

Programa Computacional Didático de Termodinâmica

PRODITER - II

Relatório Final = Trabalho de Formatura

Emília Villani
(Elaboradora)

Prof. José Roberto Simões Moreira
(Orientador)

novembro / 97

Índice

1. INTRODUÇÃO.....	3
2. ESCOLHA DA LINGUAGEM	4
3. EQUAÇÃO DE GIORGIO SOAVE	5
3.1. MODIFICAÇÕES.....	7
3.2. MÉTODO DE SOLUÇÃO.....	7
3.3. ESTRUTURA DO PROGRAMA	9
3.4. RESULTADOS OBTIDOS.....	12
3.5. MOTIVO DE ABANDONO DA EQUAÇÃO	12
4. EQUAÇÃO DE LEE-KESLER.....	13
4.1. A EQUAÇÃO.....	13
4.1.1. Método de solução.....	14
5. O PROGRAMA - INTERFACE COM O USUÁRIO	17
5.1. INTRODUÇÃO.....	17
5.2. INFORMAÇÕES IMPORTANTES.....	17
5.3. TELA INICIAL.....	17
5.4. CÁLCULO DE PROPRIEDADES EM UM PONTO	19
5.5. ESCOLHA DA SUBSTÂNCIA.....	24
5.6. ESCOLHA DE ZONA	26
5.7. MODIFICAÇÃO DA EQUAÇÃO.....	26
5.8. ESCOLHA DO PONTO DE REFERÊNCIA.....	27
5.9. TABELAS	27
5.10. CONSTRUÇÃO DE GRÁFICOS.....	31
5.11. CICLOS.....	34
5.11.1. CICLOS DE RANKINE.....	37
5.11.2. CICLOS PADRÕES A AR.....	42
5.11.3. CICLOS DE REFRIGERAÇÃO.....	53
5.12. ADIÇÃO DA JANELA DE AJUDA.....	55
6. REALIZAÇÃO DOS CÁLCULOS	59
6.1. INTRODUÇÃO.....	59
6.2. "UNITS" REFERENTES AS TELAS	61
6.3. "UNITS" REFERENTES A MANIPULAÇÃO DE TABELAS E ARQUIVOS DE PROPRIEDADES	66
6.4. "UNITS" PARA A REALIZAÇÃO DOS CÁLCULOS.....	67
6.5. CASOS IMPLEMENTADOS.....	68
7. ANÁLISE DOS RESULTADOS OBTIDOS.....	80
8. DIFICULDADES ENCONTRADAS	82
9. DIVULGAÇÃO DO TRABALHO.....	83

10. CONCLUSÃO.....	84
11. BIBLIOGRAFIA	85

ANEXO 1 - LISTAGEM - GIORGIO SOAVE

ANEXO 2 - ERRO RELATIVO - GIORGIO SOAVE

ANEXO 3 - LISTAGEM PRODITER - LEE-KESLER

ANEXO 4 - ERRO RELATIVO - LEE- KESLER

ANEXO 5 - EXEMPLOS DE DIAGRAMAS

ANEXO 6 - EXEMPLOS DE CICLOS

1. INTRODUÇÃO

Este relatório refere-se às atividades referentes ao trabalho de formatura realizado no período de Março/97 a Novembro/97.

Este projeto visa o desenvolvimento de um programa computacional educacional que permita ao aluno do curso de Termodinâmica a manipulação de ciclos e cálculo de propriedades termodinâmicas, visando uma maior compreensão do funcionamento do ciclo.

O programa deve oferecer ao usuário a possibilidade de escolher entre vários ciclos elementares (ou até mais complexos) e fornecer informações sobre as características das máquinas e equipamentos utilizados, bem como as condições de operação. Como resultado, serão exibidos gráficos representativos do ciclo estudado e os valores referentes às propriedades termodinâmicas nos principais pontos do ciclo.

Além disso estará disponível ao usuário opções para o cálculo de propriedades termodinâmicas, montagem de tabelas e construção de diagramas.

O programa foi desenvolvido na linguagem Delphi, que é uma plataforma gráfica para "Microsoft Windows 95".

O programa utiliza-se equações de estado generalizadas, como a de *Lee e Kesler* (1975) e suas variantes. Tais equações permitem um estudo bastante preciso, já que traduzem o comportamento real das substâncias, com pequenos desvios. Assim, os diversos ciclos termodinâmicos teóricos podem ser analisados, bem como alguns casos simplificados de máquinas com rendimento isentrópico conhecido (ou estimado) e, com uma aproximação razoável, podem ser obtidos os estados termodinâmicos mais significativos.

Este programa faz parte de um esforço para desenvolvimento de programas didáticos na área de Termodinâmica. Este representa o segundo trabalho nesta área e recebeu o nome de Programa Computacional Didático de Termodinâmica II, ou, simplesmente, PRODITER II.

2. ESCOLHA DA LINGUAGEM

Entre as principais características do programa estão a facilidade de operação e a interação gráfica com usuário, o que é melhor conseguido através de um programa em ambiente Windows.

Dentro das possibilidades de compiladores apresentados, as principais foram Visual Basic e Delphi.

A escolha final recaiu sobre o Delphi, um novo compilador da Borland que integra os recursos do ambiente Windows com as vantagens da linguagem Pascal.

A programação em Delphi é orientada a eventos, ou seja, aos diversos movimentos disponíveis ao usuário, associa-se procedimentos, de modo que, ao toque de um botão ou ao selecionar um item do menu, o programa executa os comandos do procedimento ligado a este evento.

Inicialmente as subrotinas de cálculo foram criadas e testadas no compilador Turbo Pascal 7.0. Posteriormente iniciou-se o desenvolvimento da interface com o usuário no compilador Delphi 2.0, onde já estão incluídos os novos recursos do "Windows 95". Finalmente integrou-se as duas partes, uma vez que a linguagem de programação é a mesma, apresentando poucas diferenças.

3. EQUAÇÃO DE GIORGIO SOAVE

Inicialmente utilizou-se a equação de estado proposta por Giorgio Soave (1971) que consiste em uma modificação da bem conhecida equação de Redlich-Kwong.

A equação original de Redlich-Kwong é:

$$P = \frac{R.T}{v-b} - \frac{a}{v.(v+b)T^{0,5}} \quad (3.1)$$

onde P - pressão

T - temperatura

v - volume específico da mistura

R - constante do gás

a e b - parâmetros da equação

No seu trabalho, Soave substitui o termo " $a/T^{0,5}$ " por um termo mais genérico " $a(T)$ ":

$$P = \frac{R.T}{v-b} - \frac{a(T)}{v.(v+b)} \quad (3.2)$$

Substituindo a expressão do fator de compressibilidade (Z):

$$v = \frac{Z.R.T}{P} \quad (3.3)$$

Chamando de A e B os seguintes agrupamento:

$$\frac{a.P}{R^2.T^2} = A \quad (3.4)$$

$$\frac{b.P}{R.T} = B \quad (3.5)$$

Tem-se, então, que a equação (3.2) pode ser rescrita como:

$$Z^3 - Z^2 + Z * (A - B - B^2) - AB = 0 \quad (3.6)$$

Para determinar os coeficientes “a(T)” e “b” foram impostas como condições de que a primeira e a segunda derivada no ponto crítico fossem iguais a zero, o que resultou em:

$$a(T_c) = a_c = 0,42747 * \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad (3.7)$$

$$a(T) = a_c * \alpha(T) \quad (3.8)$$

$$b(T) = 0,08664 * \frac{R T_c}{P_c} \quad (3.9)$$

onde T_c , P_c são temperatura e pressão no ponto crítico

Aplicando os resultados acima às equações (3.4) e (3.5) obtém-se:

$$A = 0,42747 * \alpha(T) * \frac{P / P_c}{T / T_c} \quad (3.10)$$

$$B = 0,08664 * \frac{P / P_c}{T / T_c} \quad (3.11)$$

O termo “ $\alpha(T)$ ” é calculado utilizando-se o fator de acentricidade, através da seguinte expressão:

$$a(T) = (1 + m * (1 - T_r^{0,5}))^{0,5} \quad (3.12)$$

onde T_r é a temperatura reduzida e “m” é determinado através do fator de acentricidade, ω , utilizando-se a seguinte expressão:

$$m = 0,480 + 1,574 * \omega - 0,176 * \omega^2 \quad (3.13)$$

3.1. MODIFICAÇÕES

Foi feita uma verificação da dedução dos coeficientes “a” e “b” da equação proposta por Soave (3.2), igualando-se a primeira e segunda derivada desta equação, no ponto crítico, a zero. Como resultado obteve-se as seguintes expressões:

$$a_c = 1,2824 * \frac{R^2 T_c^2}{P_c} * Z_c \quad (3.14)$$

$$b(T) = 0,2599 * \frac{R T_c}{P_c} * Z_c \quad (3.15)$$

Da comparação entre os dois resultados, concluiu-se que Soave considerou, em seu trabalho, o fator de compressibilidade crítico (Z_c) constante e igual a 0,33. Com o objetivo de se verificar a influência de se utilizar os valores de compressibilidade críticos, foram testados tanto as expressões originais de a e b (Equações 3.7 e 3.9) como as mostradas acima (Eqs. 3.14 e 3.15).

3.2. MÉTODO DE SOLUÇÃO

A implementação da Equação de Soave foi feita, inicialmente, para a zona de saturação. O programa realizado tinha, como finalidade inicial, fornecer a pressão de saturação e o volume específico do líquido saturado e do vapor saturado, dada uma certa temperatura.

O método utilizado para determinação da curva de pressão de vapor foi a igualdade entre a fugacidade (f) do líquido saturado e do vapor saturado para uma certa temperatura. A fugacidade foi calculada através da expressão fornecida por Soave, obtida simplesmente através da relação termodinâmica que define a fugacidade em função de uma integral da pressão entre o estado de pressão nula e pressão P de interesse.

A expressão utilizada foi:

$$\ln \frac{f}{P} = Z - 1 - \ln(Z-B) - \frac{A}{B} * \ln \left(\frac{Z+B}{Z} \right)$$

(3.16)

Utilizando-se a expressão (3.6) para líquido e vapor saturado e igualando-se a fugacidade destes dois pontos, obtêm-se um sistema de três equações e três incógnitas. São elas:

Incógnitas:

- ♦ P, Z_L, Z_V (pressão e fatores de compressibilidade do líquido e do vapor saturado)

Equações:

$$1) f_1 = Z_V^3 - Z_V^2 + Z_V (A - B - B^2) - AB = 0 \quad (3.17)$$

$$2) f_2 = Z_L^3 - Z_L^2 + Z_L (A - B - B^2) - AB = 0 \quad (3.18)$$

$$3) f_3 = Z_V - 1 - \ln(Z_V - B) - \frac{A}{B} * \ln \left(\frac{Z_V + B}{Z_V} \right) - (Z_L - 1 - \ln(Z_L - B) - \frac{A}{B} * \ln \left(\frac{Z_L + B}{Z_L} \right)) = 0 \quad (3.19)$$

O sistema foi resolvido através do método clássico de Newton-Raphson onde, para uma determinada função, tem-se a seguinte relação:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{df}{dx} (x - x_0) \quad (3.20)$$

A derivada df/dx é calculada numericamente em $x = x_0$, assim, fazendo com que $f(x)$ seja igual a 0 (transportando o lado direito da equação para o esquerdo), a partir de um estimativa inicial x_0 , calcula-se x , que então é substituído no lugar de x_0 e assim sucessivamente. Se a estimativa inicial for boa o método converge em poucas interações.

No caso de um sistema o procedimento é análogo, mas utiliza-se vetores no lugar de $f(x)$, $f(x_0)$, x e x_0 , e uma matriz no lugar de df/dx . O sistema final obtido para as três equações acima ilustradas (3.17, 3.18, 3.19) resulta em:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial Z_V} & \frac{\partial f_1}{\partial Z_L} & \frac{\partial f_1}{\partial P} \\ \frac{\partial f_2}{\partial Z_V} & \frac{\partial f_2}{\partial Z_L} & \frac{\partial f_2}{\partial P} \\ \frac{\partial f_3}{\partial Z_V} & \frac{\partial f_3}{\partial Z_L} & \frac{\partial f_3}{\partial P} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_V \\ Z_L \\ P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial Z_V} & \frac{\partial f_1}{\partial Z_L} & \frac{\partial f_1}{\partial P} \\ \frac{\partial f_2}{\partial Z_V} & \frac{\partial f_2}{\partial Z_L} & \frac{\partial f_2}{\partial P} \\ \frac{\partial f_3}{\partial Z_V} & \frac{\partial f_3}{\partial Z_L} & \frac{\partial f_3}{\partial P} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_{V_0} \\ Z_{L_0} \\ P_0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} f_{1_0} \\ f_{2_0} \\ f_{3_0} \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

As derivadas parciais são obtidas a partir das seguintes expressões:

$$\partial f_1 / \partial Z_v = 3 * Z_v^2 - 2 * Z_v + [A - B - B^2] \quad (3.22)$$

$$\partial f_1 / \partial Z_l = 0 \quad (3.23)$$

$$\partial f_1 / \partial P = Z_v (A - B) / P + (- 2 * B^2 * Z_v - 2 * A * B) / P \quad (3.24)$$

$$\partial f_2 / \partial Z_v = 0 \quad (3.25)$$

$$\partial f_2 / \partial Z_l = 3 * Z_l^2 - 2 * Z_l + [A - B - B^2] \quad (3.26)$$

$$\partial f_2 / \partial P = Z_l (A - B) / P + (- 2 * B^2 * Z_l - 2 * A * B) / P \quad (3.27)$$

$$\partial f_3 / \partial Z_v = -1 + 1 / (Z_l - B) + A / B * [1 / (Z_l + B) - 1 / Z_l] \quad (3.28)$$

$$\partial f_3 / \partial Z_l = 1 - 1 / (Z_v - B) - A / B * [1 / (Z_v + B) - 1 / Z_v] \quad (3.29)$$

$$\partial f_3 / \partial P = B / P * [-1 / (Z_l - B) + 1 / (Z_v - B)] + A / P * [1 / (Z_l + B) - 1 / (Z_v + B)] \quad (3.30)$$

