$$

em que H é a entalpia, A a energia de Helmholtz e G a energia de Gibbs.

E na forma diferencial essas equações se tornam, Smith et al., 2007:

$$\begin{aligned} dU &= TdS - PdV \\ dH &= TdS + VdP \\ dA &= -PdV - SdT \\ dG &= VdP - SdT \end{aligned} \qquad (17)$$

Essas são as relações fundamentais entre as propriedades de um fluido homogêneo com composição constante.

Nos cálculos de engenharia é mais comum termos disponíveis os dados de pressão e temperatura de forma a calcular as demais propriedades termodinâmicas. Podemos também escrever as propriedades como função da temperatura e da pressão manipulando as equações gerais (17) e usando as relações de Maxwell não apresentadas aqui. Ao serem dados uma pressão e uma temperatura, podemos ter o volume calculado por alguma equação de estado ou outro método e depois de obtidas somente mais duas propriedades, as demais são calculadas diretamente

pelas equações de definição (16). Nas equações a seguir estão desenvolvidas duas dessas propriedades, a entalpia e a entropia, Smith et al., 2007:

$$dH = C_p \cdot dT + \left[V - T \left(\frac{dV}{dT} \right)_P \right] \cdot dP \quad (18)$$

$$dS = C_p \cdot \frac{dT}{T} - \left(\frac{dV}{dT} \right)_P \cdot dP \quad (19)$$

em que C_p é capacidade calorífica a pressão constante.

Valores de C_p são normalmente retirados por alguma relação empírica, como por exemplo a equação (26) mostrada adiante.

Para avaliar o termo $(dV/dT)_P$ é necessário conhecer a relação entre o volume e a temperatura. Essa relação é retirada de, por exemplo, uma equação de estado. A seguir será mostrado como é possível determinar as propriedades de um gás ideal e de um fluido real através de equações de estado cúbicas.

II.4.2.1 Propriedades de gases ideais

Quando aplicada para gases ideais, as equações (17) são avaliadas a partir da equação dos gases ideais, Smith et al., 2007:

$$PV^{gi} = RT \quad (20)$$

E dessa forma:

$$\left(\frac{dV^{gi}}{dT} \right)_P = \frac{R}{P} \quad (21)$$

em que R é a constante universal dos gases perfeitos e o subscrito gi indica o valor de gás ideal.

Substituindo essas equações nas equações (18) e (19), elas fornecem, Smith et al., 2007:

$$dH^{gi} = C_p^{gi} \cdot dT \quad (22)$$

$$dS^{gi} = C_p^{gi} \cdot \frac{dT}{T} - R \cdot \frac{dP}{P} \quad (23)$$

Essas equações podem ser integradas, fornecendo, Smith et al., 2007:

$$H^{gi} = H_0^{gi} + \int_{T_0}^T C_P^{gi} dT \quad (24)$$

$$S^{gi} = S_0^{gi} + \int_{T_0}^T C_P^{gi} \frac{dT}{T} - R \ln \frac{P}{P_0} \quad (25)$$

em que P_0 e T_0 são a pressão e temperatura em um estado de referência e H_0^{gi} e S_0^{gi} são a entalpia e a entropia nesse estado de referência.

Os cálculos termodinâmicos requerem somente diferenças de entalpia e de entropia. Dessa forma, as condições do estado de referência P_0 e T_0 são escolhidos convenientemente e os valores de H_0^{gi} e S_0^{gi} são escolhidos arbitrariamente. Neste trabalho foi utilizado $P_0 = 1\text{bar}$, $T_0 = 300\text{K}$ e $H_0^{gi} = S_0^{gi} = 0$.

A avaliação da integral das equações (24) e (25) requer o conhecimento da dependência de C_P^{gi} com a temperatura. Essa dependência é normalmente fornecida por uma equação empírica. A equação utilizada nesse trabalho foi a seguinte, Smith et al., 2007.

$$\frac{C_P^{gi}}{R} = A + BT + CT^2 + DT^{-2} \quad (26)$$

em que A, B, C e D são constantes tabeladas para cada substância.

A vantagem do uso dessa equação é que ela torna fácil a integração analítica das equações (24) e (25).

II.4.2.2 Propriedades residuais

O cálculo das propriedades de um gás real através de equações de estado cúbicas se torna mais fácil quando é introduzido o conceito de propriedades residuais aqui apresentado.

A definição de propriedade residual é dada como a diferença do valor real de uma propriedade termodinâmica comparada com o valor desta mesma propriedade caso o fluido seja considerado como gás ideal:

$$M^R \stackrel{\text{def}}{=} M - M^{gi}$$

Esta abordagem dada para a obtenção das propriedades termodinâmicas reais se torna extremamente útil na termodinâmica em função da possibilidade de se obter funções de propriedades residuais, como entalpia e entropia residual, com o uso das equações de estado.

É possível encontrar o valor de qualquer propriedade de um fluido sabendo o valor de sua propriedade residual e o valor da sua propriedade ao ser considerado o fluido como gás ideal. De fato, após obtermos diretamente da equação de estado o volume molar para uma dada temperatura e pressão, somente é necessário conhecer a entalpia e a entropia, pois as outras propriedades são obtidas através das equações de definição (16).

A avaliação analítica da entalpia e da entropia residual gera, após alguma manipulação algébrica, as seguintes equações, Smith et al., 2007:

$$\frac{H^R}{RT} = -T \int_0^P \left(\frac{dZ}{dT} \right)_P \frac{dP}{P} \quad (27)$$

$$\frac{S^R}{R} = -T \int_0^P \left(\frac{dZ}{dT} \right)_P \frac{dP}{P} - \int_0^P (Z - 1) \frac{dP}{P} \quad (28)$$

O cálculo da entalpia e da entropia residual está apresentado a seguir para o uso nas equações de estado cúbicas.

II.4.3 Equações de Estado Cúbicas para substâncias puras

As equações de estado são amplamente utilizadas para estimar pressão, volume, número de moles e temperatura de fluidos, tanto para compostos puros, quanto para misturas. As equações de estado são equações semi-empíricas formuladas pela coleta de dados experimentais e pelo cálculo de coeficientes em

uma equação proposta tendo como exemplo mais simples a própria equação dos gases ideais (que é uma equação não cúbica). A eficiência de uma equação de estado está intrinsecamente ligada à representação dos dados experimentais para as propriedades P-V-T.

As equações de estado cúbicas têm a vantagem de conseguir representar o comportamento tanto de líquidos quanto de vapores por abrangerem uma larga faixa de temperatura e pressão. Além disso, por sua simplicidade, elas evitam possíveis dificuldades em resoluções numéricas.

A seguir são apresentadas quatro equações de estado: van der Waals, Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson. Essas equações apresentam a vantagem de poderem ser expressas através de uma forma genérica para substâncias puras, conforme apresentado a seguir, Smith et al., 2007:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{(V + \epsilon b)(V + \sigma b)} \quad (29)$$

sendo

$$a(T) = \Psi \frac{\alpha(T_r) R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$b = \Omega \frac{RT_c}{P_c}$$

em que P_c e T_c são a pressão e a temperatura crítica. Essas são as duas únicas informações necessárias do fluido para resolver as equações de van der Waals e Redlich-Kwong. No caso das equações de Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson ainda é exigida uma terceira propriedade, o fator acêntrico (ω), apresentado na Tabela 7.

Os parâmetros ϵ , σ , Ψ , Ω , $\alpha(T_r)$ são valores que dependem da equação de estado que se está utilizando sendo estes também apresentados na Tabela 7.

Tabela 7. Parâmetros para equações de estado cúbicas (29), Smith et al., 2007.

Equação de Estado	$\alpha(T_r)$	σ	ϵ	Ω	ψ
van der Waals	1	0	0	1/8	27/64
Redlich-Kwong	$T_r^{-1/2}$	1	0	0,08664	0,42748
Soave-Redlich-Kwong	$\alpha_{SRK}(T_r, \omega)$	1	0	0,08664	0,42748
Peng-Robinson	$\alpha_{PR}(T_r, \omega)$	$1 + \sqrt{2}$	$1 - \sqrt{2}$	0,07780	0,45724

$\alpha_{SRK}(T_r, \omega) = [1 + (0,4 + 1,574\omega - 0,176\omega^2)(1 - T_r^2)]^2$
 $\alpha_{PR}(T_r, \omega) = [1 + (0,37464 + 1,54226\omega - 0,26 \omega^2)(1 - T_r^2)]^2$
 ω é o fator acêntrico

A utilidade das equações de estado cúbicas vai além de somente obter dados reais de PVT de um fluido. Através das propriedades residuais e das relações termodinâmicas é possível encontrar as demais propriedades do fluido especificando-o completamente.

O cálculo da entalpia e da entropia residual vem das equações (27) e (28) que para a forma das equações de estado apresentadas se torna, Smith et al., 2007:

$$\frac{H^R}{RT} = Z - 1 + \left[\frac{d \ln \alpha(T_r)}{d \ln(T_r)} - 1 \right] qI \quad (30)$$

$$\frac{S^R}{R} = \ln(Z - \beta) + \frac{d \ln \alpha(T_r)}{d \ln(T_r)} qI \quad (31)$$

sendo

$$\beta = \frac{bP}{RT}$$

$$q = \frac{a(T)}{bRT}$$

$$I = \begin{cases} \frac{1}{\sigma - \epsilon} \ln \left(\frac{Z + \sigma\beta}{Z + \epsilon\beta} \right), & \text{se } \epsilon \neq \sigma \\ \frac{\beta}{Z + \epsilon\beta}, & \text{se } \epsilon = \sigma \end{cases}$$

em que os parâmetros ε , σ , $\alpha(T_r)$ são os mesmos dados pela Tabela 7 e $a(T)$ e b são os mesmos definidos para a equação (29).

Com as equações (29) e (30), juntamente com as propriedades de gás ideal calculadas pelas equações (24) e (25) e com as relações termodinâmicas fundamentais dadas pelas equações (16) é possível especificar todos os dados termodinâmicos de um fluido.

II.4.3.1 Pressão de vapor por equações de estado cúbicas

Outra propriedade importante que é possível retirar das equações de estado é a pressão de vapor de uma substância pura a uma dada temperatura.