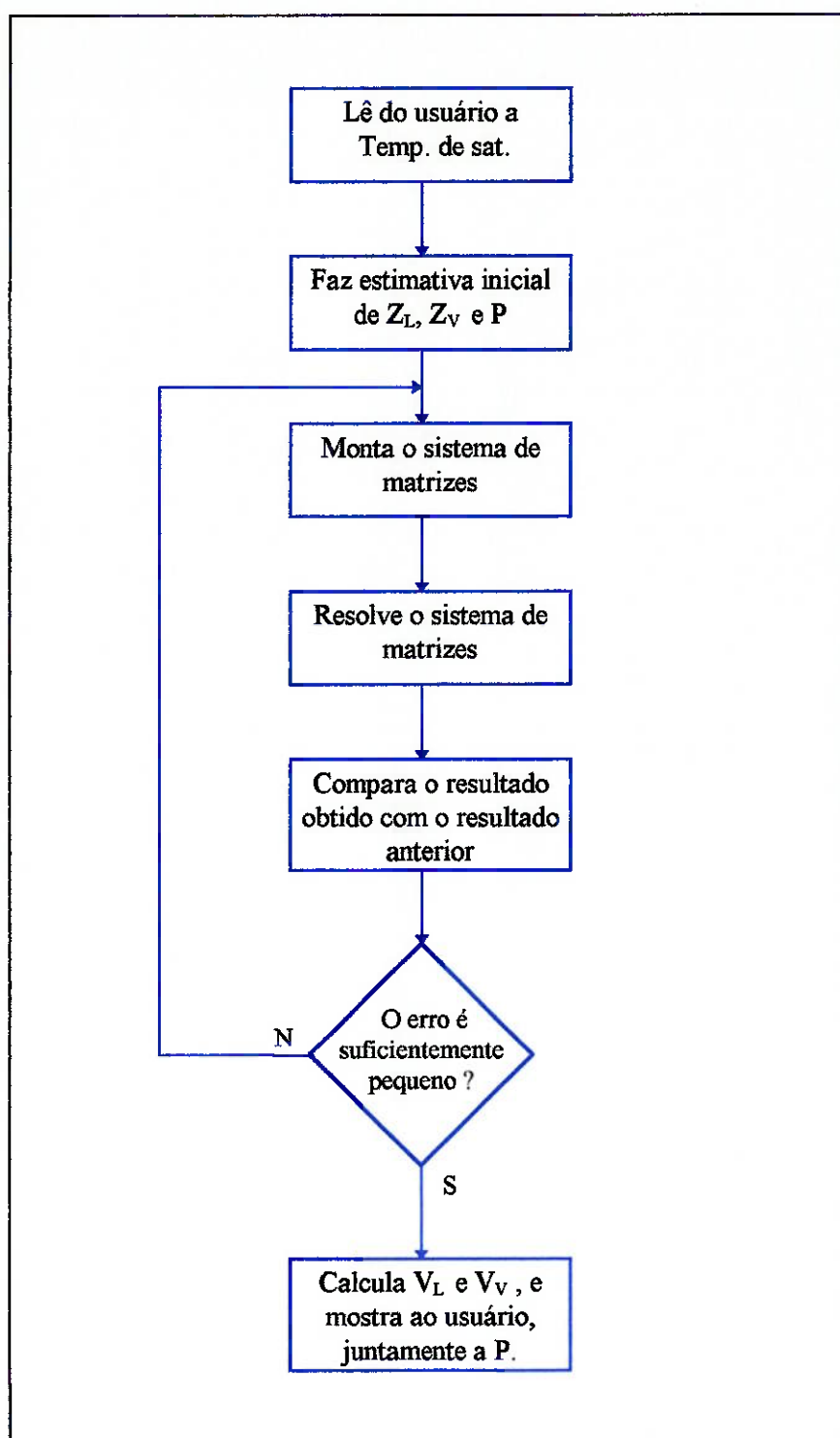
3.3. ESTRUTURA DO PROGRAMA

O programa foi dividido em várias “units”, cujo nome e conteúdo está elencado abaixo (a listagem encontra-se no Anexo 1).

- ♦ Program Teste: programa principal que, definida uma temperatura na zona de saturação, chama o “Procedure Princ” da “Unit Main”, responsável pelo cálculo da pressão de saturação e dos volumes específicos do líquido e do vapor, e imprime os resultados na tela.
- ♦ Program Arquivo: programa que chama o “Procedure Princ” para diversas temperaturas dentro de uma faixa preestabelecida, de acordo com o intervalo definido, e imprime o resultado num arquivo texto, na forma de tabela.
- ♦ Unit Main: é responsável pelo gerenciamento dos cálculos. Contém os seguintes procedimentos:
 1. Procedure Princ: é responsável por determinar o “chute inicial” das incógnitas do problema a partir de classes de temperatura preestabelecidas, e, enquanto o erro for menor que uma constante preestabelecida, calcula o

- valor de Z_L , Z_V e P , seguindo o método de Newton-Raphson e utilizando-se dos demais procedimento e “units”;
2. Procedure Monta_Sist: monta o sistema em forma de matrizes referente ao método de Newton-Raphson;
 3. Procedure Calc_V: calcula o volume específico a partir do fator de compressibilidade;
 4. Procedure Calc_Erro: calcula o máximo erro relativo entre as três variáveis, entre duas interações do método de Newton-Raphson;
- ♦ Unit Func: a partir dos valores iniciais atribuídos as incógnitas do sistema, calcula as funções e derivadas necessárias. Contém os seguintes procedimentos:
1. Procedure CalcConst: calcula os valores de m , α , A e B , utilizados nas equações de Soave;
 2. Procedure CalcFunc: calcula os valores das equações do sistema, de acordo com os valores de Z_L , Z_V e P previamente fornecidos.
 3. Procedure CalcDeriv: calcula os valores das derivadas das equações do sistema, de acordo com os valores de Z_L , Z_V e P previamente fornecidos;
 4. Procedure Dir: gerencia as funções acima, é o único procedimento utilizado por outras “units”.
- ♦ Unit Sist_Lin: contém vários procedimentos e funções que, gerenciados pelo “Procedure Resolve”, resolve sistemas lineares na forma de matrizes.
- ♦ Unit TypeUnit: contém definições de tipos de variáveis e definições variáveis globais que são utilizados em diversas “units”, estando acessíveis sem a necessidade de declarações ou transferências.

Para ilustrar o funcionamento do programa foi elaborado um diagrama de blocos (fig.1) contendo as principais passagens. A hierarquia do programa pode ser observada na fig.2.

*Figura 1 - Diagrama de Blocos*

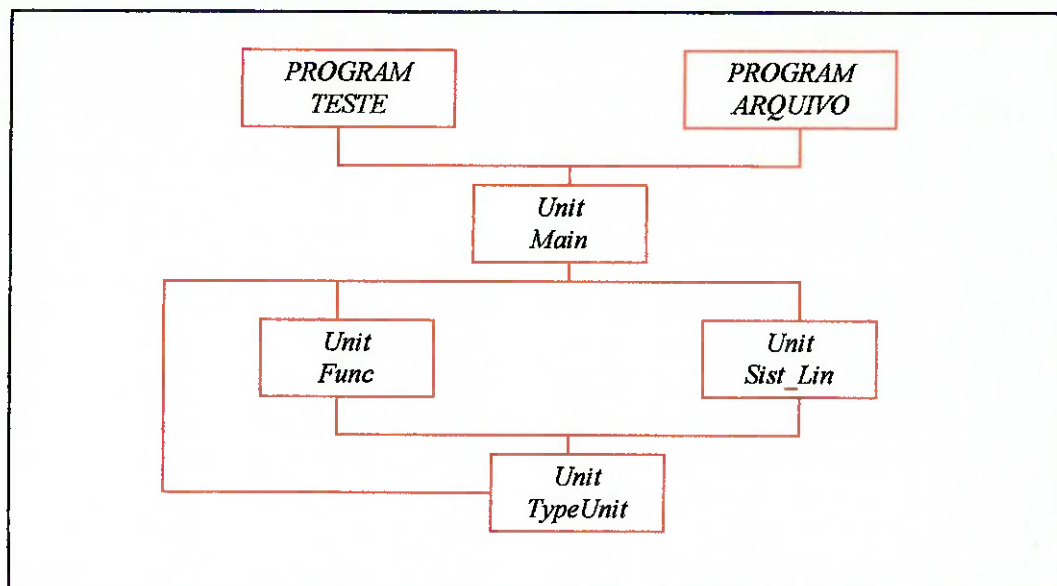


Figura 2 - Hierarquia do Programa

3.4. RESULTADOS OBTIDOS

Foram construídas tabelas contendo os valores de temperatura, pressão e volume específico do líquido e do vapor na zona de saturação para as seguintes substâncias:

- ♦ Água;
- ♦ Metano;
- ♦ Freon 12;

Os resultados obtidos, bem como os erros relativos, encontram-se no Anexo 2. Para a água e para o refrigerante comparou-se os resultados com aqueles fornecidos por Van Wylen (1993), para o metano comparou-se os resultados aqueles fornecidos por Reynolds (1979).

3.5. MOTIVO DE ABANDONO DA EQUAÇÃO

Como é possível analisar das tabelas e gráficos apresentados no Anexo 2, o erro relativo obtido para as diversas substâncias testadas foi superior a 5% na maioria dos pontos. Conclui-se portanto que a equação deveria ser abandonada, não constando no programa final.

4. EQUAÇÃO DE LEE-KESLER

Na tentativa de obter-se menores desvios, optou-se pela utilização da equação de Lee-Kesler (1975), a qual é baseada na equação de estado de três parâmetros proposta por Pitzer e colaboradores.

A equação de Lee-Kesler tem como principal objetivo abranger ampla gama de valores de T_r e P_r de interesse prático para hidrocarbonetos, uma vez que a equação de Pitzer (Lee-Kesler, 1975) se apresenta falha neste sentido, não suportando temperaturas reduzidas abaixo de 0,8. Um outro objetivo do trabalho de Lee-Kesler é o de melhorar a precisão e a consistência dos resultados obtidos.

Para atingir estes objetivos Lee-Kesler propuseram utilizar utilizadas duas equações de estado, uma para o fluido simples e outra para o fluido de referência. Assim é possível determinar as propriedades volumétricas e termodinâmicas do líquido e do vapor com grande precisão, especialmente para substâncias não polares, ou pouco polares, e suas misturas.

A equação apresenta melhor desempenho nas regiões de vapor superaquecido e de líquido subresfriado, não sendo tão eficaz na região de saturação e na vizinhança do ponto crítico. A região de validade da equação abrange valores que vão de $T_r = 0,3$ até 4 e de $P_r = 0$ até 10.

4.1. A EQUAÇÃO

Baseando no trabalho desenvolvido por Pitzer e colaboradores, Lee-Kesler expressaram o fator de compressibilidade de um fluido qualquer em função dos fatores de compressibilidade de um fluido simples ($Z^{(0)}$) e de um fluido de referência ($Z^{(r)}$), através da seguinte expressão:

$$Z = Z^{(0)} + w/w^{(r)} * (Z^{(r)} - Z^{(0)}) \quad (4.1)$$

Entre as vantagens desta representação está o fato de $Z^{(r)} - Z^{(0)}$ serem obtidos através da mesma expressão, modificando-se apenas as constantes da equação.

No trabalho original, a substância referência foi o octano (C_8H_{18}), pois este é o maior hidrocarboneto para o qual existem dados experimentais precisos (P-V-T e

entalpia) para uma ampla gama de condições. Como o fluido simples as principais substâncias utilizadas foram Ar, Kr e metano.

4.1.1. Método de solução

Cálculo de Propriedades Volumétricas

1. A partir dos valores de pressão e temperatura fornecidos, inicialmente calcula-se a pressão reduzida ($P_r = P/P_c$) e a temperatura reduzida ($T_r = T/T_c$), utilizando-se as propriedades do ponto crítico.
2. Resolvendo a equação abaixo (4.2) para o fluido simples (através da substituição dos valores encontrados na Tabela 1 e dos valores de T_r e P_r calculados) determina-se o valor de V_r (que não é o volume reduzido do fluido de interesse).

$$\frac{P_r V_r}{T_r} = 1 + \frac{B}{V_r} + \frac{C}{V_r^2} + \frac{D}{V_r^3} + \frac{c_4}{T_r^3 V_r^2} * \left(\beta + \frac{\gamma}{V_r^2} \right) \exp \left(- \frac{\gamma}{V_r^2} \right) \quad (4.2)$$

onde temos que:

$$B = b_1 - b_2/T_r - b_3/T_r^2 - b_4/T_r^3 \quad (4.3)$$

$$C = c_1 - c_2/T_r + c_3/T_r^3 \quad (4.4)$$

$$D = d_1 + d_2/T_r \quad (4.5)$$

3. Calcula-se então $Z^{(0)}$ através da expressão (4.6):

$$Z^{(0)} = \frac{P_r V_r}{T_r} \quad (4.6)$$

4. O próximo passo consiste em repetir-se os itens 2 e 3 para o fluido de referência (através das constantes da Tabela 1), determinando $Z^{(r)}$.
5. Finalmente calcula-se o fator de compressibilidade através da equação (4.1).

Tabela 1 - Constantes da equação (4.2)

Constante	Fluido Simples	Fluido de Referência	Constante	Fluido Simples	Fluido de Referência
b_1	0,1181193	0,2026579	c_3	0,0	0,0160901
b_2	0,265728	0,331511	c_4	0,042724	0,041577
b_3	0,154790	0,027655	d_1	0,155488e-4	0,48736
b_4	0,030323	0,203488	d_2	0,623689e-4	0,0740336
c_1	0,0236744	0,0313385	β	0,65392	1,226
c_2	0,0186984	0,0503618	γ	0,060167	0,03754

Cálculo de Propriedades Termodinâmicas

As propriedades termodinâmicas são obtidas através das seguintes expressões:

Fugacidade

$$\ln\left(\frac{f}{P}\right) = Z - 1 - \ln(Z) + \frac{B}{V_r} + \frac{C}{2V_r^2} + \frac{D}{5V_r^5} + E \quad (4.7)$$

onde

$$E = \frac{c_4}{2T_r^3 \gamma} \left\{ \beta + 1 - \left(\beta + 1 + \frac{\gamma}{V_r^2} \right) \exp\left(-\frac{\gamma}{V_r^2}\right) \right\} \quad (4.8)$$

Entalpia Residual

$$\frac{H - H_0}{RT_c} = T_r \left\{ Z - 1 - \frac{b_2 + 2b_3/T_r + 3b_4/T_r^2}{T_r V_r} - \frac{c_2 - 3c_3/T_r^2}{2T_r V_r^2} + \frac{d_2}{5T_r V_r^5} + 3E \right\} \quad (4.9)$$

Entropia Residual

$$\frac{S - S_0}{R} + \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) = \ln(Z) - \frac{b_1 + b_3/T_r^2 + 2b_4/T_r^3}{V_r} - \frac{c_1 - 2c_3/T_r^3}{2V_r^2} - \frac{d_1}{5V_r^5} + 2E \quad (4.10)$$

O método de solução é idêntico para todas as propriedades acima elencadas, como exemplo será utilizado o cálculo da entalpia residual $[(H-H^0)/RT_c]$:

1. Determina-se, para o fluido simples, os valores de V_r e $Z^{(0)}$ através do procedimento descrito acima.

2. Calcula-se o valor de $[(H-H^0)/RT_c]^{(0)}$ através da expressão (4.9).
3. Repete-se os itens 2 e 3 para o fluido de referência, obtendo $[(H-H^0)/RT_c]^{(r)}$.
4. A entalpia residual do fluido de interesse é determinada de modo similar a Z, através da relação:

$$[(H-H^0)/RT_c] = [(H-H^0)/RT_c]^{(0)} + (\omega/\omega_r) * \{[(H-H^0)/RT_c]^{(r)} - [(H-H^0)/RT_c]^{(0)}\} \quad (4.11)$$

5. O PROGRAMA - INTERFACE COM O USUÁRIO

5.1. INTRODUÇÃO

Da mesma forma que para a equação de Giorgio Soave, iniciou-se a implementação da equação de Lee-Kesler utilizando a linguagem Pascal e, como compilador, o Turbo Pascal 7.0.

Em seguida iniciou-se a construção da interface com o usuário, através do Compilador Delphi 2.0, um programa que oferece todos os recursos do ambiente Windows utilizando o Pascal como linguagem orientada a eventos.

Finalmente integrou-se as duas partes, permitindo, assim, o cálculo de propriedades através da equação de Lee-Kesler.

A descrição do programa será iniciada com a apresentação do funcionamento do programa do ponto de vista do usuário. Em seguida será analisada a parte referente aos cálculos.

5.2. INFORMAÇÕES IMPORTANTES

Ao iniciar a execução do programa, a primeira tela a ser visualizada é uma janela alertando ao usuário que o programa, apesar de estar finalizado, pode apresentar alguns problemas e, neste caso, deve-se informar o problema encontrado aos responsáveis para futura correção dos erros.

Alerta-se, também, sobre as limitações das equações de estado e recomenda-se cautela na utilização dos dados fornecidos pelo programa.

Esta tela é apresentada a seguir na Fig. 3.

5.3. TELA INICIAL

Após a janela de informações, visualiza-se a tela inicial (Figura 3) onde consta o nome do programa, o nome da faculdade, da universidade e do laboratório a qual ele está relacionado, bem como a fonte de financiamento e a versão do programa.

Como é possível verificar observando a Figura 4 abaixo, existe também um menu principal com cinco opções disponíveis. São elas:

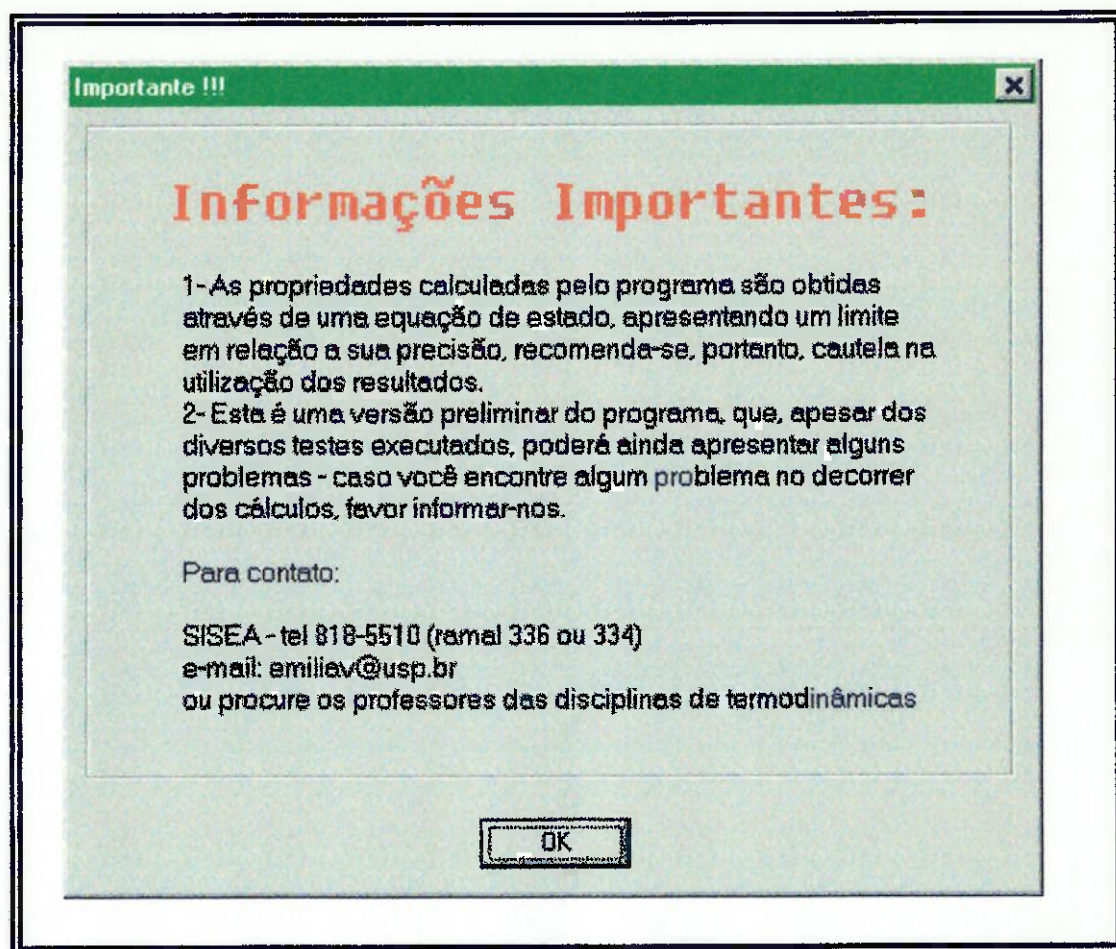


Figura 3 - Tela Informativa

♦ **Cálculos** - tem como sub-opções:

- ◇ Propriedades em um ponto - item do menu que levará o usuário a Tela de Cálculo de Propriedades, onde é possível calcular todas as propriedades de um estado, com diversas opções de entrada.
- ◇ Sair - onde o programa é encerrado após a confirmação do usuário.

♦ **Tabelas** - tem como sub-opções:

- ◇ **Montar nova tabela** - item do menu que levará o usuário a Tela de Tabelas, onde será possível a construção de tabelas termodinâmicas a partir de alguns parâmetros definidos pelo usuário.
- ◇ **Abrir tabela** - também levará a Tela de Tabelas, mas, através desta opção será possível abrir uma tabela construída pelo programa anteriormente.

♦ **Gráficos** - permitirá ao usuário a construção de gráficos de propriedades termodinâmicas. Tem apenas uma sub-opção:

- ◇ **Construir Novo Gráfico** - levará a Tela de Dados do Gráfico, onde o usuário determinará o gráfico a ser construído e alguns parâmetros deste gráfico.
- ♦ **Ciclos** - permite ao usuário a análise de ciclos termodinâmicos. Tem como sub-opção diversas classes de ciclos que serão analisadas posteriormente. São elas:
 - ◇ **Ciclos de Rankine.**
 - ◇ **Ciclos de Refrigeração.**
 - ◇ **Ciclos Motores Padrões de Ar 1.**
 - ◇ **Ciclos Motores Padrões de Ar 2.**
- ♦ **Ajuda** - contem informações gerais sobre o programa. Será analisada futuramente junto as demais janelas de ajuda do programa.



Figura 4 - Tela de Abertura do Programa

5.4. CÁLCULO DE PROPRIEDADES EM UM PONTO

Ao escolher a opção *Cálculos - Propriedades em um Ponto* o usuário entra em uma segunda tela (Figura 5), desabilitando a tela inicial. Como explicado anteriormente, aqui o usuário poderá determinar as várias propriedades de um ponto através de duas propriedades quaisquer fornecidas.

A tela que o usuário encontra inicialmente possui um menu principal e três botões, dos quais apenas um está habilitado.

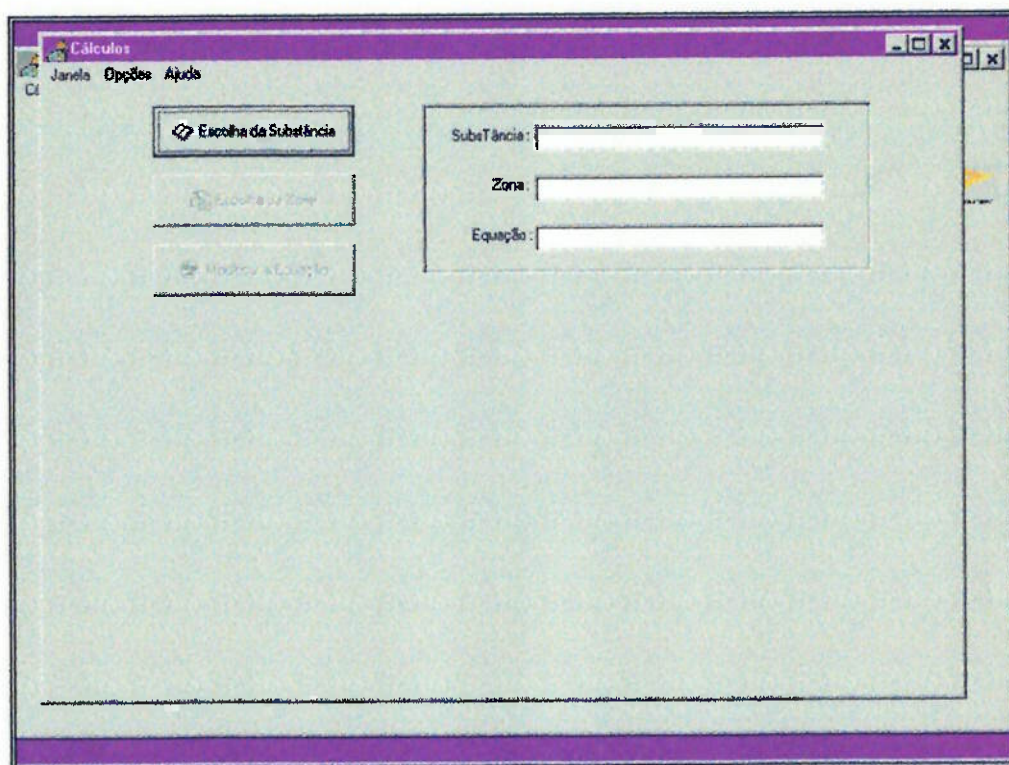


Figura 5 - Tela de Cálculo de Propriedades em um Ponto - Início

As opções do Menu Principal são:

- ♦ **Janela** - tem como sub-opções:
 - ◇ **Limpar Dados** - através da qual, depois de realizados os cálculos, ou durante qualquer outra etapa, o usuário pode cancelar os passos anteriores e voltar ao estado em discussão (com apenas o menu e um botão habilitados).
 - ◇ **Voltar ao Menu Principal** - cancela o que foi feito e retorna a Tela Inicial.
 - ◇ **Sair do Programa** - onde o programa é encerrado após a confirmação do usuário.
- ♦ **Opções** - permite ao usuário a determinação do ponto de referência no cálculo da entalpia e da entropia. Será tratada mais adiante
- ♦ **Ajuda** - contém informações sobre a tela atual, e eventuais problemas. Será tratada mais adiante.

O único botão habilitado indica que o usuário deve obrigatoriamente começar seus cálculos pressionando-o este botão permitirá o acesso a uma outra tela onde será escolhida a substância da qual se deseja saber as propriedades. Esta tela será tratada adiante.

Uma vez escolhida a substância, é habilitado o segundo botão (logo abaixo do botão de “Escolha da Substância”) através do qual o usuário deverá escolher a zona de trabalho, a escolha é feita em outra tela, também tratada mais adiante.

Tendo escolhido a zona, o programa escolhe uma equação padrão (ou método de resolução da equação) e é então habilitado o terceiro botão, que permitirá a alteração da escolha feita pelo programa.

As três opções acima ficam registradas em caixas de texto para consulta do usuário, mas este não pode alterá-las diretamente, apenas através dos botões.

Ao escolher uma zona de trabalho, automaticamente são mostradas ao usuário as várias combinações de entradas possíveis. São elas:

♦ **Zona de Saturação:**

- ◊ Temperatura de saturação;
- ◊ Pressão de saturação;
- ◊ Temperatura e volume específico;
- ◊ Pressão e volume específico;
- ◊ Pressão e entalpia;
- ◊ Temperatura e entropia;
- ◊ Pressão e entropia;
- ◊ Temperatura e título;
- ◊ Pressão e título;

♦ **Zona de Vapor Superaquecido ou Zona de Líquido Comprimido:**

- ◊ Temperatura e Pressão;
- ◊ Temperatura e volume específico;
- ◊ Pressão e volume específico;
- ◊ Pressão e entalpia;
- ◊ Temperatura e entropia;
- ◊ Pressão e entropia;

Escolhida uma das opções acima, aparecerá na tela caixas de texto para a entrada dos dados, ao lado das caixas estão indicadas as posições corretas de cada dado e a unidade em que ele deve ser fornecido. Juntamente com as caixas de texto estará também um botão de "OK" que deverá ser pressionado após o usuário haver escrito os dados. Enquanto está sendo digitada a entrada é filtrada, de modo que só são considerados válidos os seguintes caracteres: "0....9", "-", ".", outros caracteres são ignorados pelo programa.

Pressionado o botão "OK", o programa realiza os cálculos e apresenta o resultado na tela em um painel apropriado.

As saídas fornecidas variam de acordo com a escolha feita anteriormente. São elas:

♦ **Zona de Saturação** - temperatura ou pressão de saturação:

- ♦ Temperatura de saturação;
- ♦ Pressão de saturação;
- ♦ Volume específico do líquido saturado;
- ♦ Volume específico do vapor saturado;
- ♦ Entalpia do líquido saturado;
- ♦ Entalpia do vapor saturado;
- ♦ Entropia do líquido saturado;
- ♦ Entropia do vapor saturado;
- ♦ Fator de compressibilidade do líquido saturado;
- ♦ Fator de compressibilidade do vapor saturado;

♦ **Zona de Saturação** - outra opção:

- ♦ Temperatura de saturação;
- ♦ Pressão de saturação;
- ♦ Volume específico;
- ♦ Entalpia;
- ♦ Entropia;
- ♦ Fator de compressibilidade;
- ♦ Título;

♦ **Zona de Vapor Superaquecido ou Zona de Líquido Comprimido-** todas as opções:

- ♦ Temperatura;
- ♦ Pressão;
- ♦ Volume específico;
- ♦ Entalpia;
- ♦ Entropia;

Uma vez impresso os resultados, o programa pergunta ao usuário se deseja realizar novos cálculos, caso a resposta seja afirmativa o programa permite ao usuário a realização de cálculos, não sendo obrigatoriamente necessário refazer todas as escolhas anteriores. Um exemplo é apresentado na Figura 6.