Para que haja equilíbrio líquido-vapor é necessário que a haja igualdade das fugacidades das fases. Escrevendo a fugacidade de ambas as fases através do coeficiente de fugacidade, essa relação fica, Smith et al., 2007:

$$y_i \cdot P \cdot \widehat{\phi}_i^v = x_i \cdot P \cdot \widehat{\phi}_i^l \quad (32)$$

Para o caso de uma substância pura, a fração molar da substância nas duas fases é igual a um, e eliminando a pressão dos dois lados da expressão encontramos que no equilíbrio líquido-vapor deve haver igualdade dos coeficientes de fugacidade de cada fase. Além disso, é possível mostrar a seguinte relação entre o coeficiente de fugacidade e a energia de Gibbs residual, Smith et al., 2007:

$$G_i^R = RT \ln(\phi_i) \quad (33)$$

Dados uma pressão e uma temperatura, a energia de Gibbs residual pode ser calculada para cada fase através do cálculo dos volumes molares de cada fase através da equação (29), obtendo a entalpia e a entropia residuais de cada fase pelas equações (30) e (31) e chegando à energia de Gibbs residual de cada fase através da equação (16). Deve-se então implementar um método numérico de busca de forma a encontrar qual pressão gera igualdade das energias de Gibbs residual. Essa pressão é a pressão de vapor para a temperatura dada.

II.5 Métodos Numéricos

Para elaboração de softwares de engenharia e programação para resolução de problemas matemáticos é de extrema necessidade o conhecimento de algumas técnicas numéricas para a resolução de determinadas equações. A seguir são apresentadas algumas destas técnicas demandadas neste trabalho.

II.5.1 Newton-Raphson

O método de Newton-Raphson é um método indireto de solução de equações não lineares do tipo $f(x) = 0$. O método requer uma estimativa inicial para o valor de x e um processo iterativo é aplicado diretamente sobre a equação que se quer determinar a raiz, na forma, Secchi et al., 2012:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)} \quad (34)$$

em que x^k e x^{k+1} representa o valor da variável de busca na iteração k e $k+1$ respectivamente, $f(x^k)$ o valor da função com o x da iteração k e $f'(x^k)$ o valor da derivada da função com o x da iteração k .

Dada uma estimativa inicial, a função é linearizada em torno dessa estimativa e o próximo ponto é encontrado de modo a satisfazer esta função linearizada. O método segue resolvendo a equação de forma iterativa até que a raiz seja encontrada com uma precisão desejada, obtendo uma diferença entre o valor de x^k e de x^{k+1} suficientemente pequena, ou até quando um número máximo de iterações, previamente determinado, é atingido.

Um inconveniente do método de Newton-Raphson é a necessidade de obter a derivada da função que se deseja obter a raiz. Neste método, ela pode ser obtida de forma analítica, que dependendo da equação pode demandar um grande esforço, ou de forma numérica, via perturbação.

Outro problema do método é quanto a sua convergência, que é totalmente influenciada pela estimativa inicial, que, se não for suficientemente próxima à

solução do problema, pode fazer com que as iterações não converjam ou converjam para uma solução que não é a desejada.

Neste trabalho o método de Newton-Raphson é utilizado para a resolução numérica de algumas equações, como por exemplo, na resolução da equação de Colebrook para o fator de atrito apresentada na Seção II.3.2.2.4, equação (10).

II.5.2 Método da Secante

O Método da Secante é um método com a mesma finalidade do método de Newton-Raphson, porém, não necessita da obtenção da derivada analítica, pois ela é aproximada por diferenças finitas. São necessárias duas boas estimativas iniciais para ser possível o cálculo aproximado da derivada, sendo comum, a partir de uma estimativa inicial, usar como segunda estimativa um valor bem próximo da primeira.

A definição do próximo valor a ser calculado durante o laço de convergência é representada como, Secchi et al., 2012:

$$x^{k+1} = x^k - f(x^k) \frac{x^k - x^{k-1}}{f(x^k) - f(x^{k-1})} \quad (35)$$

Assim como o método de Newton-Raphson, este é um método iterativo que atinge sua convergência quando o desvio entre duas iterações atinge um valor mínimo determinado inicialmente, apresentando os mesmos problemas de convergência já descritos.

II.5.3 Método da Seção Áurea

O método da Seção Áurea é um método direto de otimização monovariável do tipo $\min[f(x)]$. Ele se baseia em uma busca dentro de um intervalo dado de valores da variável. Para a sua execução é necessário fornecer dois limites onde se acredita estar o mínimo da função. Durante a busca desse método, a cada iteração

o intervalo de busca é reduzido por um fator α chamado razão áurea. Esse valor está apresentado a seguir, Secchi et al., 2012:

$$\alpha = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2}$$

O método continua reduzindo o intervalo de busca até que ele se torne menor do que uma tolerância estabelecida.

Nesse trabalho o método da seção áurea foi usado para o cálculo da pressão de vapor de uma substância pura através de equações de estado conforme mostrado na Seção III.1.2.2.2.

II.5.4 Função de Regularização

Funções de regularização são usadas para unir duas funções distintas de uma mesma variável, quando se deseja utilizar uma equação para um intervalo da variável e outra para outro intervalo, de forma a gerar uma função contínua em todo o intervalo da variável. Tal função elimina possíveis problemas numéricos em métodos que utilizem a derivada da função e requerem continuidade da mesma.

Diversas funções podem ser utilizadas como função de regularização. Neste trabalho foi utilizada para unir os diferentes modelos de fator de atrito em função do número de Reynolds, apresentados na Seção II.3.2, a função tangente hiperbólica para tornar contínua a união dessas três funções.

A seguir é apresentado um exemplo de como a função pode ser aplicada, utilizando como funções a serem unidas duas funções genéricas, $g(x)$ e $h(x)$, sendo a função a ser regularizada a função $f(x)$:

$$f(x) = \begin{cases} g(x), & \text{para } x \leq x^* \\ h(x), & \text{para } x > x^* \end{cases} \quad (36)$$

A função $f(x)$, descontínua, se torna a função $F(x)$ contínua fazendo:

$$F(x) = \eta(x)g(x) + (1 - \eta(x))h(x) \quad (37)$$

em que

$$\eta(x) = \frac{1 + \tanh\left(\frac{x-x^*}{\varepsilon}\right)}{2} \quad (38)$$

O parâmetro ε deve ser escolhido convenientemente de forma que a troca se torne mais ou menos brusca. Altos valores de ε geram uma troca suave, enquanto baixos valores tornam a troca mais brusca.

II.5.5 Equação de terceiro grau

É possível encontrar analiticamente as raízes de uma equação de terceiro grau do tipo:

$$ax^3 + bx^2 + cx + d = 0 \quad (39)$$

Primeiramente essa equação é reduzida para uma equação cúbica sem o termo quadrado, substituindo $x = t - b/(3a)$, fornecendo:

$$\begin{aligned} t^3 + pt + q &= 0 \\ t &= x + \frac{b}{3a} \\ p &= \frac{3ac - b^2}{3a^2} \\ q &= \frac{2b^3 - 9abc + 27a^2d}{27a^3} \end{aligned} \quad (40)$$

A natureza da equação é obtida pela constante h :

$$h = \frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}$$

- $h < 0$, três raízes reais e distintas

Nesse caso, a solução pode ser retirada pelo método trigonométrico de Francois Viète, Nickalls et al., 1993:

$$t_k = 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{3q}{2p}\sqrt{\frac{-3}{p}}\right) - k\frac{2\pi}{3}\right) \text{ para } k = 0, 1, 2 \quad (41)$$

$$x_k = t_k - \frac{b}{3a} \text{ para } k = 0, 1, 2$$

- $h \geq 0$, uma raiz real e duas imaginárias ou três raízes reais e iguais

Caso h seja maior que zero a raiz real pode ser calculada pelo método de Cardano, Nickalls et al., 1993. Da mesma forma podem ser obtidas as três raízes iguais caso h seja igual a zero.

$$t = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{h}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{h}} \quad (42)$$

$$x = t - \frac{b}{3a}$$

Esse método é usado no programa para encontrar as raízes das equações de estado cúbicas e para o uso no método de resolução de uma equação de quarto grau como mostrado na Seção II.5.6. Esses dois usos não requerem as raízes imaginárias de uma equação cúbica, por essa razão elas não foram contempladas aqui.

II.5.6 Equação de quarto grau

É possível encontrar analiticamente as raízes de uma equação de quarto grau. Aqui é apresentado o método de Lodovico Ferrari, Neumark et al., 1965, de solução de uma equação do tipo:

$$ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx + e = 0 \quad (43)$$

O primeiro passo do método é reduzir a equação quártica genérica para uma equação quártica que não possui o termo cúbico através de uma mudança de variável. A solução é apresentada a seguir:

$$u^4 + \alpha u^2 + \beta u + \gamma = 0 \quad (44)$$

em que

$$\begin{aligned}u &= x + \frac{b}{4a} & (45) \\ \alpha &= \frac{-3b^2}{8a^2} + \frac{c}{a} \\ \beta &= \frac{b^3}{8a^3} - \frac{bc}{2a^2} + \frac{d}{a} \\ \gamma &= \frac{-3b^4}{2a^4} + \frac{cb^2}{16a^3} - \frac{bd}{4a^2} + \frac{e}{a}\end{aligned}$$

Caso o valor de β seja igual a zero, essa equação, chamada equação biquadrática, é facilmente resolvida de maneira semelhante à solução de uma equação quadrática. As quatro raízes de x são encontradas pela equação a seguir.

$$x = -\frac{b}{4a} \pm \sqrt{\frac{-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 4\gamma}}{2}} \quad (46)$$

Caso β não seja igual a zero, o método segue agora criando a equação cúbica a seguir.

$$y^3 + \frac{5\alpha}{2}y^2 + (2\alpha^2 - \gamma)y + \left(\frac{\alpha^3}{2} - \frac{\alpha\gamma}{2} - \frac{\beta^2}{8}\right) = 0 \quad (47)$$

Essa equação é resolvida pelo método descrito na Seção II.5.5. Ao encontrar as raízes, o método de Ferrari permite que qualquer raiz real seja selecionada, de forma a ser usada para avaliar os valores de u nas equações a seguir.

$$\begin{aligned}u^2 + (\sqrt{\alpha + 2y})u + \left(\alpha + y - \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha + 2y}}\right) &= 0 \\ u^2 - (\sqrt{\alpha + 2y})u + \left(\alpha + y + \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha + 2y}}\right) &= 0\end{aligned} \quad (48)$$

Essas equações são quadráticas e podem ser resolvidas pela fórmula de Bhaskara. No total são encontrados 4 valores para u , podendo ser esses reais ou imaginários. Os valores de x são encontrados invertendo a relação já estabelecida e aqui reescrita.

$$x = u - \frac{b}{4a} \quad (49)$$

A solução de uma equação de quarto grau é necessária nesse programa para encontrar a pressão de vapor de uma equação de estado cúbica como será mostrado na Seção III.1.2.2.2.