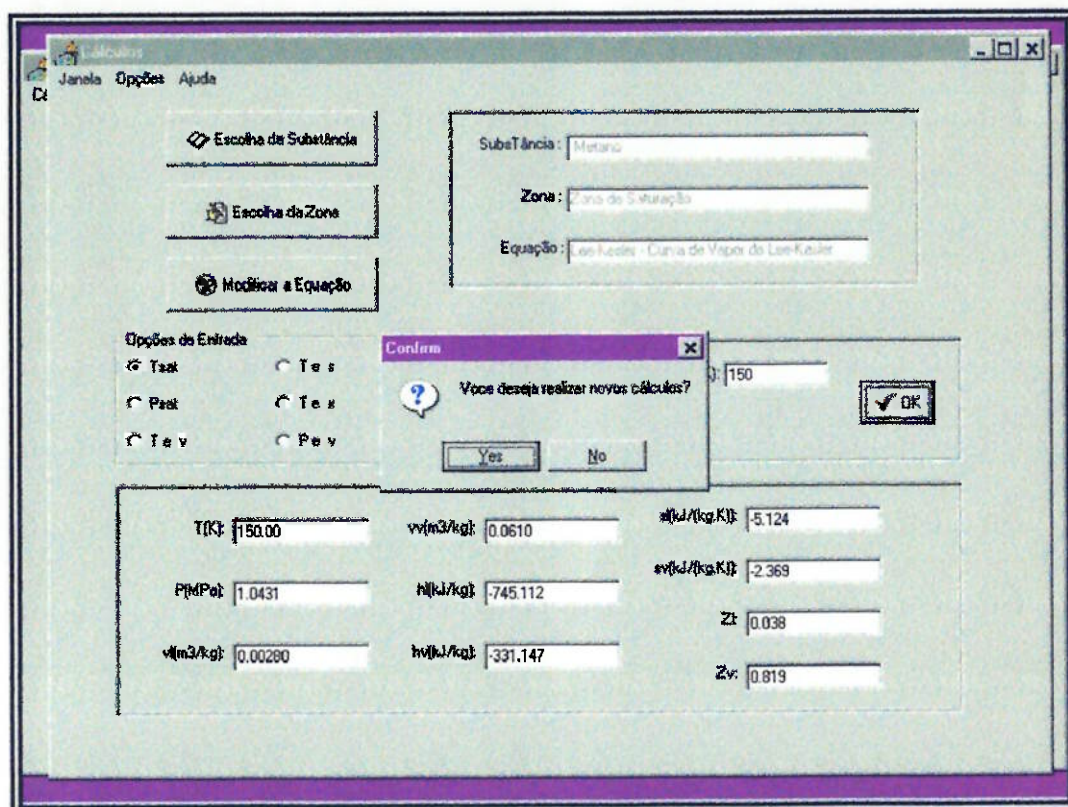


Figura 6 - Tela de Cálculo de Propriedades em um Ponto - Fim

Caso o usuário tenha fornecido dados inconsistentes aparecerá uma mensagem de erro. Existem três tipos de mensagem possíveis:

- ♦ Os dados não se encontram na zona escolhida;
- ♦ Os dados não se encontram na zona de validade da equação utilizada;
- ♦ Os dados não se encontram na zona de convergência do método utilizado;

5.5. *ESCOLHA DA SUBSTÂNCIA*

Quando o usuário, a partir de um ponto qualquer do programa, solicita a escolha de uma substância de trabalho, é automaticamente ativada a tela da Figura 7 e qualquer outra tela é desabilitada. Esta tela tem seu tamanho original bem reduzido em relação as telas até agora apresentadas, sendo permitido seu redimensionamento e maximização.

Inicialmente o usuário deverá fornecer o nome de arquivo de dados. Pressionando o botão "Procurar" o programa abre uma janela para procura de arquivos nos vários diretórios, está é a janela padrão do "Windows 95" para abertura de arquivos.

Uma vez escolhido o arquivo, aparecem na tela os nomes das várias substâncias cujas propriedades básicas para a realização dos cálculos se encontram naquele arquivo. Esta lista aparecerá na forma de tabela de apenas uma coluna. Estarão disponíveis dois botões, um de "OK" que deverá ser pressionado após selecionada a substância desejada, e outro para a adição de uma nova substância ao arquivo.

Caso este último seja pressionado a tabela anterior ganha um tamanho maior e várias colunas onde devem ser escritas as propriedades. São elas:

- ♦ Nome da substância;
- ♦ Temperatura crítica;
- ♦ Pressão crítica;
- ♦ Volume crítico;
- ♦ Fator de acentricidade;
- ♦ Massa molecular;
- ♦ A - coeficiente que não deve ser adicionado pelo usuário e será calculado posteriormente pelo próprio programa;
- ♦ B - coeficiente que não deve ser adicionado pelo usuário e será calculado posteriormente pelo próprio programa;
- ♦ V_{pa}, V_{pb}, V_{pc}, V_{pd} - coeficientes para aproximação de uma curva de pressão de vapor - estes coeficientes *não* são indispensáveis;
- ♦ C_{pa}, C_{pb}, C_{pc}, C_{pd} - coeficientes para aproximação do calor específico a pressão constante por uma equação de terceiro grau;

- ♦ Equação - número inteiro de 1 a 3 que determinará o tipo de equação à qual os coeficientes da curva de pressão se referem.

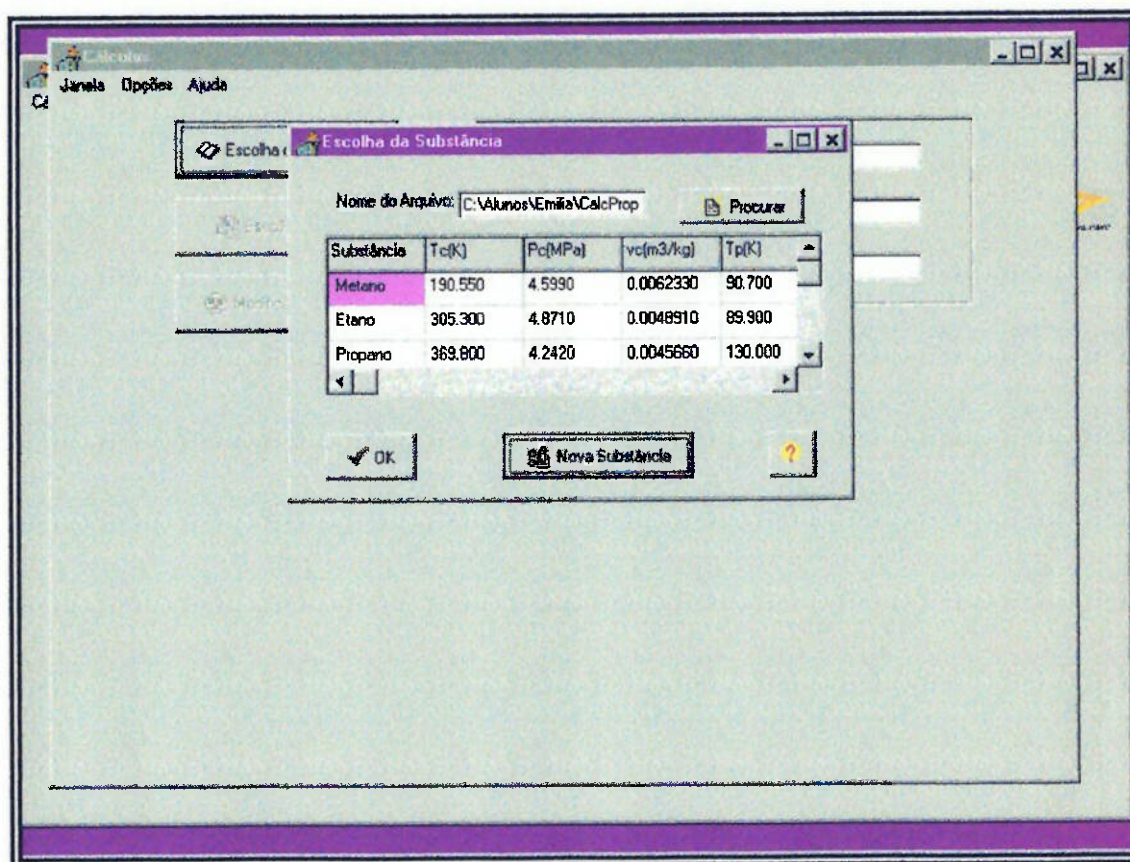


Figura 7 - Tela de Escolha de Substância

Ao mesmo tempo em que o usuário solicita a adição de uma nova substância o programa emite um aviso de que os campos A e B não devem ser preenchidos. Após a adição das propriedades o usuário deverá pressionar o botão “OK” não necessariamente devendo escolher a substância adicionada.

Após o pressionamento do botão “OK” o programa retorna automaticamente a sua tela original.

O botão com um ponto de interrogação dá acesso a Ajuda e será tratado posteriormente.

Atualmente os arquivos de banco de dados disponível são “Hidrocarbonetos”, contendo as propriedades de 15 hidrocarbonetos, e “Outras Substâncias” contendo propriedades de substâncias como água e amônia.

5.6. ESCOLHA DE ZONA

A tela de escolha de zona (Figura 8), como a de escolha de substância, apresenta-se em tamanho reduzido e consiste apenas em uma janela com uma caixa de opções e um botão “OK” que deve ser pressionado após a escolha da zona. Caso o usuário pressione o botão sem escolher uma zona aparecerá uma mensagem de erro.

As opções disponíveis são:

- ♦ Zona de Saturação;
- ♦ Zona de Vapor Superaquecido;
- ♦ Zona de Líquido Comprimido;

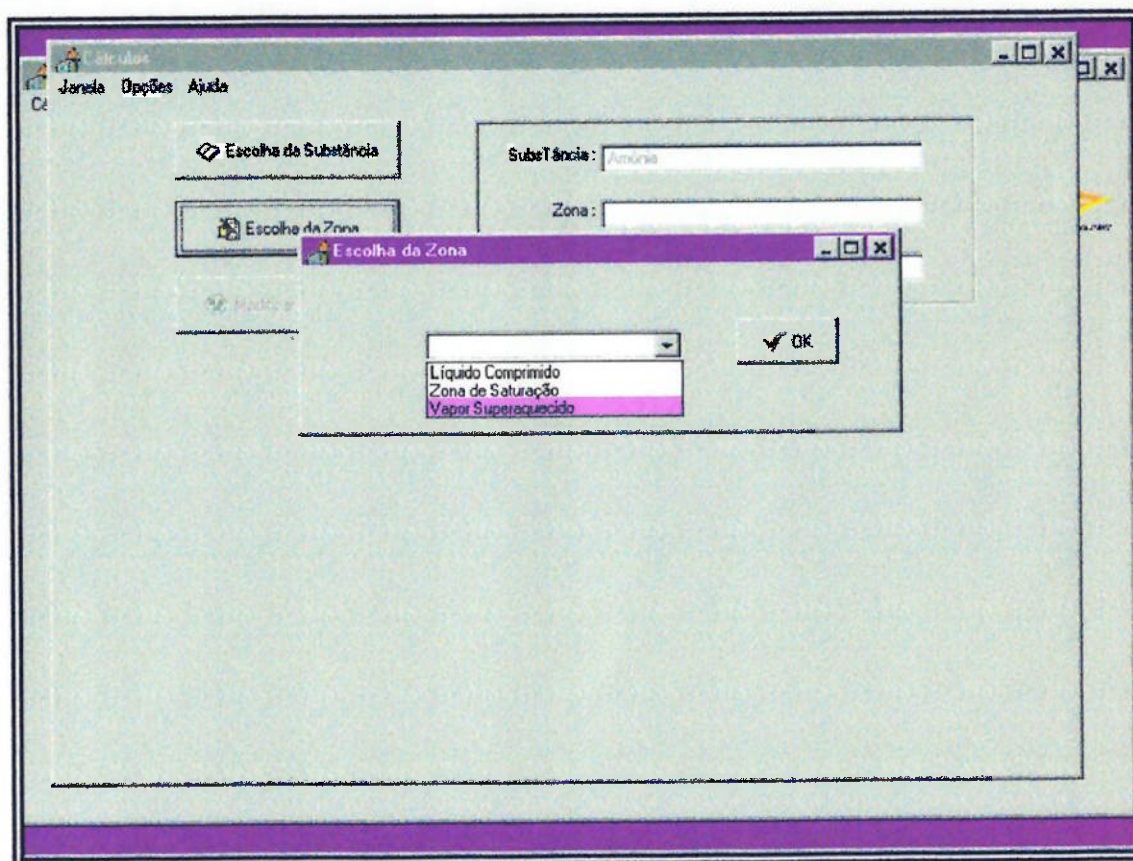


Figura 8 - Tela de Escolha de Substância

5.7. MODIFICAÇÃO DA EQUAÇÃO

Esta tela é idêntica a anterior, apenas apresentando opções diferentes e não emitindo mensagem de erro caso não seja feita alguma escolha. As opções são apresentadas de acordo com a zona escolhida, são elas:

- ♦ Zona de Saturação:

- ◊ Equação de Lee-Kesler - Método da Igualdade de Fugacidades;
- ◊ Equação de Lee-Kesler - Curva de pressão de vapor de Lee-Kesler;
- ◊ Equação de Lee-Kesler - Curva de pressão de vapor compilada por Reid (1987) e outros;
- ♦ Zona de Vapor Superaquecido e Zona de Líquido Comprimido:
 - ◊ Equação de Lee-Kesler;

Para curva de pressão de vapor compilada por Reid é necessário que o arquivo de propriedades das substâncias possua os coeficientes V_{pa} , V_{pb} , V_{pc} , e V_{pd} para a substância escolhida.

5.8. ESCOLHA DO PONTO DE REFERÊNCIA

Foi adicionado ao menu Opção, presente tanto na janela de “Cálculo das Propriedades em um Ponto” como na janela de “Construção de Tabelas” e nas demais janelas criadas, a opção de modificação do ponto de entalpia nula e de entropia nula.

Resumidamente, ao clicar nesta opção do menu Opção, é criada uma pequena janela (ver Figura 9), onde aparecerão os valores atuais da pressão e temperatura nos pontos de referência e onde deverão ser digitados os novos valores.

Os valores destes pontos são armazenados em um arquivo chamado $P_ref.prf$, que é continuamente acessado na realização dos cálculos.

5.9. TABELAS

Quando o usuário seleciona um dos itens da opção “Tabelas” do menu da Tela Inicial, cria-se automaticamente uma nova tela (Figura 10) onde é possível acessar e construir tabelas de propriedades termodinâmicas de acordo com as necessidades do usuário.

Através da opção “Montar Tabela” o usuário encontrará disponível na tela apenas o menu e o botão “Escolha de Substância”. Os demais botões e opções estão desativados.

O menu é idêntico aquele apresentado na tela “Cálculo de Propriedades”, possuindo as mesmas opções e sub-opções, o mesmo se aplica ao botão “Escolha de

Substância” que acionará a janela de “Escolha de Substância”, já descrita anteriormente.

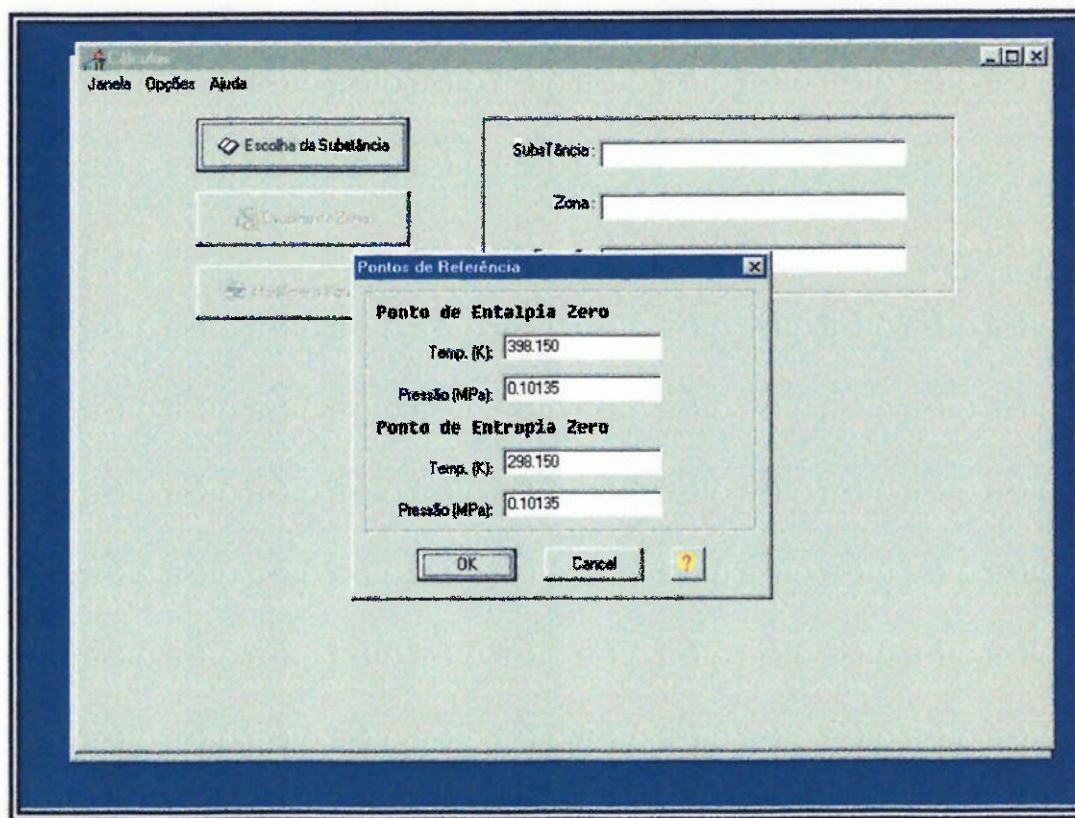


Figura 9- Janela de Modificação dos Pontos de Referência

A sequência de habilitação de botões também é a mesma, após escolhida a substância, o usuário deve selecionar a zona e, caso deseje, modificar a equação. As janelas abertas são as já descritas anteriormente.

Ao escolher a zona o usuário habilita também as opções para escolha de alguns parâmetros da tabela a ser construídas. Os parâmetros disponíveis são os seguintes:

- ♦ Zona de Saturação:
 - ◊ Baseada na temperatura de saturação:
 - Temperatura inicial;
 - Temperatura final;
 - Intervalo entre temperaturas;
 - ◊ Baseada na pressão de saturação:
 - Pressão inicial;
 - Pressão final;
 - Intervalo entre pressões;

P(MPa) T(K)		90.70	111.00	131.00	151.00	171.00	190.55
	$v(m^3/kg)$		4.8700	5.7569	6.6417	7.5254	8.3885
0.0118	$h(kJ/kg)$		-353.682	-321.418	-287.868	-252.989	-217.588
	$s(kJ/kg.K)$		-0.190	-0.009	0.156	0.308	0.448
	$v(m^3/kg)$					0.0330	0.0410
2.0118	$h(kJ/kg)$					-320.487	-267.747

Figura 10 - Tela referente a Tabelas

♦ Zona de Vapor Superaquecido ou Líquido Comprimido:

- ♦ Temperatura inicial;
- ♦ Temperatura final;
- ♦ Intervalo entre temperaturas;
- ♦ Pressão inicial;
- ♦ Pressão final;
- ♦ Intervalo entre pressões;

A determinação dos parâmetros acima é feita através de botões “Up and Down” que possibilitam a modificação de acordo com algumas regras pré-estabelecidas.

Os valores possíveis para os intervalos de temperatura (em Kelvin) e pressão (em MPa) são:

- ♦ Temperatura: 1, 5, 10, 15, 20, 30 e 50.

- ♦ Pressão: 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1, 2 e 5.

A temperatura e a pressão variam de acordo com o intervalo, ou seja, quando pressionada a flecha “Up” a temperatura aumenta o equivalente ao intervalo entre temperaturas selecionado, o mesmo acontece com a tecla “Down” e para a pressão.

De acordo com a zona escolhida os limites de pressão e temperatura são impostos ao usuário, assim se a zona escolhida for a de saturação, não é possível selecionar uma temperatura superior à crítica ou inferior a temperatura do ponto triplo.

Uma vez estabelecidos os parâmetros acima pressiona-se o botão “OK” e a tabela é construída.

A tabela contém os seguintes itens:

- ♦ Zona de Saturação:
 - ♦ Temperatura de saturação;
 - ♦ Pressão de saturação;
 - ♦ Volume específico do líquido e do vapor;
 - ♦ Entalpia do líquido e do vapor;
 - ♦ Entropia do líquido e do vapor;
 - ♦ Fator de acentricidade do líquido e do vapor;
- ♦ Zona de Vapor Superaquecido ou Líquido Comprimido:
 - ♦ Temperatura;
 - ♦ Pressão;
 - ♦ Entalpia;
 - ♦ Volume específico;
 - ♦ Entropia;

Finalmente o usuário poderá salvar a tabela através do botão “Salvar Tabela” o qual chamará uma tela padrão do Windows para escolha de arquivos. método utilizado consiste em salvar a tabela construída pelo usuário em dois arquivos com o mesmo nome, mas com extensões diferentes. São, então, criados um arquivo *.pcp que possibilitará ao usuário reabrir a tabela no próprio programa, através da sub-opção “Abrir Tabela” do menu da Tela Inicial, e um arquivo *.txt que permitirá ao usuário a abertura do arquivo em qualquer editor de texto ou de tabelas, como WinWord ou Excel, e posterior manipulação e impressão dos dados.

Basicamente, os dois arquivos são arquivos texto, no entanto, o arquivo .pcp possui algumas informações extras como número de linhas e de colunas, enquanto que

o arquivo .txt tem uma apresentação, com legendas, unidades, etc. que facilitam o entendimento do arquivo por um leigo.

A opção “Abrir Tabela” chamará uma tela semelhante aquela utilizada para determinar o nome do arquivo onde será salva a tabela, agora o arquivo selecionado deverá conter a tabela a ser aberta.

5.10. CONSTRUÇÃO DE GRÁFICOS

Outra opção oferecida pelo programa é a construção de diagramas termodinâmicos. Esta opção pode ser acessada através do item Gráficos | Construir Novo Gráfico do menu da Tela Inicial.

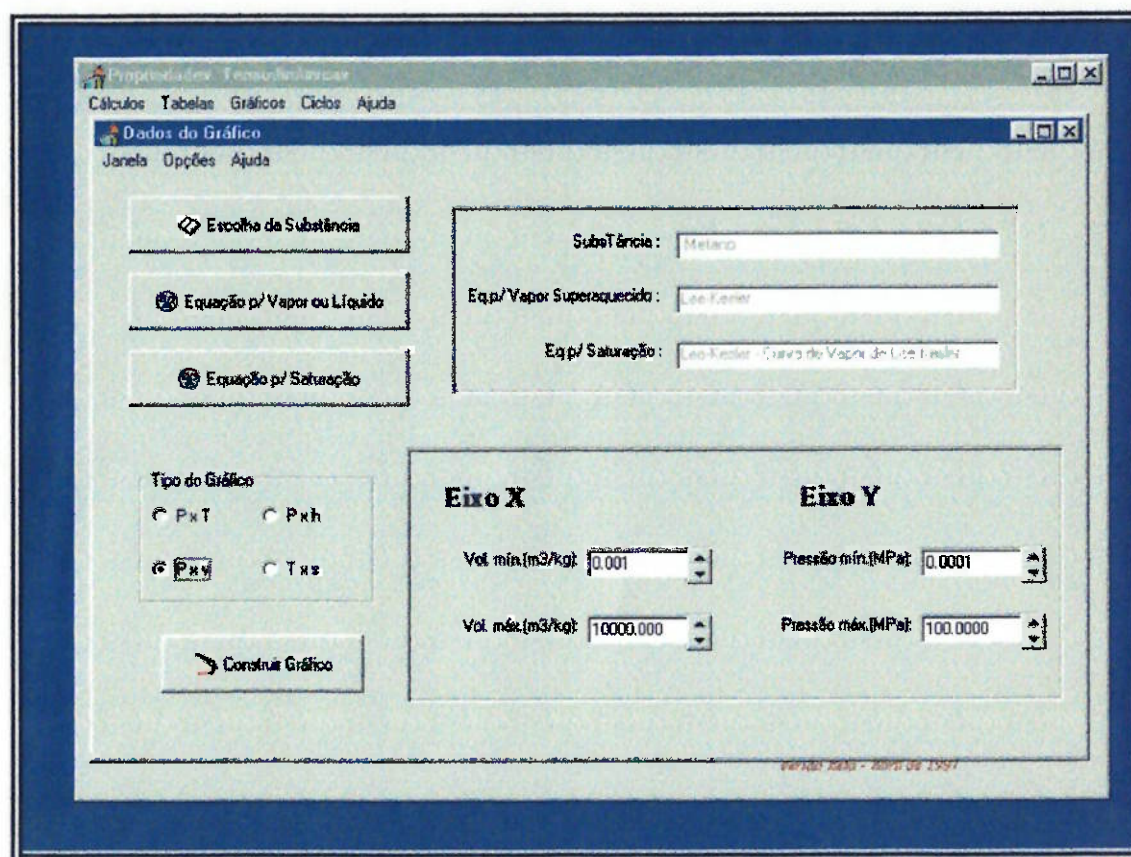


Figura 11 - Tela de Gráficos

Clicando sobre este item, a Tela de Gráficos (Figura 11) é automaticamente ativada. Inicialmente aparecerá sobre a tela apenas os botões para escolha de substância e das equações na zona de saturação e de vapor ou líquido, sendo que estes

dois últimos estão desativados. O usuário deve então seguir a sequência de dados indicada abaixo:

- Escolha da substância através de botão específico - por padrão as equações escolhidas para zona de saturação e de vapor ou líquido são, respectivamente, Lee-Kesler - Curva de Saturação de Lee-Kesler, e Lee-Kesler.
- Modificar as equações - apenas se desejado.
- Escolha do tipo de gráfico - são oferecidos quatro tipos: $P_{\text{sat}} \times T_{\text{sat}}$, $P \times v$, $P \times h$ e $T \times s$.
- Escolha dos limites do gráfico - através de botões do tipo "Up and Down", entre os limites máximos e mínimos estabelecidos pelo programa.
- Construção do gráfico - através de botão específico.

Os limites máximos e mínimos impostos pelo programa são calculados de modo a respeitar os limites de validade da equação de Lee-Kesler ($P=10 \cdot P_c$ e $T=4 \cdot T_c$) e da abrangência do programa (Zona Líquida, de Saturação e de Vapor Superaquecido); assim a temperatura poderá variar desde a temperatura no ponto triplo até 4 vezes a temperatura de saturação, o mesmo é válido para pressão. Para as demais propriedades (volume, entalpia, e entropia) o programa utiliza os valores máximos e mínimo encontrados nesta faixa.

Uma vez acionado o botão de construção de gráficos, uma nova tela é acionada e dá-se início a construção dos dados, que é feita na seguinte sequência:

1. moldura da janela;
2. linhas de grade;
3. curva de saturação;
4. isotérmicas ou isobáricas;

Como é possível verificar na Figura 12, a janela onde ocorre a construção do diagrama possui os seguintes elementos:

- Menu Principal;
- Botão Novos Dados: volta a tela de definição das características do gráfico;
- Botão Imprimir: imprime o gráfico construído na impressora definida como padrão;
- Legenda: indica o significado das cores das diversas linhas (ver Figura 13);

O menu possui as seguintes opções:

- Janela - possui as seguintes sub-opções:

- ◊ Voltar ao Menu Principal: volta a Tela Inicial para escolha de uma nova opção;
- ◊ Sair do Programa: sai do programa após confirmação do usuário;

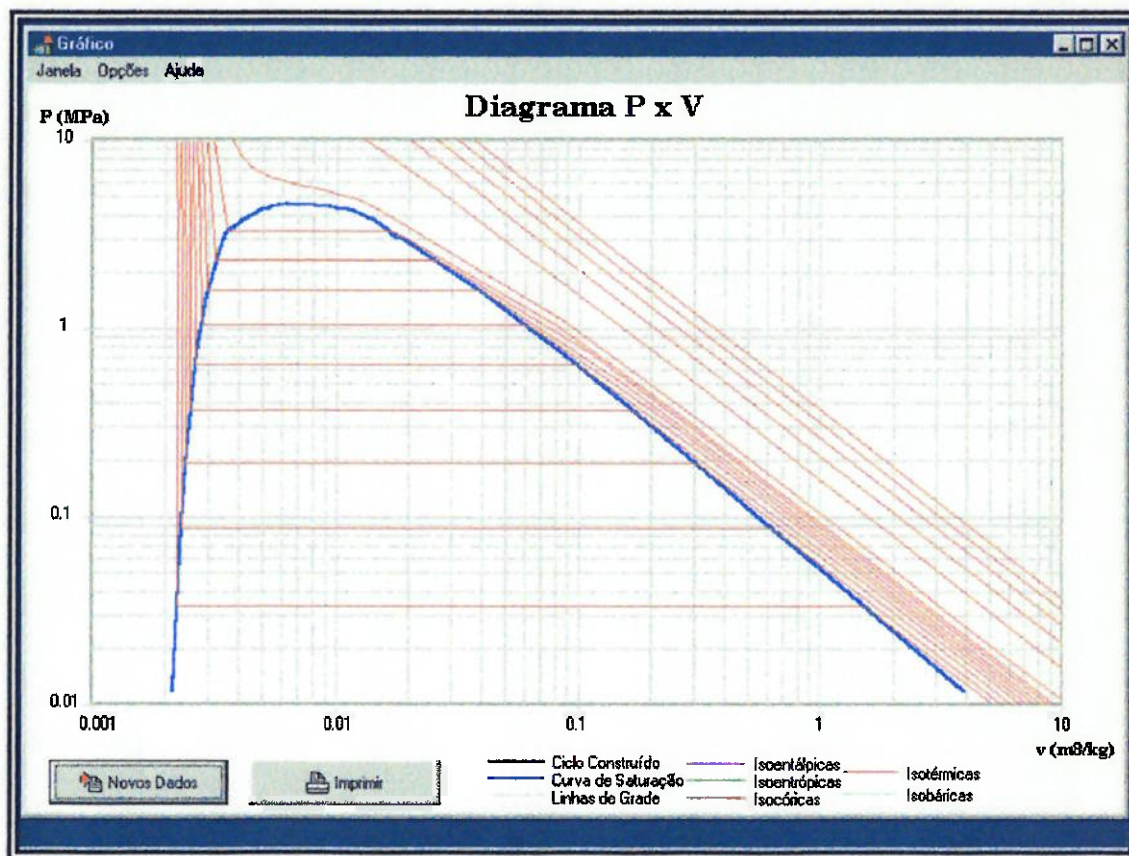


Figura 12 - Janela de Construção de Gráficos

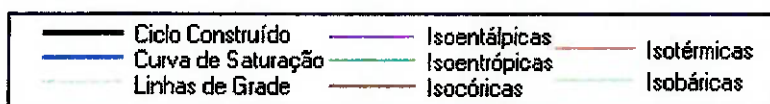


Figura 13 - Legenda de Cores

- Opções - possibilita ao usuário acrescentar ou retirar curvas do gráfico. São oferecidas as seguintes sub-opções:
 - ◊ Linhas de Grade: retira e coloca as linhas de grade, deixando sempre a legenda dos eixos - inicialmente está selecionada;
 - ◊ Curva de Saturação: retira e coloca a curva de saturação - inicialmente está selecionada;
 - ◊ Isotérmicas: retira e coloca as isotérmicas - inicialmente está selecionada;
 - ◊ Isobáricas: retira e coloca as isobáricas - inicialmente está selecionada;