CAPÍTULO III - METODOLOGIA

III.1 Implementação

O programa aqui apresentado foi desenvolvido em classes e grupos de classes em linguagem Java. Sua estruturação contemplou tanto o lado da engenharia como o lado de desenvolvimento de software, sendo o principal foco desse trabalho a engenharia.

Segue uma breve explicação sobre o visual e o funcionamento do software desenvolvido.

III.1.1 Estrutura do Programa

Ao iniciar o programa, o usuário encontra a seguinte tela:

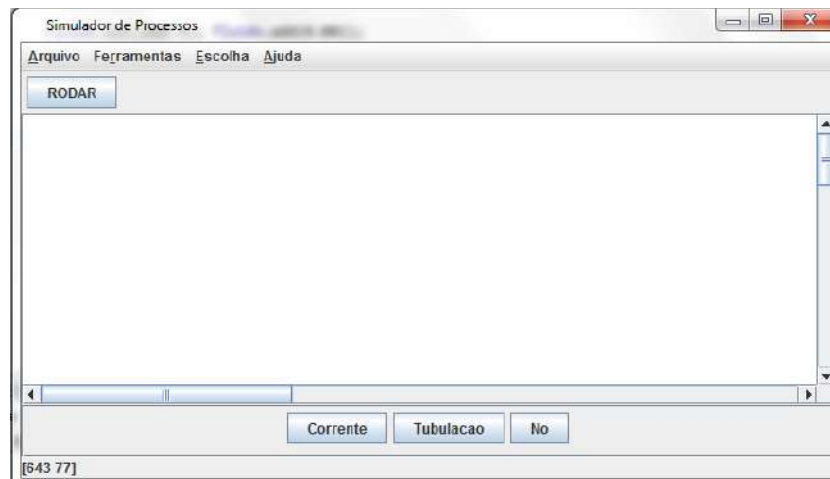


Figura 2. Janela do menu principal.

O sub-menu “Arquivo” contém as opções “Salvar” e “Abrir” que salva os dados inseridos e recupera arquivos já salvos respectivamente e a opção “Sair” que sai do programa.

O sub-menu “Ferramentas” contém a opção “Conversores”. Esta opção abre uma janela onde o usuário pode fazer cálculos de conversões de unidades. As classes implementadas para converter unidades nessa janela são as mesmas usadas para inserção de dados nos equipamentos, como será visto a seguir. A Figura 3 mostra um exemplo da janela de Conversores.

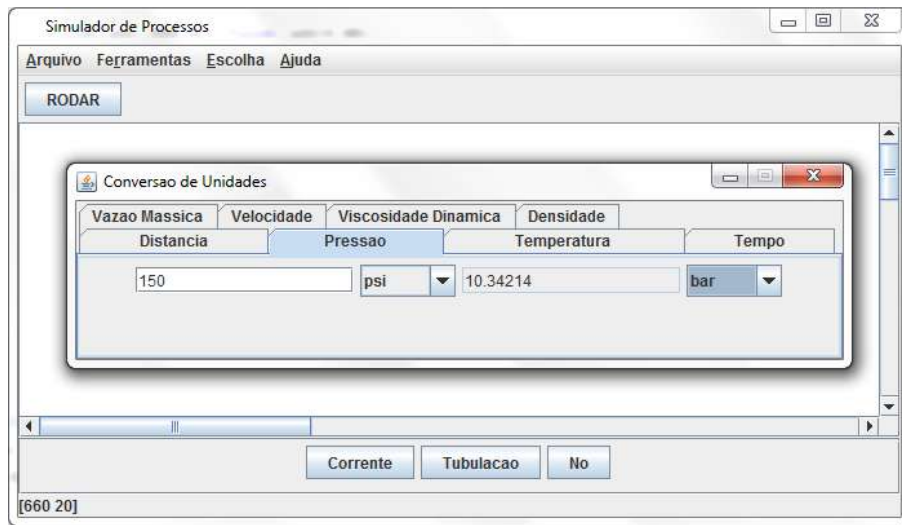


Figura 3. Janela de conversão de unidades.

O sub-menu “Escolha” contém as opções “Líquido”, “Gás Ideal” e “Escolher Fluido + E.E”. O usuário deve escolher uma dessas três opções. O padrão do programa é “Líquido”. Essa opção abre uma janela onde o usuário deve entrar com dados de densidade e viscosidade do fluido. Esses dados serão utilizados para realizar todos os seus cálculos de perda de carga em tubulações considerando que a densidade não varia. Esse caso é muito comum em cálculos de perda de carga para líquidos, uma vez que a densidade de líquidos varia pouco com a pressão.

A opção “Gás Ideal” abre uma janela onde o usuário deve inserir valores de viscosidade e densidade em uma pressão de referencia. Nesse caso, quando necessário, o programa realiza a correção da massa específica a partir da seguinte relação proveniente da lei dos gases ideais:

$$\rho = \rho_{ref} \frac{P}{P_{ref}} \quad (50)$$

A opção “Escolher Fluido + E.E” abre uma janela onde o usuário deve escolher o fluido que está sendo considerado e a equação de estado cúbica que se deseja utilizar. As opções para fluido disponíveis atualmente são: Água, Etano, n-Butano e n-Hexano. As opções de Equação de Estado são: van der Waals, Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson. Caso essa escolha seja feita, o usuário não deverá inserir a pressão e a densidade, mas sim a pressão e a temperatura e as demais propriedades, incluindo a densidade, serão calculadas pela equação de estado selecionada.

O sub-menu “Ajuda” contém a opção “Sobre” com informações sobre o programa.

O botão “RODAR”, ao ser clicado irá realizar os cálculos do simulador. Esse botão deve ser clicado após a elaboração da rede a ser calculada e inserção de todos os dados necessários ao cálculo.

Na parte inferior encontra-se uma área em que podem ser expostos diversos botões. Ao serem clicados, esses botões inserem o equipamento desejado na tela branca principal. Neste trabalho foram criados os seguintes objetos: Corrente, Tubulação e Nó. As Correntes são objetos onde é possível inserir dados de entrada ou verificar dados de saída calculados pelo programa. Nas Tubulações é possível acrescentar tubos com comprimento, diâmetro, elevação e outras funções desejadas. Os Nós fazem cálculos de misturadores e separadores, podendo ter quantas entradas e quantas saídas forem necessárias. Todos esses objetos serão mais bem descritos em seguida.

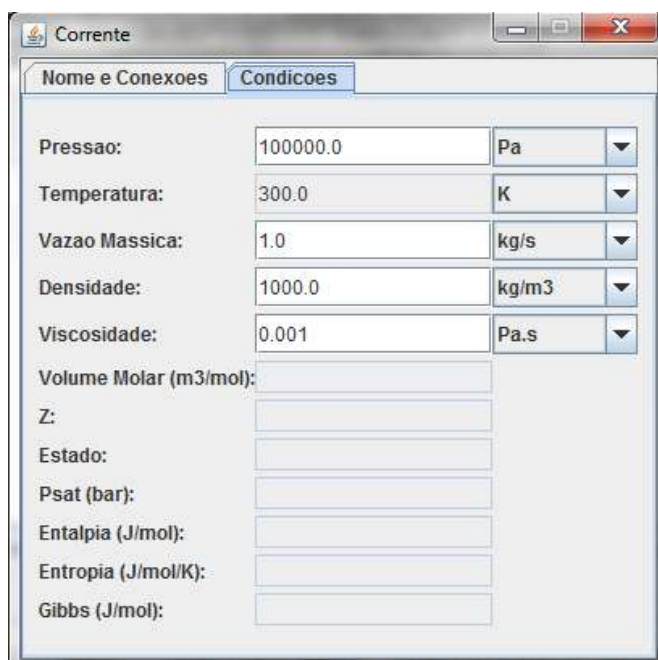
III.1.2 Estrutura da classe Corrente

Ao adicionar uma Corrente ao programa, uma figura de uma seta irá aparecer na tela que, ao ser clicada, abre uma janela para inserção de dados, caso esta seja uma corrente de entrada, ou para a leitura dos dados gerados pelo programa, caso esta seja uma corrente de saída. Esta janela possui duas abas. Na primeira o usuário pode trocar o nome dado ao objeto e fazer ligações entre este e outros objetos

inseridos no fluxograma para montar o seu processo. Na segunda aba, o usuário pode inserir dados do fluido. Os dados que deverão ser inseridos dependem da escolha do usuário de inserir a densidade através da escolha “Líquido” ou “Gás Ideal” ou calcular os dados a partir de equações de estado.

III.1.2.1 Corrente com densidade especificada

Escolhendo “Líquido” ou “Gás Ideal” o usuário deverá inserir a pressão e vazão mássica conforme mostra a Figura 4.



Nome e Conexões	Condições
Pressão:	100000.0 Pa
Temperatura:	300.0 K
Vazão Massica:	1.0 kg/s
Densidade:	1000.0 kg/m ³
Viscosidade:	0.001 Pa.s
Volume Molar (m ³ /mol):	
Z:	
Estado:	
Psat (bar):	
Entalpia (J/mol):	
Entropia (J/mol/K):	
Gibbs (J/mol):	

Figura 4. Janela de inserção de dados. Densidade especificada.

Os dados de densidade e viscosidade são somente informados como lembrete ao usuário, e não podem ser alterados nesse caso, pois já foram especificados anteriormente pelo usuário.

Os dados de temperatura, volume molar e outros, apesar de mostrados, não são calculados e não influenciam nos cálculos. Esses valores são somente calculados e levados em consideração quando o usuário opta por um pacote termodinâmico.

Durante os cálculos, o modelo de Corrente, funciona somente como um transportador de dados. Sua estrutura consiste em dizer que todos os dados que

foram recebidos em sua entrada deverão estar disponíveis em sua saída para que possa ser passado para outro objeto.

III.1.2.2 Corrente com Equação de Estado

Escolhendo calcular as propriedades a partir de uma equação de estado, a janela da Corrente permitirá a inserção da temperatura, pressão e vazão mássica, e a densidade será calculada pela equação de estado, assim como as seguintes propriedades: volume molar, fator de compressibilidade, estado físico, pressão de vapor (a temperatura especificada), entalpia, entropia e energia de gibbs.

Atualmente, o programa não apresenta nenhum método de previsão de viscosidade. Por isso, mesmo que o usuário tenha escolhido calcular as propriedades por equação de estado, ele ainda deverá inserir o valor da viscosidade no local apropriado.