- ◊ Isoentálpicas: retira e coloca as isoentálpicas - inicialmente não está selecionada;
- ◊ Isoentrópicas: retira e coloca as isoentrópicas - inicialmente não está selecionada;
- ◊ Isocóricas: retira e coloca as isocóricas - inicialmente não está selecionada;
- ◊ Legenda: retira e coloca os valores referentes as curvas construídas - inicialmente não está ativada, é recomendada principalmente para eventuais “zooms” em partes específicas dos gráficos;
- Ajuda - será tratado posteriormente

Como informado anteriormente, os tipos de gráficos oferecidos são:

- $P_{\text{sat}} \times T_{\text{sat}}$: é a curva de Pressão de Saturação da substância escolhida - tem como limites mínimo e máximo a temperatura do ponto triplo e a do ponto crítico.
- $P \times v$: aqui a pressão e o volume são apresentados em escala logarítmica para facilitar a visualização do gráfico.
- $P \times h$: neste gráfico apenas a pressão apresenta escala logarítmica, enquanto a entalpia apresenta escala normal.
- $T \times s$: nenhuma das duas propriedades são apresentadas em escala logarítmica.

Diversos exemplos de gráficos são apresentados no *Anexo 5*. Estes gráficos foram impressos através do botão Imprimir desta janela.

5.11. CICLOS

O último módulo adicionado ao programa foi o referente ao tratamento de ciclos termodinâmicos. Esta opção é acessada através do item Ciclos do menu da Tela Inicial.

Uma vez selecionado este item o usuário deve escolher entre alguns grupos oferecidos, cada grupo apresenta algumas opções de ciclo a serem tratados. São eles:

- Ciclos de Rankine:
 - ◊ Rankine Simples;
 - ◊ Rankine com Reaquecimento;
 - ◊ Rankine Regenerador;

- Ciclos de Refrigeração:
 - ◊ Compressão a Vapor;
 - ◊ Refrigeração a Ar;
- Ciclos Padrão a Ar 1:
 - ◊ Padrão a Ar de Carnot;
 - ◊ Padrão a Ar de Brayton;
 - ◊ Padrão a Ar de Otto;
 - ◊ Padrão a Ar de Stirling;
- Ciclos Padrão a Ar 2:
 - ◊ Padrão a Ar Diesel;
 - ◊ Padrão a Ar com Regenerador;
 - ◊ Padrão a Ar para Propulsão a Jato;

No menu da Tela Inicial é feita apenas a opção do grupo de ciclos escolhido, após esta opção são apresentados os esquemas de instalação de cada ciclo (ver Figura 14) e só então o usuário deve escolher o ciclo.

Uma vez selecionado o ciclo desejado, uma nova tela é criada, onde o usuário deverá fornecer alguns dados do ciclo escolhido (Figura 15).

O próximo passo após o fornecimento dos dados são os cálculos, o que é feito através do respectivo botão presente nesta janela. O programa fornece então as propriedades nos principais pontos do ciclo, que podem ser visualizados no esquema da instalação referente ao ciclo em questão, que também está presente na janela.

Caso algum dado de entrada não esteja compatível, o programa emite uma mensagem de erro.

Finalmente é possível visualizar o ciclo num diagrama termodinâmico apropriado. Para tanto, basta clicar sobre o botão “Construir Gráfico” (ver Figura 16).

A seguir será analisado cada um dos ciclos presentes no programa, indicando a rotina de cálculos, as entradas fornecidas pelo usuário, o esquema da instalação e as possíveis mensagens de erro.

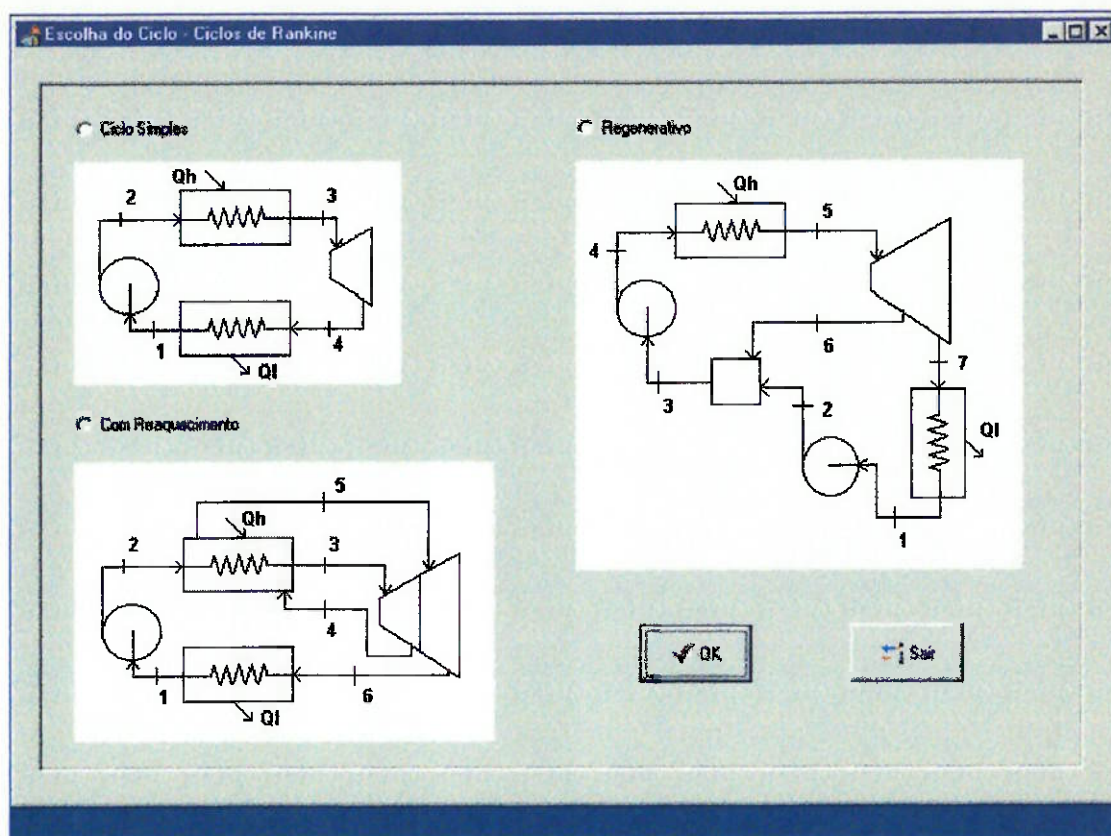


Figura 14 - Tela de Escolha de Ciclos

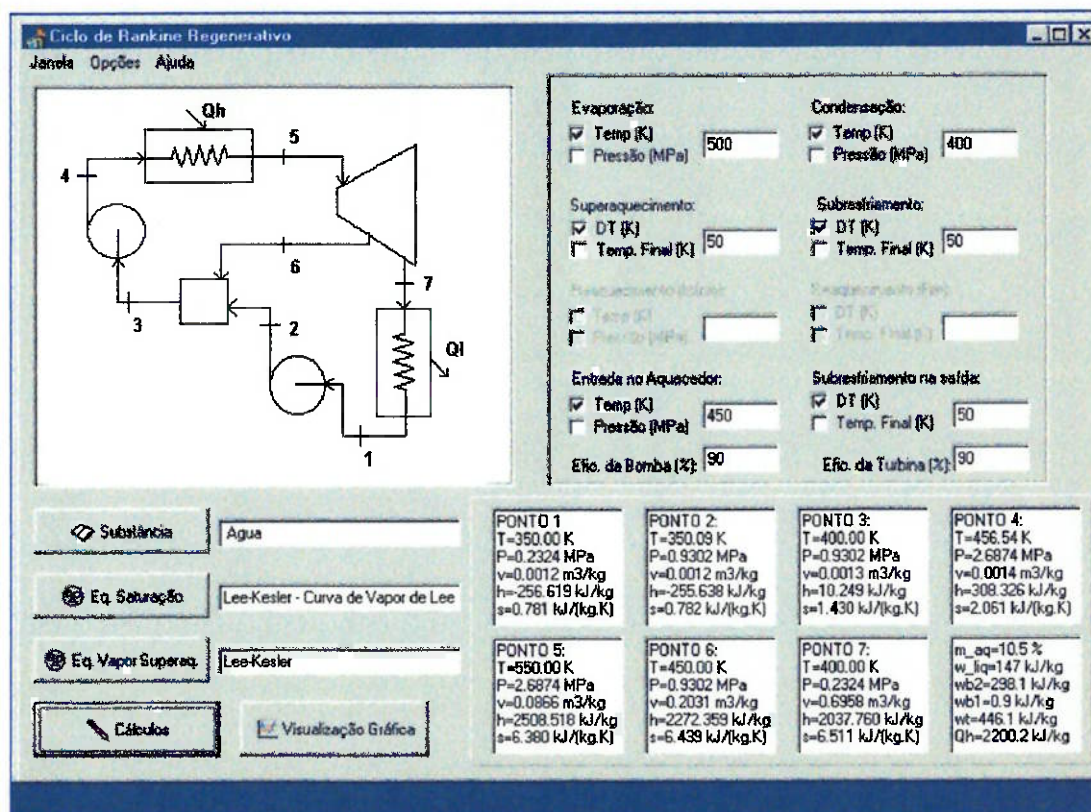


Figura 15 - Tela de Fornecimento dos Dados do Ciclo

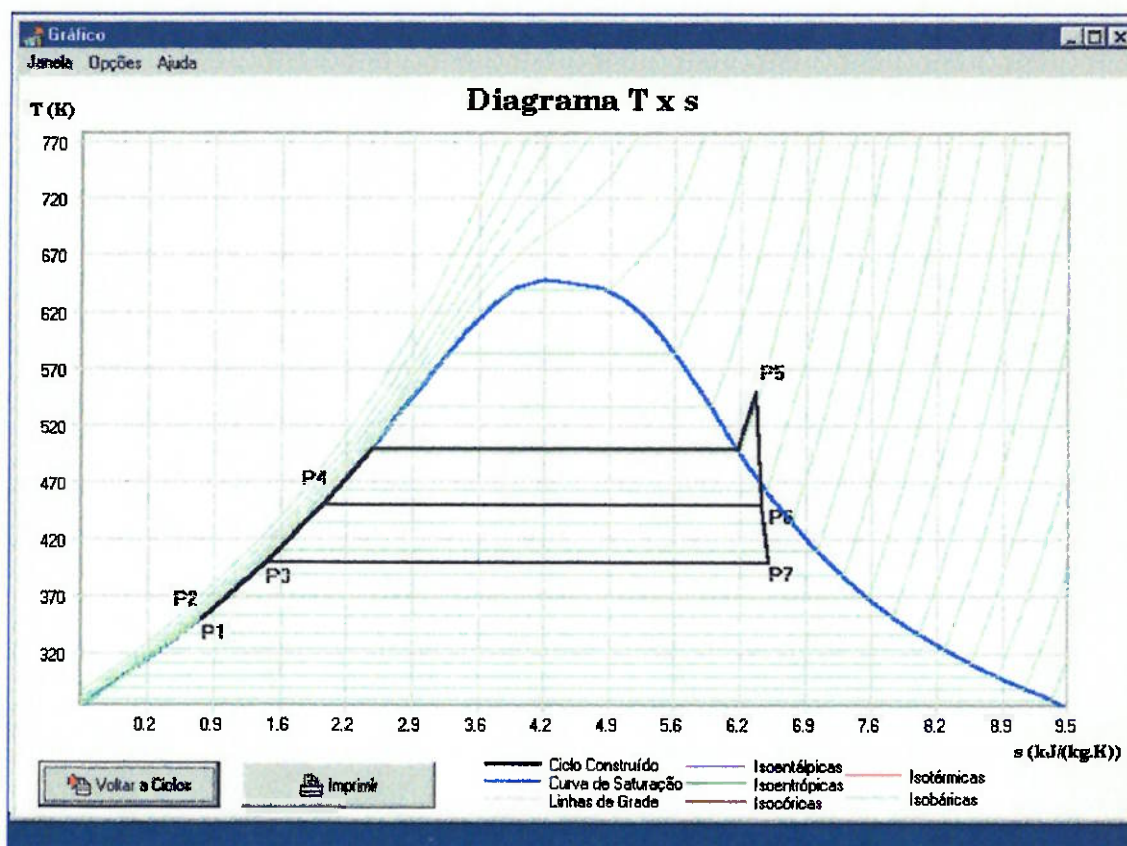


Figura 16 - Representação Gráfica do Ciclos

5.11.1.CICLOS DE RANKINE

CICLO DE RANKINE SIMPLES

Dos ciclos a vapor, este é o mais simples. Ele é representado pela figura 17:

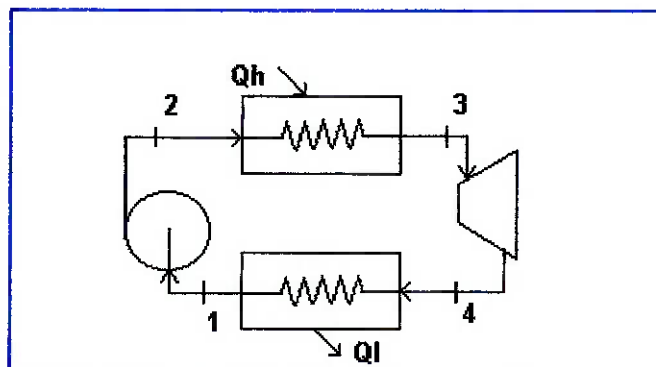


Figura 17 - Ciclo de Rankine Simples

O ciclo de Rankine é composto pelos seguintes processos:

- 1 - 2: Processo de bombeamento adiabático reversível, na bomba;
- 2 - 3: Troca de calor a pressão constante, na caldeira;
- 3 - 4: Expansão adiabática reversível, na turbina;
- 4 - 1: Troca de calor a pressão constante, no condensador;

Para se aproximar mais da realidade, estão previstas também as seguintes possibilidades:

- superaquecimento do vapor na saída da caldeira;
- subresfriamento do líquido na saída do condensador;
- eficiência da bomba e da turbina diferentes de 100%;

Os dados do ciclo que devem ser fornecidos pelo usuário para este ciclo são:

- temperatura ou pressão de evaporação;
- temperatura ou pressão de condensação;
- grau de superaquecimento (ΔT em Kelvin) ou temperatura final na saída da caldeira;
- grau de subresfriamento (ΔT em Kelvin) ou temperatura final na saída do condensador;
- eficiência da bomba e da turbina;

Após a entrada dos dados o programa calcula as propriedades dos pontos 1, 2, 3 e 4, referentes a figura 17.