Na Figura 5 é apresentado um exemplo dessa janela.

The screenshot shows a window titled 'Corrente' with two tabs: 'Nome e Conexoes' and 'Condicoes'. The 'Condicoes' tab is active and displays a list of properties with their corresponding values and units. The input properties are Pressure, Temperature, Mass Flow, and Viscosity. The output properties are Density, Molar Volume, Z-factor, State, Vapor Pressure, Enthalpy, Entropy, and Gibbs Energy.

Property	Value	Unit
Pressao:	100000.0	Pa
Temperatura:	300.0	K
Vazao Massica:	1.0	kg/s
Densidade:	2.3905123862648643	kg/m ³
Viscosidade:	0.001	Pa.s
Volume Molar (m ³ /mol):	0.02426258083131041	
Z:	0.9727048144211847	
Estado:	Gasoso	
Psat (bar):	2.6041438901625216	
Entalpia (J/mol):	-181.99570700605938	
Entropia (J/mol/K):	-0.38207432107443395	
Gibbs (J/mol):	-67.37341068372919	

Figura 5. Janela de inserção de dados. N-butano por Peng-Robinson.

A validade dos resultados obtidos por essa janela foram avaliadas para as quatro substâncias apresentadas e comparadas a dados obtidos no HySys e no EMSO.

III.1.2.2.1 Análise da Densidade

A densidade foi avaliada em diferentes temperaturas e pressões. Foi comparada a equação de Peng-Robinson com a mesma equação calculada pelo HySys e pelo EMSO. Os resultados estão representados na Tabela 8, Tabela 9 e Tabela 10.

Tabela 8. Comparação de densidade a 300K e 1bar por Peng-Robinson. Valores em kg/m³.

	Programa	HySys	desvio	EMSO	desvio
Água	847.6	848.1	-0.0584%	847.4	0.0253%
Etano	1.215	1.216	-0.0036%	1.216	-0.0027%
n-Butano	2.396	2.396	-0.0073%	2.396	-0.0010%
n-Hexano	660.0	661.2	-0.1850%	659.8	0.0228%

Tabela 9. Comparação de densidade a 300K e 10bar por Peng-Robinson. Valores em kg/m³.

	Programa	HySys	desvio	EMSO	desvio
Água	847.7	848.2	-0.0589%	847.5	0.0254%
Etano	13.18	13.18	0.0091%	13.18	-0.0018%
n-Butano	601.3	601.5	-0.0373%	601.2	0.0143%
n-Hexano	661.2	662.4	-0.1843%	661.1	0.0221%

Tabela 10. Comparação de densidade a 500K e 10bar por Peng-Robinson. Valores em kg/m³.

	Programa	HySys	desvio	EMSO	desvio
Água	4.509	4.510	-0.0141%	4.509	-0.0025%
Etano	7.346	7.346	-0.0056%	7.346	-0.0036%
n-Butano	14.88	14.88	-0.0066%	14.88	-0.0055%
n-Hexano	24.16	24.16	-0.0013%	24.16	-0.0015%

A seguir, na Tabela 11, Tabela 12 e Tabela 13, foi feita uma comparação entre as quatro equações de estado aqui apresentadas para comparar o resultado obtido para a densidade à mesma temperatura e pressão. Entre parênteses está o valor do desvio, tomada a equação de Peng-Robinson como referência. É importante notar de que a equação de Peng-Robinson está sendo tomada como referência de forma arbitrária, não significando que ela gerará sempre resultados mais satisfatórios do que as demais.z

Tabela 11. Comparação de densidade a 300K e 1bar. Valores em kg/m³.

	Soave-Redlich-			
	van der Waals	Redlich-Kwong	Kwong	Peng-Robinson
Água	0.7279 (99.91%)	734.9 (13.30%)	754.7 (10.96%)	847.6 (0%)
Etano	1.213 (0.1838%)	1.214 (0.0831%)	1.214 (0.081%)	1.215 (0%)
n-Butano	2.373 (0.9551%)	2.388 (0.3239%)	2.392 (0.1355%)	2.396 (0%)
n-Hexano	3.577 (99.46%)	564.5 (14.46%)	585.1 (11.34%)	660.0 (0%)

Tabela 12. Comparação de densidade a 300K e 10bar. Valores em kg/m³.

	Soave-Redlich-			
	van der Waals	Redlich-Kwong	Kwong	Peng-Robinson
Água	494.2 (41.71%)	735.0 (13.29%)	754.8 (10.95%)	847.7 (0%)
Etano	12.93 (1.949%)	13.07 (0.8756%)	13.07 (0.8494%)	13.18 (0%)
n-Butano	355.4 (40.89%)	515.6 (14.25%)	531.2 (11.66%)	601.3 (0%)
n-Hexano	385.4 (41.72%)	566.5 (14.33%)	586.5 (11.30%)	661.2 (0%)

Tabela 13. Comparação de densidade a 500K e 10bar. Valores em kg/m³.

	Soave-Redlich-			
	van der Waals	Redlich-Kwong	Kwong	Peng-Robinson
Água	4.446 (1.406%)	4.480 (0.6507%)	4.499 (0.2233%)	4.509 (0%)
Etano	7.355 (-0.1306%)	7.339 (0.0854%)	7.314 (0.4377%)	7.346 (0%)
n-Butano	14.79 (0.6536%)	14.83 (0.387%)	14.75 (0.8646%)	14.88 (0%)
n-Hexano	23.35 (3.346%)	23.78 (1.560%)	23.82 (1.420%)	24.16 (0%)

As quatro equações concordam razoavelmente bem entre si para substâncias no estado gasoso. Já para líquidos deve-se ter um bom entendimento de qual equação usar para evitar erros muito grosseiros. Nota-se também que a equação de van Der Waals apresenta um resultado muito diferente para água e hexano a 300K e 1bar. Isso ocorre porque a equação considera que nestas condições essas substâncias já se encontram em um estado gasoso, enquanto as outras três equações consideram um estado líquido. Esta diferença será analisada na próxima seção sobre análise da pressão de vapor.

III.1.2.2.2 Análise da Pressão de Vapor

O cálculo da pressão de vapor no programa é realizado pelas equações de estado e pelas identidades termodinâmicas conforme apresentado na Seção II.4.3.1.

O método numérico usado para encontrar a pressão de vapor é o método da seção áurea. Esse método requer dois valores limites onde se acredita estar o valor da pressão de vapor. Os limites fornecidos pelo programa são as pressões onde as derivadas da curva Pressão x Volume é igual à zero. Esse conceito pode ser melhor entendido pela Figura 6 onde estão mostrados esses pontos.

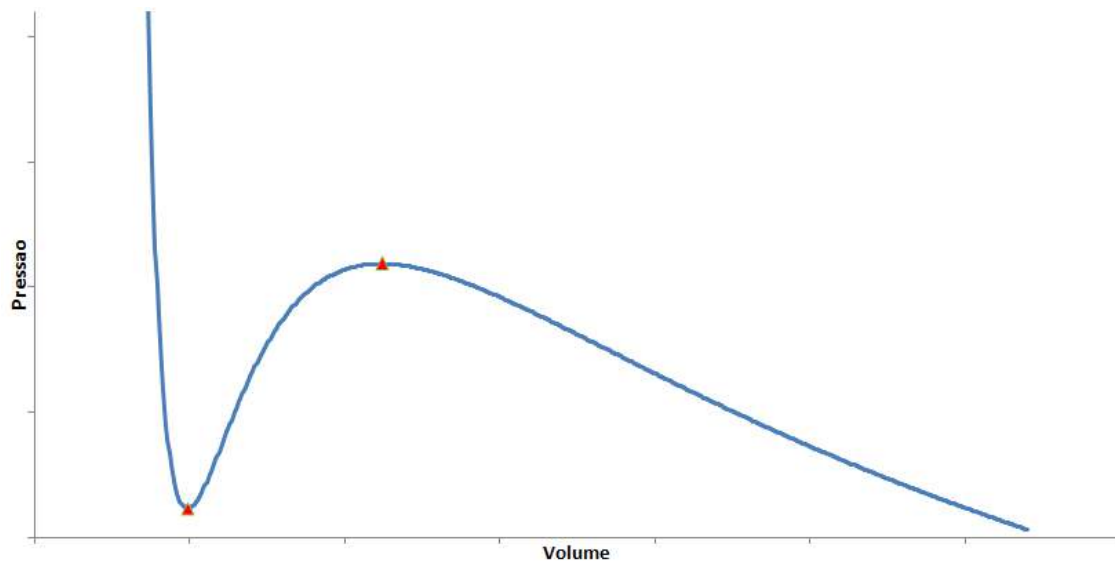


Figura 6. Curva Pressão x Volume de uma equação de estado cúbica.

Para computar esses valores limites foi derivada, analiticamente, a equação (29) de forma a encontrar os valores de pressão em que a derivada é igual a zero. A derivada está apresentada a seguir.

$$\frac{dP}{dV} = \frac{-RT(V + \epsilon b)^2(V + \sigma b)^2 + A(V - b)^2(V + \sigma b)^2 - A(V - b)^2(V + \epsilon b)^2}{(V - b)^2(V + \epsilon b)^2(V + \sigma b)^2} \quad (51)$$

$$A = \frac{a}{(\sigma b - \epsilon b)}$$

Os valores das constantes nessa equação são aquelas estabelecidas pela Tabela 7, os parâmetros a e b são os mesmos estabelecidos para a equação (29), R a constante universal dos gases e T a temperatura onde se deseja conhecer a pressão de vapor.

Para que essa derivada seja zero, é necessário que o numerador seja igual a zero ou o denominador igual a infinito. O denominador é igual a infinito somente quando V é igual a mais ou menos infinito ($\pm\infty$). Esse caso não interessa para esses cálculos.

Para que o numerador seja igual a zero, precisamos resolver uma equação quártica do tipo:

$$aV^4 + bV^3 + cV^2 + dV + e = 0 \quad (52)$$

Nesse caso os coeficientes dessa equação são:

$$a = RT$$

$$b = 2b(\sigma RT + \epsilon RT - \sigma A + \epsilon A)$$

$$c = b^2(\sigma^2 RT + 4\sigma\epsilon RT + \epsilon^2 RT - \sigma^2 A + 4\sigma A + \epsilon^2 A - 4\epsilon A) \quad (53)$$

$$d = 2b^3(\epsilon\sigma^2 RT + \sigma\epsilon^2 RT + \sigma^2 A - \sigma A - \epsilon^2 A + \epsilon A)$$

$$e = b^4(\epsilon^2\sigma^2 RT - \sigma^2 A + \epsilon^2 A)$$

Esses coeficientes são usados no método apresentado na Seção II.5.6 para encontrar as raízes dessa equação.

As raízes que importam para esses cálculos são as duas maiores encontradas. Como visto na Figura 6, a próxima raiz que zera a derivada da pressão

em relação ao volume é infinito ($+\infty$). Raízes menores, se encontradas, não tem significado e são descartadas.

No caso da temperatura fornecida ser maior que a Temperatura Crítica da substância, o programa não realiza esses cálculos, uma vez que não existe mais uma pressão de transição da fase líquida para a fase vapor, já que o fluido está no estado supercrítico.

Com as duas raízes em mãos, elas são usadas como os limites inferior e superior para o método da seção áurea encontrar qual a pressão que iguala as fugacidades das fases, sendo essa a pressão de vapor da substância.

Para o caso particular de cálculos através da equação de van der Waals, a derivada fornecida pela equação (51) não pode ser usada. Ao invés disso a seguinte equação deve ser usada.

$$\frac{dP}{dV} = \frac{2a}{V^3} - \frac{RT}{(V-b)^2} \quad (54)$$

A equação a ser resolvida nesse caso é somente cúbica:

$$RTV^3 - 2aV^2 + 4abV - 2ab^2 = 0 \quad (55)$$

Encontrando os dois limites inferior e superior, o programa segue da mesma forma através do método da seção áurea.

Na Tabela 14, Tabela 15 e Tabela 16 são apresentados os resultados encontrados para a pressão de vapor das substâncias puras e comparado também aos simuladores HySys e EMSO.

Tabela 14. Comparação de pressão de vapor a 300K por Peng-Robinson. Valores em bar.

	Programa	HySys	desvio	EMSO	desvio
Água	0.0299	0.0347	13.9%	0.0301	0.545%
Etano	43.73	43.74	0.0236%	43.73	-0.0015%
n-Butano	2.571	2.562	-0.352%	2.577	0.258%
n-Hexano	0.2195	0.2188	-0.305%	0.2215	0.923%

Tabela 15. Comparação de pressão de vapor a 350K por Peng-Robinson. Valores em bar.

	Programa	HySys	desvio	EMSO	desvio
Água	0.3846	0.4159	7.52%	0.3859	0.337%
Etano	Crítico	Crítico	-	107.7	-
n-Butano	9.464	9.442	-0.227%	9.475	0.121%
n-Hexano	1.290	1.286	-0.264%	1.297	0.542%

Tabela 16. Comparação de pressão de vapor a 400K por Peng-Robinson. Valores em bar.

	Programa	HySys	desvio	EMSO	desvio
Água	2.383	2.460	3.1512%	2.388	0.1992%
Etano	Crítico	Crítico	-	261.6	-
n-Butano	25.16	25.12	-0.1458%	25.17	0.0300%
n-Hexano	4.639	4.628	-0.2344%	4.653	0.2984%

Nota-se uma boa concordância entre os valores calculados pelo programa e o HySys e o EMSO para hidrocarbonetos. Para substâncias polares como a água, o valor calculado pelo HySys apresenta uma pequena diferença.

Assim como para a densidade, foram comparadas todas as quatro equações de estado quanto à pressão de vapor a diferentes temperaturas. Na Tabela 17, Tabela 18 e Tabela 19 são apresentadas estas comparações, e entre parênteses está o valor do desvio, tomada a equação de Peng-Robinson como referência.

Tabela 17. Comparação de pressão de vapor a 300K. Valores em bar.

	Soave-Redlich-			
	van der Waals	Redlich-Kwong	Kwong	Peng-Robinson
Água	3.609 (-11968.1352%)	0.02637 (11.8249%)	0.02637 (11.8249%)	0.02991 (0%)
Etano	45.40 (-3.8086%)	43.82 (-0.1977%)	43.82 (-0.1977%)	43.73 (0%)
n-Butano	7.929 (-208.4221%)	2.581 (-0.3906%)	2.581 (-0.3906%)	2.571 (0%)
n-Hexano	2.407 (-996.9721%)	0.2133 (2.774%)	0.2133 (2.774%)	0.2195 (0%)

Tabela 18. Comparação de pressão de vapor a 350K. Valores em bar.

	van der Waals	Redlich-Kwong	Soave-Redlich-	
			Kwong	Peng-Robinson
Água	10.25 (-2564.6%)	0.3625 (5.75%)	0.3625 (5.75%)	0.3846 (0%)
Etano	Crítico	Crítico	Crítico	Crítico
n-Butano	16.60 (-75.37%)	9.582 (-1.25%)	9.582 (-1.25%)	9.464 (0%)
n-Hexano	5.612 (-335.1%)	1.290 (-0.0866%)	1.290 (-0.0866%)	1.290 (0%)

Tabela 19. Comparação de pressão de vapor a 400K. Valores em bar.

	van der Waals	Redlich-Kwong	Soave-Redlich-	
			Kwong	Peng-Robinson
Água	22.72 (-853.3%)	2.334 (2.058%)	2.334 (2.058%)	2.383 (0%)
Etano	Crítico	Crítico	Crítico	Crítico
n-Butano	29.62 (-17.72%)	25.34 (-0.7253%)	25.34 (-0.7253%)	25.16 (0%)
n-Hexano	10.81 (-133.0%)	4.697 (-1.2463%)	4.697 (-1.2463%)	4.639 (0%)

As equações de Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson apresentam uma boa concordância quanto à pressão de saturação, a não ser por uma pequena diferença para a água. Já a equação de van der Waals apresenta valores muito diferentes para a pressão de saturação e não deve ser usada para tais cálculos. De fato as equações de Redlich-Kwong e Peng-Robinson foram especialmente desenvolvidas para cálculos de Equilíbrio Líquido-Vapor, Smith et al., 2007.

É interessante observar, que como esperado, todas as equações resultam em valores próximos em temperaturas próximas à crítica, uma vez que essas equações foram desenvolvidas de forma a tenderem para o ponto crítico.

III.1.2.2.3 Análise da Variação de Entalpia

A entalpia, necessária aos cálculos de escoamento, tem seu valor calculado através das equações de estado dado um estado de referência. Neste programa o estado de referência escolhido foi o da substância pura a 300K e 1bar e com entalpia igual a 0.

Como o valor da entalpia depende do referencial usado, não é possível sua comparação direta com outros simuladores, porém os valores de variação de entalpia devem ser coerentes e podem ser comparados. Na Tabela 20, Tabela 21 e Tabela 22 são apresentadas as comparações do valor de entalpia de vaporização calculada pelo programa com valores obtidos do Perry's Chemical Engineers' Handbook, Poling et al., 2008.

Tabela 20. Comparação de entalpia de vaporização a 300K por Peng-Robinson. Valores em J/mol.

	Programa	Perry	desvio
Água	44858.1	43777.0	-2.4697%
Etano	3855.5	4565.5	15.5515%
n-Butano	20791.1	20889.7	0.4720%
n-Hexano	31209.8	31430.2	0.7012%

Tabela 21. Comparação de entalpia de vaporização a 350K por Peng-Robinson. Valores em J/mol.

	Programa	Perry	desvio
Água	43248.7	41800.8	-3.46%
Etano	-	-	-
n-Butano	17474.9	17352.4	-0.71%
n-Hexano	28520.4	28227.5	-1.04%

Tabela 22. Comparação de entalpia de vaporização a 400K por Peng-Robinson. Valores em J/mol.

	Programa	Perry	desvio
Água	40684.9	39423.8	-3.20%
Etano	-	-	-
n-Butano	10884.7	11353.9	4.13%
n-Hexano	24912.2	24323.7	-2.42%

Os resultados obtidos com uso da equação de Peng-Robinson apresentam-se coerentes para água e substâncias apolares, como esperado. Além disso observa-se que esses valores são mais próximos à medida que se afasta das condições do ponto crítico. De forma geral esses valores podem ser usados como uma boa estimativa para o valor de variações de entalpia, aproximando-se de forma satisfatória dos valores encontrados na literatura.

III.1.3 Estrutura da classe Tubulação

Ao adicionar uma Tubulação ao programa, uma figura aparece na tela. Ao ser clicada, uma janela é aberta para inserção de dados. Esta janela possui duas abas. Na primeira o usuário pode trocar o nome dado a esse objeto e fazer ligações entre este e outros objetos para montar o seu problema. Na segunda aba o usuário deve inserir os dados de dimensionamento da tubulação, como comprimento, diâmetro interno e elevação. Além disso, o usuário deve escolher qual equação ele deseja usar para perda de carga na tubulação, Darcy ou Hazen-Williams. É importante ressaltar que Hazen-Williams somente deve ser usada para água a temperatura ambiente. O usuário ainda deve informar como deseja fazer o cálculo dos acidentes da tubulação. Através dos coeficientes de perda de carga dos acidentes ou através do fator de complexidade. Um exemplo desta aba está mostrado na Figura 7.

The image shows a software window titled 'Tubulacao' with two tabs: 'Nome e Coenexoes' and 'Detalhes'. The 'Detalhes' tab is active. The window contains the following fields and options:

- Comprimento: 150 m
- Diametro Nominal: D interno in
- Schedule: (empty dropdown)
- Diametro: 3.5 in
- Altura Inicial: 10.2 m
- Altura Final: 25.5 m
- Radio buttons: Darcy, Hazen-Williams
- Rugosidade: 0.046 mm
- Radio buttons: Calculo dos K's, Fator de Complexidade
- FC: 2

Figura 7. Janela de Tubulação / Detalhes.

Os cálculos de uma tubulação são feitos de duas formas dependendo se o usuário escolheu fornecer a densidade de um líquido ou de um gás ideal ou calcular as propriedades através de uma equação de estado.

III.1.3.1 Tubulação com densidade especificada

Nos cálculos a partir da densidade fornecida pelo usuário, o programa começa verificando a escolha do usuário quanto a usar a equação de Darcy ou a de Hazen-Williams.

Para o caso da equação de Hazen-Williams, o programa calcula diretamente a pressão no final da tubulação através da equação (12). Para a escolha do cálculo dos acidentes por fator de complexidade, o comprimento utilizado na equação de Hazen-Williams tem um acréscimo do comprimento equivalente calculado pela equação (5) e para o cálculo dos acidentes pelas constantes de perda (K 's), a perda de pressão tem um acréscimo da equação (4).