De acordo com os dados de entrada, o programa pode emitir as seguintes mensagens de erro:

- Erro causado pelo dado de entrada da zona de evaporação!
- Erro causado pelo dado de entrada da zona de condensação!
- Erro causado pelo dado de entrada para superaquecimento!
- Erro causado pelo dado de entrada para subresfriamento!
- Erro causado pelo dado de entrada da eficiência da bomba!
- Erro causado pelo dado de entrada da eficiência da turbina!
- A temperatura da zona de evaporação não pode ser inferior a da zona de condensação!

É calculado, também, o trabalho líquido, o trabalho da bomba, o trabalho da turbina, o calor rejeitado, o calor fornecido e o rendimento final do ciclo.

Finalmente, é possível construir-se o ciclo no diagrama $T \times s$ da substância escolhida, como pode-se verificar no Anexo 6, onde o gráfico foi obtido através da opção "Imprimir" do próprio programa.

CICLO DE RANKINE COM REAQUECIMENTO

O ciclo com reaquecimento foi desenvolvido para tirar vantagem do aumento de rendimento com o uso de pressões mais altas e ainda evitar umidade excessiva nos estágios da baixa pressão da turbina. Este ciclo está mostrado no diagrama abaixo (Figura 18):

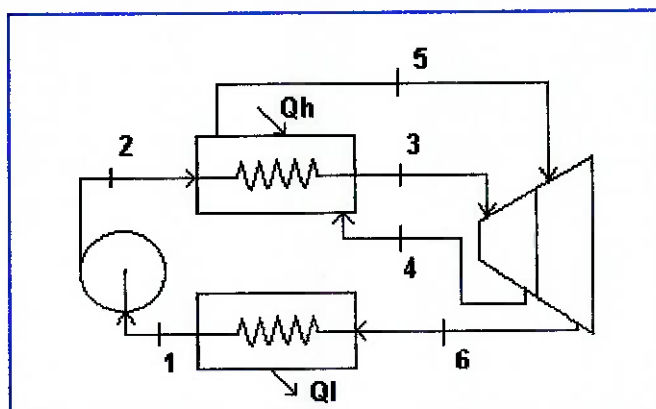


Figura 18 - Ciclo de Rankine com Reaquecimento

A característica singular desse ciclo é a expansão do vapor até uma pressão intermediária na turbina, e é então reaquecido na caldeira, após o que, expande-se na turbina até a pressão de saída.

O ganho no rendimento é muito pequeno, mas a principal vantagem do ciclo é a diminuição do teor de umidade, nos estágios de baixa pressão da turbina, a um valor seguro.

Neste caso os dados de entrada são:

- temperatura ou pressão de evaporação;
- temperatura ou pressão de condensação;
- grau de superaquecimento (ΔT em Kelvin) ou temperatura final na saída da caldeira;

- grau de subresfriamento (ΔT em Kelvin) ou temperatura final na saída do condensador;
- eficiência da bomba e da turbina;
- temperatura ou pressão onde começa o reaquecimento;
- temperatura final ou variação da temperatura (ΔT em Kelvin), no final do reaquecimento;

As possíveis mensagens de erro a serem emitidas pelo programa após a entrada dos dados são as mesmas do Ciclo de Rankine Simples com a adição das seguintes mensagens:

- Erro causado pelo dado de entrada do início do reaquecimento!
- Erro causado pelo dado de entrada do fim do reaquecimento!

Os resultados apresentados são as propriedades nos diversos pontos indicados na figura 18, os trabalhos realizados, os calores trocados e o rendimento final.

CICLO DE RANKINE REGENERATIVO

Esta é uma outra variação do ciclo de Rankine (Figura 19) e envolve o uso de aquecedores da água de alimentação e a extração de uma parte do vapor após ser expandido parcialmente na turbina.

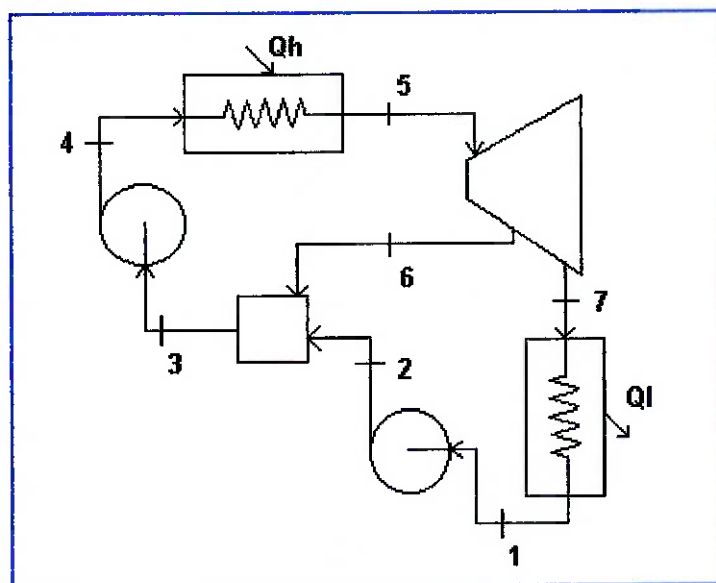


Figura 19 - Ciclo de Rankine Regenerativo

Basicamente, o ciclo funciona da seguinte maneira:

- O vapor entra na turbina no estado 5;
- Após a expansão até o estado 6, parte do vapor é extraído e entra no aquecedor da água de alimentação;
- O vapor não extraído expande-se na turbina até o estado 7, e é então levado ao condensador;
- Este condensado é bombeado para o aquecedor da água de alimentação (1 - 2);
- Os dois fluidos se misturam no aquecedor, e obtém-se líquido saturado no estado 3;
- O líquido é bombeado da pressão intermediária até a pressão da caldeira, no estado 4;
- Finalmente o líquido entra na caldeira, de onde sai no estado 5.

Observa-se que a proporção de vapor extraído deve ser exatamente o suficiente para fazer com que o líquido que deixa o aquecedor esteja saturado.

O ponto significativo do ciclo é o aumento da temperatura média na qual o calor é fornecido, o que implica no aumento do rendimento.

Neste caso os dados de entrada são:

- temperatura ou pressão de evaporação;
- temperatura ou pressão de condensação;
- grau de superaquecimento (ΔT em Kelvin) ou temperatura final na saída da caldeira;
- grau de subresfriamento (ΔT em Kelvin) ou temperatura final na saída do condensador;
- eficiência da bomba e da turbina;
- temperatura ou pressão onde na entrada do aquecedor;
- temperatura final ou variação da temperatura (ΔT em Kelvin), na saída do aquecedor;

As possíveis mensagens de erro a serem emitidas pelo programa após a entrada dos dados são as mesmas do Ciclo de Rankine Simples com a adição das seguintes mensagens:

- A temperatura da zona de condensação, do aquecedor e da zona de evaporação devem estar em ordem crescente!

- Erro causado pelo dado de entrada na entrada aquecedor!
- Erro causado pelo dado de entrada na saída do aquecedor!

Os resultados apresentados são as propriedades nos diversos pontos indicados na figura 19, os trabalhos realizados, os calores trocados e o rendimento final.

5.11.2.CICLOS PADRÕES A AR

Entre os diversos tipos de ciclos padrões a ar, o programa procurou abordar os mais importantes, principalmente do ponto de vista didático.

No tratamento de dados e na construção de gráficos existem algumas diferenças significativas em relação aos ciclos a vapor.

Aproximação por Gases Perfeitos

O cálculo das propriedades do ar foram feitas considerando o ar um gás perfeito. Foram utilizadas as seguintes expressões:

$$P \cdot v = R \cdot T \quad (5.1)$$

$$h = C_{po} \cdot (T - T_{ref}) \quad (5.2)$$

$$s = C_{po} \cdot \ln(T/T_{ref}) - R \cdot \ln(P/P_{ref}) \quad (5.3)$$

onde

P, v, T, h, s - são pressão, volume, temperatura, entalpia e entropia do ponto a ser determinado;

T_{ref}, P_{ref} - são temperatura e pressão do ponto onde considera-se entropia e entalpia nulas;

C_{po} - calor específico a pressão constante - adotou-se um valor constante médio independente da temperatura.

A aproximação por gases perfeitos foi considerada razoável, uma vez que é adotada nos principais livros didáticos de termodinâmica.

Apresentação Gráfica

Após a realização dos cálculos e a apresentação das propriedades volumétricas e termodinâmicas nos principais pontos do ciclo, feita de modo semelhante àquela dos ciclos a vapor, também é possível a visualização gráfica do que está ocorrendo, para tanto, utilizou-se uma nova tela.

Tela de Gráficos - Gases Perfeitos

A tela é dividida em dois blocos verticais, no bloco da esquerda é construído o diagrama $T \times s$ e no outro bloco o diagrama $P \times v$, apresentado em escala logarítmica para facilitar a visualização.

São, então, construídas as isobáricas, as isocóricas, as isotermas e as isentrópicas que passam pelos principais pontos do ciclo analisado.

Finalmente, é representado o ciclo em ambos os diagramas, permitindo assim uma melhor compreensão do que está ocorrendo.

Um exemplo de ciclo utilizando gás perfeito é apresentado abaixo (Figura 20).

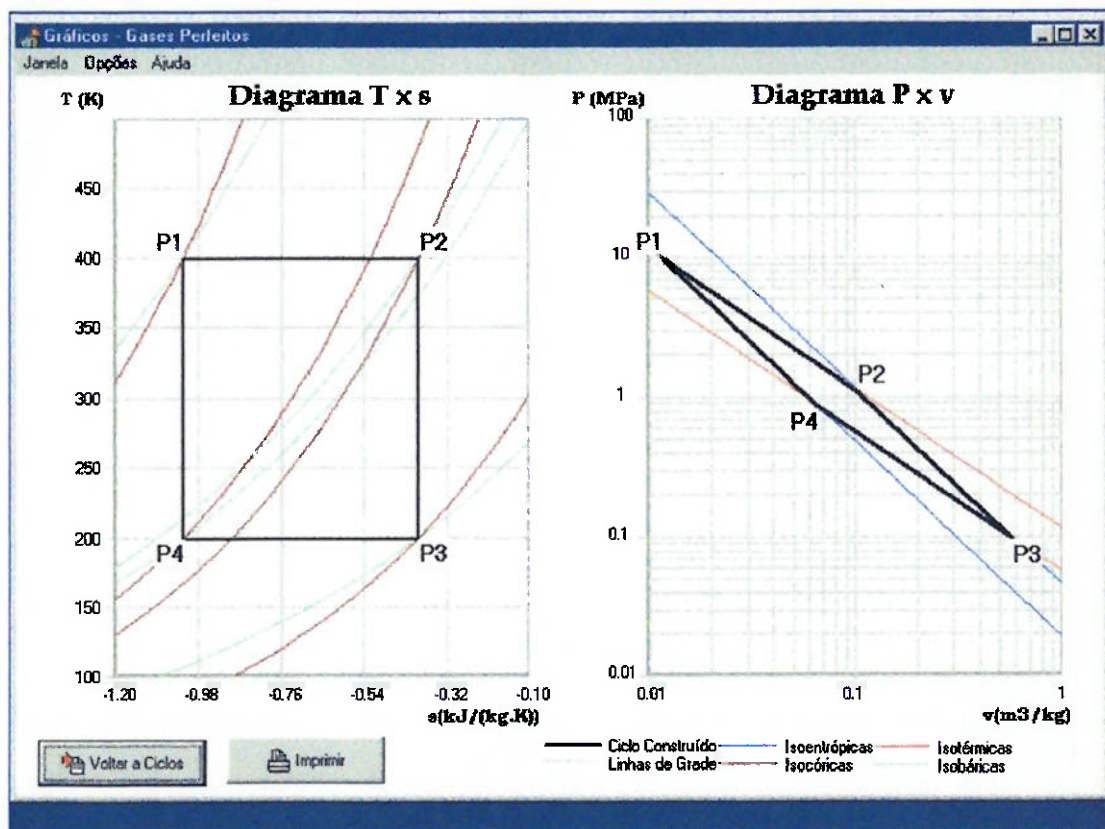


Figura 20 - Tela de Construção de Gráficos para Gases Perfeitos

Como para gráficos de substâncias reais, aqui também é possível imprimir o gráfico construído, diversos exemplos são apresentados no Anexo 6.

CICLO PADRÃO A AR DE CARNOT

O ciclo de Carnot é representado pela figura abaixo (Figura 21):

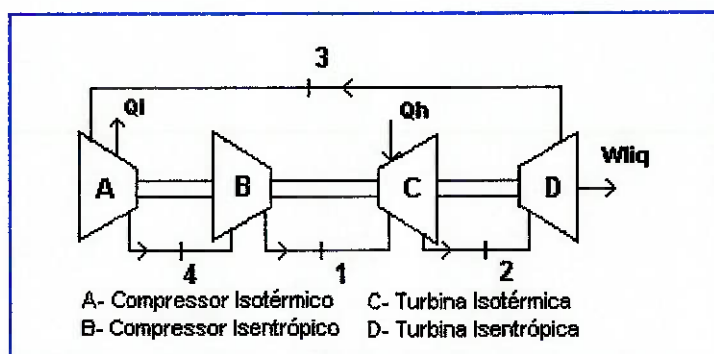


Figura 21 - Ciclo Padrão a Ar de Carnot

Como é possível observar, ele é composto dos seguintes processos:

- 1-2: Expansão em turbina isotérmica;
- 2-3: Expansão em turbina isentrópica;
- 3-4: Compressão em compressor isotérmico;
- 4-1: Compressão em compressor isentrópico;

Um fato importante a ser observado é que o rendimento do ciclo de Carnot depende apenas da relação entre as temperaturas do ciclo. Outra variável importante é a quantidade de calor transferida ao fluido durante o processo, pois, mantendo a temperatura máxima do ciclo constante e aumentando a troca de calor, ocorre uma variação maior do volume durante o ciclo o que, por sua vez, provoca uma pressão média efetiva menor num motor alternativo. Na prática, isto não é desejável pois a pressão efetiva poderia ser tão baixa que superaria por pouco as forças de atrito.