Para o caso da equação de Darcy, o programa analisa se o usuário escolheu a opção “Líquido” ou “Gás Ideal”. No caso de “Líquido” o programa faz os cálculos como se o fluido se comportasse como um líquido incompressível, ou seja, considera-se que a sua massa específica não varia com a pressão. Nesse caso a perda de pressão é calculada pela equação (3). Caso o usuário tenha escolhido “Gás Ideal” os cálculos são feitos através da divisão do comprimento total das tubulações em pedaços menores, e o valor da massa específica é recalculado através da lei dos gases ideais.

Ao chegar ao final da tubulação, ainda não foram inseridas as perdas localizadas, tenha ela sido fornecida como os coeficientes de perda (K 's) ou como o fator de complexidade. A razão dessas perdas não terem sido inseridas é que a sua queda de pressão é função da velocidade local, conforme mostra a equação de Darcy (4). Por outro lado, a velocidade varia através de todo o tubo. Para que essa perda seja inserida é utilizado, como aproximação, o valor da velocidade média tomando a velocidade na entrada do tubo e a velocidade calculada no final do tubo.

III.1.3.2 Tubulação com Equações de Estado

Nos cálculos a partir de uma equação de estado, o programa irá dividir a tubulação em pedaços menores e recalculará as propriedades (densidade e propriedades termodinâmicas) ao final desses passos, independentemente se o fluido estiver no estado líquido ou gasoso.

A pressão e a entalpia são, nesse caso, as propriedades que definem as demais propriedades. Elas são calculadas pelas equações do movimento e de energia, conforme as equações (3) e (14). Atualmente o programa ignora o termo de calor trocado, ou seja, o tubo é considerado adiabático.

A estrutura montada para o cálculo das propriedades por equação de estado foi desenvolvida de tal forma que especificada uma temperatura e uma pressão, todas as outras propriedades são calculadas. Dessa forma é necessário um método iterativo que use uma estimativa inicial para a temperatura de forma a encontrar o valor de entalpia desejada. O método implementado foi o método da secante. A primeira estimativa usada é o valor da temperatura no início da tubulação ou no início da divisão que se está calculando. A segunda estimativa é um valor bem próximo a essa. O valor utilizado foi 1,01 vezes o valor da primeira estimativa. Esses valores se mostraram satisfatórios para todos os cálculos realizados e o método converge rapidamente, uma vez que, normalmente, em um pedaço de cinco metros de tubulação, a temperatura varia muito pouco e a estimativa inicial se torna muito próxima do valor final.

No final da tubulação, a perda de carga nos acidentes é calculada conforme no caso de densidade especificada, mencionado anteriormente.

Ao final desses cálculos, sejam eles por densidade especificada ou por equação de estado, a classe da tubulação fornece os resultados de pressão final, temperatura, vazão e propriedades termodinâmicas, em sua saída. Dessa forma qualquer objeto que esteja ligado a ela pode usá-los como sua própria entrada.

III.1.3.3 Análise do Fator de Atrito

Todos os cálculos realizados anteriormente apresentam embasamento teórico ou são equações empíricas amplamente usadas e aceitas, como por exemplo, a equação de Hazen-Williams. O cálculo do fator de atrito, usado nos cálculos da perda de carga da equação de Darcy, apresenta uma modificação para o uso nesse trabalho. Essa modificação é apresentada a seguir.

Dependendo dos valores do número de Reynolds, o fator de atrito pode estar compreendido em três regiões com comportamentos distintos e três equações empíricas diferentes foram usadas para estimá-lo nessas regiões. Essas equações são as equações (7), (9) e (10). De forma a evitar problemas de descontinuidade em métodos numéricos que usam a derivada da função, essas equações foram unidas em uma única equação regularizada por duas funções que usam a função tangente hiperbólica assim como apresentado na Seção II.5.4.

Foi plotada essa função para alguns valores usuais de rugosidade relativa junto com as funções que a geraram.

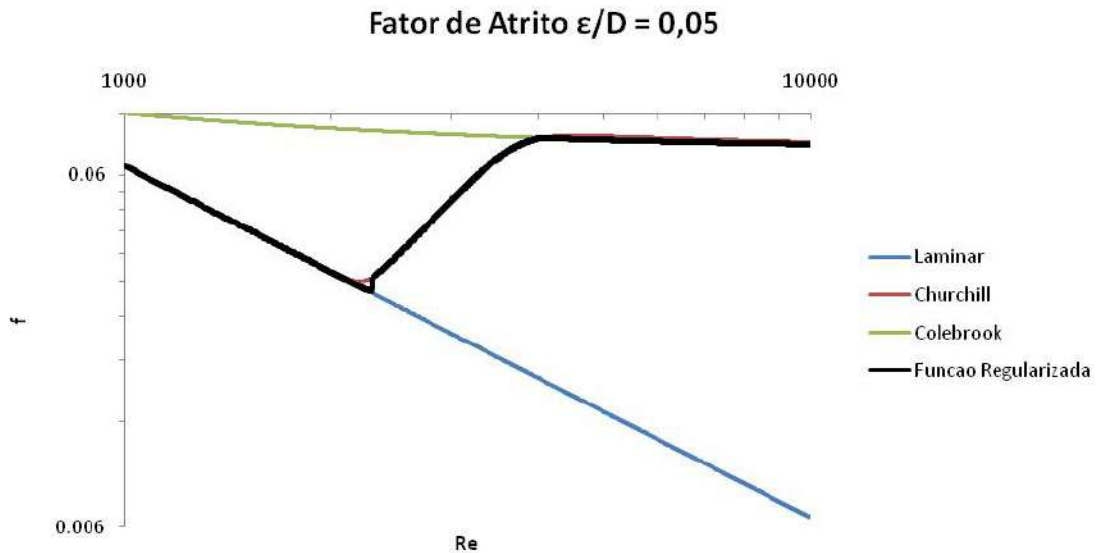


Figura 8. Função Regularizada. Rugosidade Relativa = 0,05.

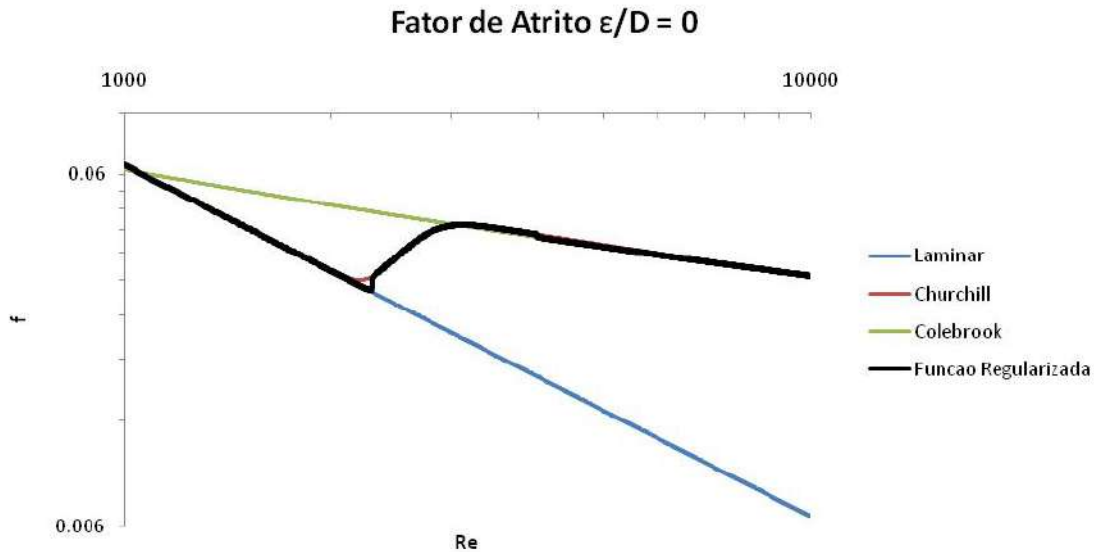


Figura 9. Função Regularizada. Rugosidade Relativa = 0.

É importante notar que a função regularizada segue fielmente as equações nas regiões de regimes estabelecidos. O uso dessa função como fornecedora do fator de atrito em toda faixa de Reynolds, trouxe, no entanto, um salto nas regiões de transição, ou seja, em números de Reynolds iguais a 2300 e 4000. Por outro lado, esse salto se torna mais adequado à resolução numérica do que gerar uma descontinuidade ao passar de uma função diretamente para outra utilizando critérios que analisam se o número de Reynolds é maior ou menor do que um dado valor.

O resultado dos cálculos que usam o fator de atrito e de outros resultados da classe tubulação serão melhor avaliados no CAPÍTULO IV.

III.1.4 Estrutura da classe Nó

Ao adicionar um Nó ao programa, uma figura irá aparecer na tela que, ao ser clicada, abre uma janela para inserção de dados. Esta janela possui duas abas. Na primeira o usuário pode trocar o nome dado a esse objeto e fazer ligações entre este e outros objetos para montar o seu sistema. Após a inserção das saídas do nó, na segunda aba aparecem caixas de inserção de texto para que o usuário insira a

fração da vazão mássica que é dividida e é enviada para cada uma das respectivas saídas.

Um exemplo dessas duas abas está mostrado na Figura 10:

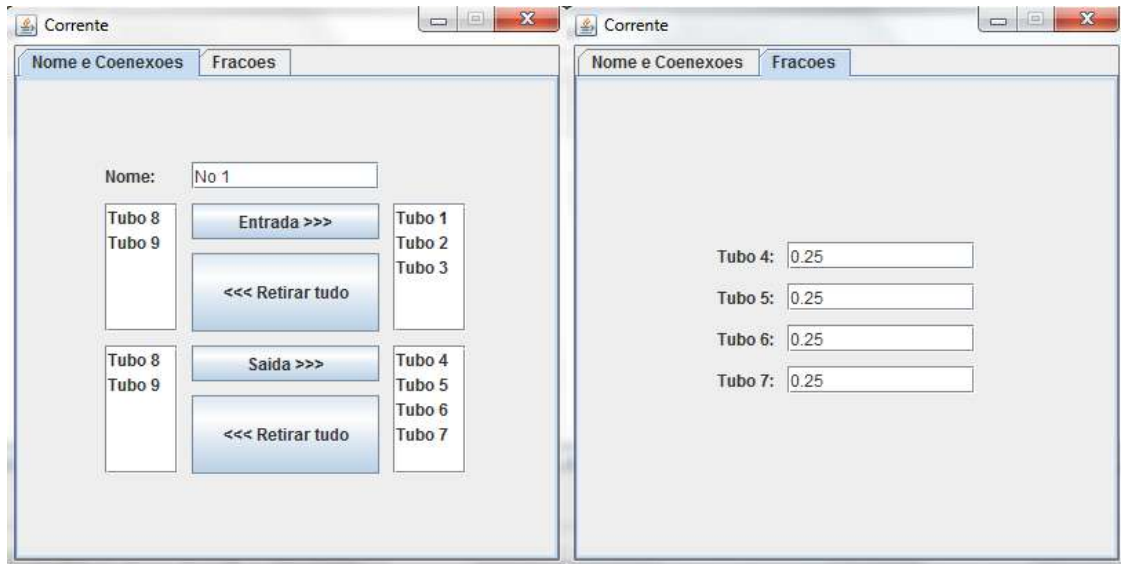


Figura 10. Janela Nó.

Os cálculos de um Nó começam pelos cálculos de mistura de todas as correntes de entrada em uma única corrente interna fictícia.

A pressão considerada para a mistura é a menor pressão entre aquelas fornecidas pelas entradas. A vazão mássica é calculada como a soma de todas as vazões mássicas de entrada, obedecendo ao balanço de massa global. Depois da mistura ter sido calculada, a classe contínua então dividindo as vazões de acordo com as frações especificadas pelo usuário.

Esses cálculos são feitos de duas formas dependendo se o usuário escolheu dar a densidade, de um líquido ou gás ideal, ou calcular as propriedades através de uma equação de estado.

Nos cálculos a partir da densidade fornecida pelo usuário, a classe Nó considera a densidade final como uma média das densidades de entrada de acordo com a seguinte expressão:

$$\rho_{final} = \frac{m_{final}}{\sum \frac{\dot{m}_i}{\rho_i}} \quad (56)$$

em que m_{final} é a soma das vazões mássicas das entradas, \dot{m}_i é a vazão mássica da corrente i e ρ_i é a densidade da corrente i .

Nos cálculos a partir de equações de estado, a classe Nó segue calculando a entalpia da mistura formada pelas entradas através de um balanço de energia aplicado nesse sistema. Dessa forma a entalpia da mistura é a soma das entalpias das entradas, ponderadas com suas vazões mássicas.

$$H_{final} = \frac{\sum \dot{m}_i H_i}{m_{final}} \quad (57)$$

Após obter a entalpia e já sabendo a pressão, a regra das fases diz que o sistema já pode ser completamente determinado. O objetivo agora é encontrar a temperatura que satisfaz essa relação. Como as equações de estado desse programa foram desenvolvidas de forma que, dados uma pressão e uma temperatura, todas as outras propriedades são calculadas, é necessário um método numérico para convergir esse resultado. O método da secante foi usado para determinar qual a temperatura que, aplicada a cada uma dessas entradas, na dada pressão, gera a mesma entalpia obtida anteriormente. A temperatura encontrada será então a temperatura de equilíbrio da mistura e, portanto, a temperatura de saída do nó.

A estimativa inicial para o método da secante é o valor da temperatura média de todas as temperaturas de entrada, ponderadas com suas respectivas vazões mássicas. A segunda estimativa é um valor 1,01 vezes maior do que a primeira.

Com isso, foi assumido que, em um nó, as correntes de entrada são misturadas de forma perfeita e, a partir da especificação das frações de saída das respectivas saídas, divide a vazão mássica total de entrada entre todas as saídas.

III.2 Cálculo Sequencial

O programa aqui desenvolvido realiza todos os seus cálculos de maneira sequencial, ou seja, para que ele calcule as saídas, é necessário saber os dados de entrada e os dados de dimensionamento dos equipamentos.

Uma rotina computacional foi desenvolvida para a resolução do sistema em série e o seu pseudocódigo está representado no Apêndice ao final desse trabalho.

Esse código se baseia na construção de uma matriz onde as linhas e colunas representam cada objeto. Caso a saída de um objeto esteja ligada à entrada de outro, a matriz deverá ter o número 1 nessa posição e o número 0 caso o contrário. Por exemplo, se a saída do objeto 3 está ligada à entrada do objeto 5, a linha 3, coluna 5 da matriz deverá ter o número 1.

Após o método ter encontrado algum objeto que possa ser calculado pela saída de um ou mais objetos, esse objeto é resolvido através de suas rotinas internas. Ao ser resolvido, a coluna referente a esse objeto na matriz deve ser zerada. Um loop garante que esse procedimento seja repetido até que toda a matriz tenha sido zerada e, conseqüentemente, todos os objetos tenham sido calculados.

Os resultados desse método e os resultados das classes dos objetos são analisados no capítulo seguinte.

CAPÍTULO IV - RESULTADOS

IV.1 Tubulação

Simulações foram feitas para avaliar os resultados obtidos em uma tubulação pelo programa, comparando com os resultados do HySys. Foram realizados cálculos tanto por densidade especificada quanto através da equação de estado de Peng-Robinson.

IV.1.1 Por densidade

As condições para o escoamento estão listadas na Tabela 23.

Tabela 23. Dados para Simulação de Tubulação por Densidade

Dado	Valor
Vazão Mássica na entrada	1 kg/s
Densidade	1000 kg/m ³
Viscosidade	1cP
Temperatura	20 °C
Comprimento do tubo	200 m
Diâmetro do tubo	1,25 in
Variação de elevação	0 m
Rugosidade da Tubulação	0,046 mm
K's (acidentes)	0

Essa condição foi aplicada para o escoamento de diversas substâncias no estado líquido utilizando a equação de Darcy. O resultado da pressão na saída do tubo está mostrado na Tabela 24.

Tabela 24. Resultado da Simulação de Tubulação por Densidade

	Pressão	Densidade	Viscosidade	Pressão na saída (bar)	
	Inicial (bar)	(kg/m ³)	(cP)	Programa	HySys
Água	5	1000	1,0	3,69924	3,68524
Etano	50	348	0,0485	46,8497	46,8355
Butano	10	610	0,177	8,14537	8,13344
Hexano	5	667	0,315	3,25282	3,23888

O uso da aproximação de densidade de líquido constante em um escoamento é satisfatório quando comparada aos valores obtidos pelos simuladores convencionais, os quais usam equações de estado mais precisas para tratar do escoamento. Essa aproximação pode ser usada para cálculos aproximados de líquidos que demandam menor precisão e esforço computacional.

IV.1.2 Por Equação de estado

As condições para o escoamento estão listadas na Tabela 25.

Tabela 25. Dados para Simulação de Tubulação por Equação de Estado

Dado	Valor
Pressão na entrada	5 bar
Temperatura na entrada	330 K
Vazão Mássica na entrada	1 kg/s
Comprimento do tubo	200 m
Diâmetro do tubo	4 in
Variação de elevação	50 m
Rugosidade da Tubulação	0,046 mm
K's (acidentes)	0

Essas condições foram aplicadas ao escoamento de diferentes fluidos utilizando a equação de Peng-Robinson, e os resultados da pressão e da temperatura na saída do tubo estão expressos na Tabela 26.

Tabela 26. Resultado da Simulação de Tubulação por Equação de Estado

	Programa		HySys	
	Pressão (bar)	Temp. (K)	Pressão (bar)	Temp. (K)
Água (l)	0,9261	329,97	0,9235	329,97
Etano (g)	4,5063	329,31	4,5033	329,30
n-Butano (g)	4,7274	329,28	4,7263	329,27
n-Hexano (l)	1,8875	329,90	1,8816	329,90

Esses resultados se mostraram compatíveis e consistentes quando comparados a um simulador convencional. É importante notar que a consistência se estende tanto para a simulação de escoamento de líquidos quanto de gases.

IV.2 Misturador

Os cálculos de um misturador por equação de estado nesse programa apresentam como principal saída avaliada a temperatura da mistura, uma vez que a mistura acontece sob igual pressão, e a relação de vazão mássica somente representa a soma das vazões mássicas de entrada.

A temperatura de saída de uma mistura em um Nó, foi avaliada comparando o resultado do programa por aqueles gerados no HySys e no EMSO utilizando a equação de Peng-Robinson para uma mistura de duas correntes de n-butano de mesma vazão a 0,1 bar. Os resultados estão representados na Tabela 27.

Tabela 27. Análise de mistura de duas correntes de butano a 0,1 bar. Saídas em Kelvin.

Temperatura (K)	Programa	HySys	EMSO
300/400	352.67	352.89	352.74
300/900	650.82	650.28	650.72
600/900	759.56	759.08	759.09

IV.3 Rede

A seguinte rede foi montada de modo a avaliar os resultados fornecidos pelo programa.

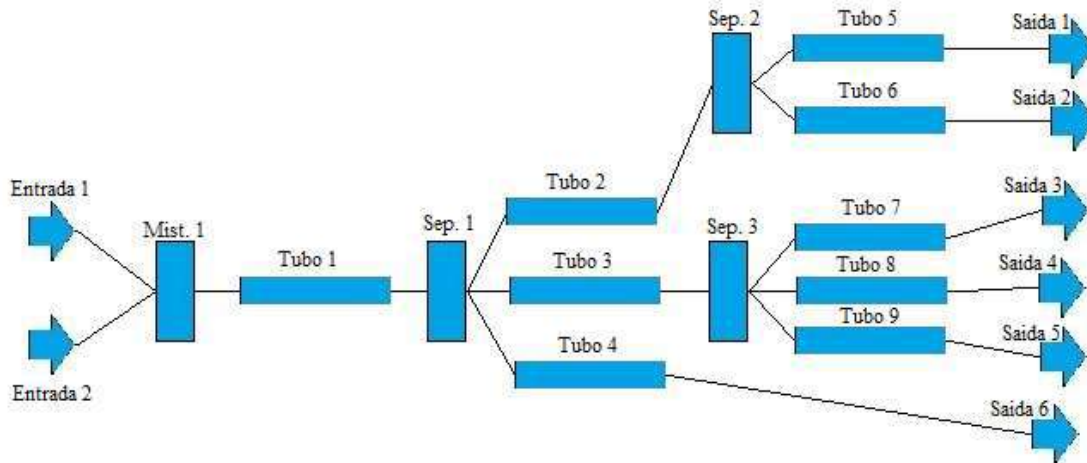


Figura 11. Rede para Simulação.

Todos os separadores fazem uma divisão igual da vazão de entrada. A rede será simulada tanto através do método de densidade constante, quanto através do uso de uma equação de estado.

IV.3.1 Por densidade

A rede será avaliada com escoamento de água líquida a 20°C pela equação de Darcy. As condições de Entradas e dos Tubos estão mostradas na Tabela 28.

Tabela 28. Condições dos Equipamentos da Rede por Densidade.

Equipamento	Vazão (kg/s)	Pressão (bar)	Comprimento (m)	Diâmetro Interno (in)
Entrada 1	1	10	-	-
Entrada 2	5	10	-	-
Tubo 1	-	-	300	3
Tubo 2	-	-	30	1,5
Tubo 3	-	-	20	1,25
Tubo 4	-	-	100	1,25
Tubo 5	-	-	50	1
Tubo 6	-	-	20	0,75
Tubo 7	-	-	10	0,75
Tubo 8	-	-	15	0,75
Tubo 9	-	-	75	0,75

Todos os tubos não apresentam variação de elevação, possuem rugosidade igual a 0,046 mm e fator de complexidade igual a 0.

Os resultados das pressões nas saídas do sistema são apresentados na Tabela 29.

Tabela 29. Resultados da simulação da Rede por Densidade.

Saída	Vazão (kg/s)	Programa Pressão (bar)	HySys Pressão (bar)
1	1	8,0066	7,9871
2	1	7,2742	7,2461
3	2/3	8,4130	8,3978
4	2/3	8,2141	8,1964
5	2/3	5,8271	5,7796
6	2	6,8803	6,8500

Mais uma vez, a consideração de densidade de um líquido constante trouxe resultados satisfatórios quando comparados a simuladores como o HySys. Além disso, o programa mostrou um bom desempenho ao realizar os cálculos instantaneamente.

IV.3.2 Por Equação de Estado

As condições das entradas principais e dos tubos estão mostradas na Tabela 30.

Tabela 30. Condições dos Objetos da Rede por Equação de Estado.

Equipamento	Vazão (kg/s)	Pressão (bar)	Temperatura (K)	Comprimento (m)	Diâmetro Interno (in)
Entrada 1	1	20	500	-	-
Entrada 2	5	20	400	-	-
Tubo 1	-	-	-	200	4
Tubo 2	-	-	-	30	3
Tubo 3	-	-	-	20	3
Tubo 4	-	-	-	25	2

Tubo 5	-	-	-	50	1,75
Tubo 6	-	-	-	20	1,75
Tubo 7	-	-	-	10	1,5
Tubo 8	-	-	-	15	1,5
Tubo 9	-	-	-	75	1,5

A simulação foi realizada para escoamento de n-butano e as propriedades calculadas pela equação de estado de Peng-Robinson. Foi considerado para todos os tubos: 0 metro de variação de elevação; rugosidade de 0,046mm e fator de complexidade igual a 0.

Os resultados de pressão e temperatura nas saídas do sistema são apresentados na Tabela 31.

Tabela 31. Resultados da simulação da Rede por Equação de Estado.

Saída	Programa			HySys	
	Vazão (kg/s)	Pressão (bar)	Temperatura (K)	Pressão (bar)	Temperatura (K)
1	1	16,4277	412,68	16,4096	412,73
2	1	17,2026	413,57	17,1905	413,63
3	2/3	17,5111	413,93	17,5010	413,98
4	2/3	17,3878	413,79	17,3768	413,84
5	2/3	15,8166	411,98	15,7927	412,03
6	2	16,6343	412,92	16,6125	412,97

Os resultados encontrados estão muito próximos daqueles fornecidos pelo HySys e mais uma vez a execução dos cálculos foi instantânea.

CAPÍTULO V - CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

O trabalho apresentou resultados satisfatórios e coerentes para o cálculo de perda de carga em tubulações, cálculo de redes e cálculo de propriedades termodinâmicas. As análises aqui feitas abrangeram uma ampla faixa de temperatura e pressão, principalmente aquelas utilizadas comumente em indústrias e cálculos de engenharia.

Foram analisados os cálculos das equações de estado que fornecem densidade de líquidos e gases, pressão de vapor e outras propriedades termodinâmicas. Foi testado o cálculo de perda de carga em tubulações, a temperatura de mistura de duas correntes com diferentes temperaturas e por fim um teste de uma rede simples. Todos os resultados obtidos por esse simulador foram muito próximos aos resultados obtidos com simuladores consagrados como o HySys, mostrando seu uso potencial.

Por outro lado, a similaridade dos resultados aqui obtidos com o HySys não garante a sua validade real, somente indica que os cálculos estão sendo feitos corretamente. Cabe ao usuário saber quando é melhor utilizar cada equação e cada método de forma que o seus cálculos de fato simulem o mais próximo possível da realidade.

A seguir estão apresentadas algumas ideias para que se dê continuidade ao desenvolvimento desse trabalho, objetivando o desenvolvimento de um novo simulador de processos.

1) Atualmente o programa faz cálculos em sequência, ou seja, para que um equipamento gere as respostas é necessário que sejam dados todos os dados de entrada, como pressão, temperatura e vazão mássica. É comum haver casos onde desejamos, por exemplo, calcular qual a vazão que passa em uma determinada tubulação para que um fluido perca somente uma quantidade dada de pressão. Casos como esse poderiam ser solucionados de algumas maneiras distintas. Uma delas seria dar uma estimativa para o valor de entrada de forma a atingir o valor desejado da saída, sendo a estimativa corrigida por algum método numérico como Newton-Raphson.

- 2) Não há atualmente nenhuma forma de o usuário saber se todos os dados necessários já foram inseridos para que o programa gere as respostas, ou seja, não há como saber se o problema proposto está consistente. A sugestão é, portanto, implementar uma análise de consistência, e enquanto o problema for inconsistente, a opção “RODAR”, que começa a realizar os cálculos, fique desativada para o usuário, evitando erros.
- 3) Introdução de cálculos de misturas, modelos de atividade e mais modelos termodinâmicos.
- 4) Introdução de modelos para prever viscosidade, como por exemplo, modelo de Ely and Hanley para hidrocarbonetos.
- 5) A forma como foi estruturado esse software é bem receptiva à introdução de novos equipamentos, os quais estão organizados como classes na linguagem Java. É de interesse a introdução de equipamentos como bombas, compressores, válvulas, entre outros, que são de grande utilidade para simulação de processos.
- 6) Aumentar o banco de dados das substâncias pertencentes ao pacote termodinâmico.

Referencia Bibliográfica

ASPEN TECH. HYSYS, 2012. Disponível em: <www.aspentech.com/hysys/>

Acesso em: 9 set. 2012.

CHURCHILL, S.W., Friction factor equations spans all fluid-flow ranges, Chem. Eng., 91, 1977.

COLEBROOK, C.F.; WHITE, C.M., Experiments with Fluid friction roughened pipes, Proc. R.Soc.(A), 161, 1937.

CRANE Co ENGINEERING DIVISION; Flow of Fluids through Valves, Fittings and Pipe, 1ª edição, 1976.

DEITEL, H. M.; DEITEL, P. J.; C++: Como Programar, 5ª Edição, São Paulo, Pearson Prentice Hall, 2006.

DEITEL, H. M.; DEITEL, P. J.; Java: Como Programar, 6ª Edição, São Paulo, Pearson Prentice Hall, 2005.

ECLIPSE IDE. Disponível em <<http://www.eclipse.org/>> Acesso em: 9 set. 2012.

FERNANDEZ, M. F.; ARAUJO, R.; ITO, A. E.; Manual de Hidráulica Azevedo Netto, 8ª Edição, Editora Edgard Blücher, 1998.

FOX, R. W.; McDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J.; Introdução a Mecânica dos Fluidos, 6ª Edição, Rio de Janeiro, LTC Editora, 2006.

HAZEN, A.; WILLIAMS, G. S., *Hydraulic Tables*, 3ª edição, New York, John Wiley and Sons, 1933.

MACINTTURE, A. J.; Instalações Hidráulicas: prediais e industriais, 4ª Edição, LTC Editora, 2010.

MOODY, L.F.; PRINCETON, N. J.; Friction Factors for Pipe Flow. Transaction of the ASME: 671-684, 1944.

NEUMARK, S.; Solution of Cubic and Quartic Equations, Oxford, Pergamon Press, 1965.

NICKALLS, R. W. D.; A new approach to solving cubic: Cardan's solution revealed, The Mathematical Gazette, vol. 77, pp. 354–359, 1993.

PERLINGEIRO, C. A. G.. Engenharia de Processos, Análise, Simulação, Otimização e Síntese de Processos Químicos, 1ª edição, São Paulo, Editora Blucher, 2005.

POLING, B. E.; THOMSON, G. H.; FRIEND, D. G.; ROWLEY, R. L.; WILDING, W. V.; Perry's Chemical Engineers' Handbook, 8ª Edição, New York, The McGraw-Hill Companies, 2008.

PRJ-TEC-Nº-3083-30-P0-IT-002/R1 – Engenharia de Processo, Critérios de Dimensionamento de Linhas, Projectus Consultoria Ltda.

PROJETO ALSOC. EMSO, 2012. Disponível em: <www.eng.ufrgs.br/trac/alsoc.> Acesso em: 9 set. 2012.

RAONI, R.L.B, SECCHI, A. R. e BISCAIA, E.C.; “Cálculo de redes de tubulações com anéis utilizando métodos diretos de otimização como critério de convergência”, COBEQ, 2012

SECCHI, A. R.; BISCAIA JR, E. C. B.; Métodos Numéricos em Engenharia Química, Apostila de Aula, 2012.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M.; Introdução a Termodinâmica da Engenharia Química, 7ª Edição, Rio de Janeiro, LTC Editora, 2007.

SOUSA, J.; CUNHA, M.C.; MARQUES, A.S., An explicit solution of the Colebrook-White equation through simulated annealing, in Water Industry Systems: Modelling and Optimization Applications, Vol 2, Water Engineering and Management Series, Research Studies Press Limited, pp. 347-355, 1999.

APÊNDICE

1. Pseudocódigo para resolução de redes em sequência

LER Matriz

ENQUANTO (soma dos elementos da Matriz $\neq 0$) FAZER:

PARA (i = 1 até todas as colunas da Matriz):

FAZER: zerar vetor j[]

SE (soma dos elementos da coluna i > 0)

//significa que ela é calculada por alguma entrada

//olhar para a linha dela e ver por quem ela é calculada:

GUARDAR todas as entradas no vetor j[]

FIM

FAZER: calculável = VERDADEIRO

PARA (todos os elementos em j[]):

SE (a soma da coluna j = 0)

//significa que esse equipamento já foi calculado

//permite o cálculo do equipamento i

SE NAO

//essa entrada ainda precisa ser calculada

//não permite o cálculo do equipamento i

FAZER: calculável = FALSO

FIM

FIM

SE (calculável = VERDADEIRO)

FAZER: solução do i = resolver com dados as entradas em j[]

FAZER: matriz(j,j,i) = 0; *//para todos os j's*

FIM

FIM

FIM