Outro fator a tornar impossível a execução prática do ciclo é a troca de calor durante os processos isotérmicos, de compressão e expansão, pois não existe máquina que opere sob tais condições.

Para o ciclo de Carnot, os dados de entrada são:

- Temperatura máxima no ciclo: temperatura atingida pelo fluido na saída do compressor isentrópico;

- Temperatura mínima no ciclo: temperatura atingida pelo fluido na saída da turbina isoentrópica;
- Pressão máxima no ciclo: pressão atingida pelo fluido na saída do compressor isoentrópico;
- Pressão mínima no ciclo: pressão atingida pelo fluido na saída da turbina isoentrópica;

As possíveis mensagens de erro emitidas pelo programa após a entrada de dados são:

- A temperatura máxima não pode ser menor que a mínima!
- A pressão máxima não pode ser menor que a mínima!
- Para estes dados de entrada o valor mínimo da Pressão máxima é MPa, caso contrário a pressão na saída da turbina isotérmica será maior que a de entrada!

CICLO PADRÃO A AR DE BRAYTON

O ciclo padrão a ar de Brayton é o ciclo ideal para turbina a gás simples. O ciclo é representado através da figura abaixo (Figura 22).

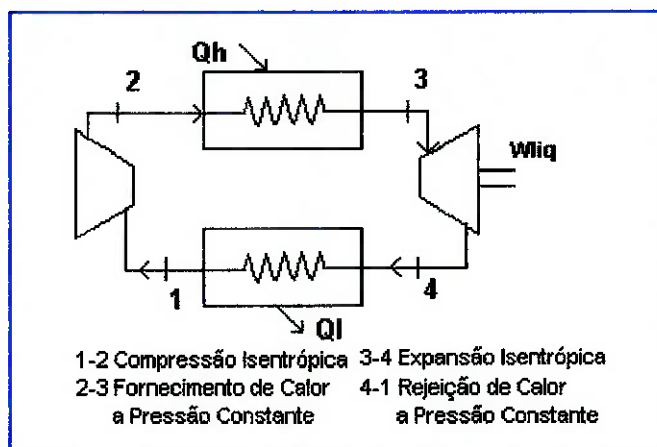


Figura 22- Ciclo Padrão a Ar de Brayton

Este ciclo é composto dos seguintes processos;

- 1-2: Compressão isoentrópica;
- 2-3: Fornecimento de calor a pressão constante;
- 3-4: Expansão isoentrópica;
- 4-1: Rejeição de calor a pressão constante;

No ciclo de Brayton o rendimento depende exclusivamente da relação entre as pressões do ciclo, isto pode ser facilmente compreendido através da comparação do diagrama $T \times s$ de dois ciclos operando com relações de pressão diferentes, aquele com maior relação de pressão apresenta claramente uma área maior sob a curva.

As principais diferenças entre a turbina a gás real e a ideal são a irreversibilidade nos processos do compressor e da turbina, e a perda de carga nas passagens do fluido e na câmara de combustão, onde ocorre o fornecimento de calor.

Outra característica importante do ciclo de Brayton é a grande quantidade de trabalho necessário no compressor, comparado com o trabalho da turbina. Isso é particularmente importante quando se considera o ciclo real, porque o efeito das perdas agrava ainda mais este fato, diminuindo o rendimento global do ciclo.

Para o ciclo de Brayton, os dados de entrada são:

- Temperatura máxima no ciclo: temperatura atingida pelo fluido na saída da câmara de combustão;
- Temperatura mínima no ciclo: temperatura atingida pelo fluido após a rejeição de calor;
- Pressão máxima no ciclo: pressão atingida pelo fluido na saída do compressor;
- Pressão mínima no ciclo: pressão atingida pelo fluido na saída da turbina;

As possíveis mensagens de erro emitidas pelo programa após a entrada de dados são:

- A temperatura máxima não pode ser menor que a mínima!
- A pressão máxima não pode ser menor que a mínima!
- Para estes dados de entrada o valor mínimo da Temperatura máxima é K, caso contrário a temperatura após o recebimento de calor (ponto 3) será inferior a anterior (ponto 2)!

CICLO DE OTTO

Ao contrário dos ciclos de potência baseados em processos que ocorrem em regime permanente, isto é, o trabalho não é realizado a pressão constante, no ciclo de Otto o trabalho é realizado a partir do movimento de um pistão num cilindro (ver

Figura 23), ou seja, o volume não é constante. O ciclo padrão de Otto é um ciclo ideal que se aproxima do motor de combustão interna de ignição por centelha.

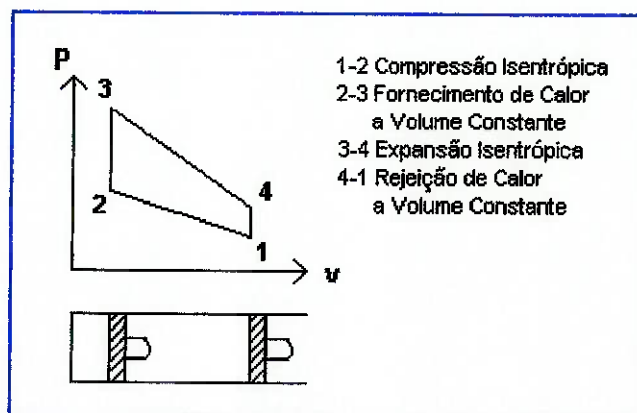


Figura 23 - Ciclo Padrão a Ar de Otto

O calor é transferido para o ar, a volume constante, enquanto o pistão está momentaneamente em repouso, o que, num motor real, corresponderia à ignição da mistura combustível - ar pela centelha, e a queima subsequente.

Um fato importante a ser ressaltado é que o rendimento deste ciclo é função apenas da relação de compressão, isto é, da relação entre os dois volumes nos quais ocorrem as trocas de calor, este fato também é válido para o motor de ignição por centelha.

As principais diferenças entre estes o ciclo ideal e o real são:

- Os calores específicos dos gases reais aumentam com a temperatura;
- O processo de combustão substitui o processo de transferência de calor a alta temperatura;
- Ocorrem perdas de carga durante os escoamentos nas válvulas;
- Existe uma transferência de calor significativa entre os gases e as paredes do cilindro;
- Existem irreversibilidades associadas aos gradientes de pressão e temperatura;

O ciclo de Otto é composto dos seguintes processos:

- 1-2: Compressão isentrópica;
- 2-3: Fornecimento de calor a volume constante;
- 3-4: Expansão isentrópica;
- 4-1: Rejeição de calor a volume constante;

Para o ciclo de Otto, os dados de entrada são:

- Temperatura máxima no ciclo: temperatura atingida pelo fluido após o fornecimento de calor;
- Temperatura mínima no ciclo: temperatura atingida pelo fluido após a rejeição de calor;
- Pressão máxima no ciclo: pressão atingida pelo fluido antes da expansão no pistão;
- Pressão mínima no ciclo: pressão atingida pelo fluido antes da compressão no pistão;

As possíveis mensagens de erro emitidas pelo programa após a entrada de dados são:

- A temperatura máxima não pode ser menor que a mínima!
- A pressão máxima não pode ser menor que a mínima!
- Para estes dados de entrada a temperatura após o recebimento de calor (ponto 3) será inferior a anterior (ponto 2)! Você deve aumentar a temperatura máxima do ciclo!

CICLO PADRÃO A AR DE STIRLING

O ciclo de Stirling é representado, no programa, pela Figura 24, e é composto pelos seguintes processos:

- 1-2: Compressão isotérmica;
- 2-3: Fornecimento de calor a volume constante;
- 3-4: Expansão isotérmica;
- 4-1: Rejeição de calor a volume constante;

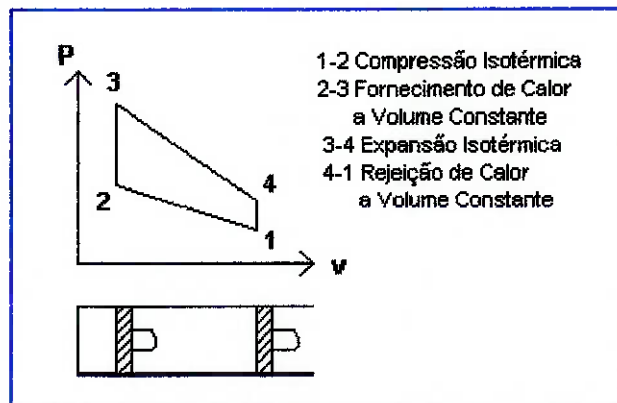


Figura 24 - Ciclo Padrão a Ar de Stirling

Os motores baseados no ciclo de Stirling tem sido desenvolvidos como motores de combustão externa com regeneração.

Observando um diagrama $T \times s$ deste ciclo podemos observar que todo o calor transferido ao ciclo é fornecido durante o processo de expansão isotérmica e correspondente a área embaixo da curva 2-3, este é igual ao calor rejeito, o que ocorre no processo 4-1.

Como todas as transferências de calor ocorrem em processos isotérmicos, a eficiência deste ciclo é igual a eficiência do ciclo de Carnot que opera entre as mesmas temperaturas.

Para o ciclo de Stirling os dados de entrada são os mesmos do ciclo de Otto.

As possíveis mensagens de erro emitidas pelo programa após a entrada de dados são:

- A temperatura máxima não pode ser menor que a mínima!
- A pressão máxima não pode ser menor que a mínima!

CICLO PADRÃO A AR A DIESEL

Este ciclo é representado pela figura abaixo (Figura 25):

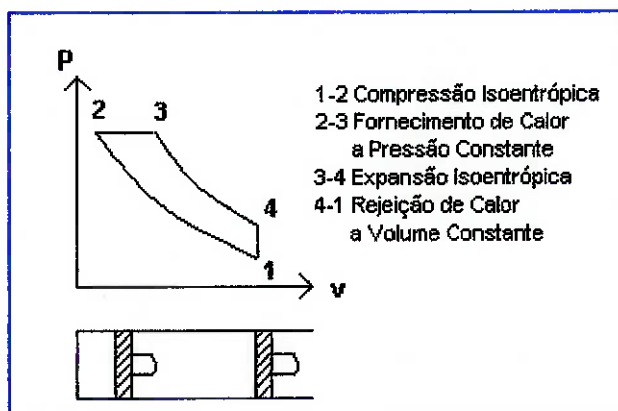


Figura 25 - Ciclo Padrão a Ar a Diesel

O ciclo é composto dos seguintes processos:

- 1-2: Compressão isentrópica;
- 2-3: Fornecimento de calor a pressão constante;

3-4: Expansão isentrópica;

4-1: Rejeição de calor a volume constante;

Como pode-se observar, neste ciclo, o calor é transferido ao fluido de trabalho a pressão constante. Este processo corresponde à injeção e queima de combustível no motor a Diesel real. Como o gás expande durante a transferência de calor, esta deve ser apenas o suficiente para manter a pressão constante. Quando se atinge o estado 3, a transferência de calor cessa e o gás sofre expansão isentrópica até que o pistão atinja o ponto motor inferior.

A rejeição de calor, como no ciclo de Otto, ocorre a volume constante e com o pistão no ponto morto inferior. Esta rejeição simula os processos de descarga e admissão do motor real.

Comparando este ciclo com o de Otto faz-se a seguinte observação: o ciclo de Otto possui um rendimento maior (o que pode ser observado através da comparação entre os diagramas $T \times s$), mas, na prática, o motor Diesel pode operar com uma relação de compressão maior do que no motor de ignição por centelha. A razão disso é que, num motor de ignição por centelha, comprimi-se uma mistura ar-combustível e a detonação torna-se um sério problema se for usada uma alta relação de compressão.

Para o ciclo a Diesel, os dados de entrada são os mesmos do ciclo de Otto e de Stirling.

As possíveis mensagens de erro emitidas pelo programa após a entrada de dados são:

- A temperatura máxima não pode ser menor que a mínima!
- A pressão máxima não pode ser menor que a mínima!
- Para estes dados de entrada o valor mínimo da Temperatura máxima é K, caso contrário a temperatura após o recebimento de calor (ponto 3) será inferior a anterior (ponto 2)!

CICLO PADRÃO A AR COM REGENERADOR

O rendimento do ciclo de turbina a gás pode ser melhorado pela introdução de um regenerador. O ciclo de turbina a gás com regenerador é representado pela figura abaixo:

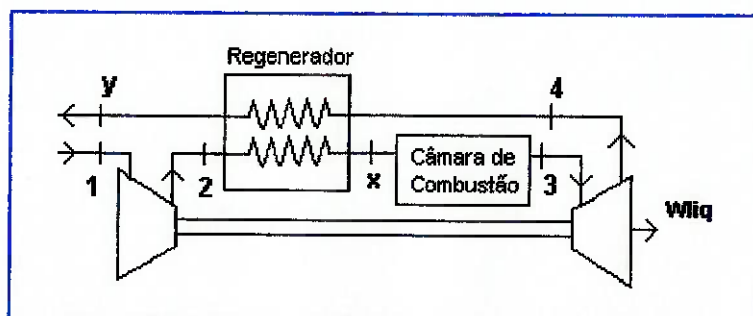


Figura 26 - Ciclo Padrão a Ar com Regenerador

O regenerador nada mais é que um trocador de calor de contracorrente que permite que o calor possa ser transferido dos gases de descarga da turbina para os gases a alta pressão que deixam o compressor. Assim a temperatura do gás na posição X pode ser igual a T4.

Neste caso, a transferência de calor da fonte externa é apenas necessária para aumentar a temperatura de Tx para T3.

A introdução do regenerador faz com que o rendimento térmico dependa não somente da relação de pressão, mas também da relação das temperaturas máximas e mínimas, e, ao contrário do ciclo de Brayton, diminua com o aumento da relação de pressão.

Tudo isso ocorre porque o calor transferido ao ciclo é igual ao trabalho realizado pela turbina, devido a igualdade entre as temperaturas T4 e Tx.

Os dados de entrada do ciclo com regenerador são os mesmos do ciclo de Brayton.

As possíveis mensagens de erro são:

- A temperatura máxima não pode ser menor que a mínima!
- A pressão máxima não pode ser menor que a mínima!

- Para estes dados de entrada o valor mínimo da Temperatura máxima é K, caso contrário a temperatura após o recebimento de calor (ponto 3) será inferior a anterior (ponto 2)!
- Para estes dados de entrada não é possível a utilização de um regenerador! Você deve aumentar a temperatura máxima do ciclo ou diminuir a pressão máxima.

CICLO PADRÃO A AR PARA PROPULSÃO A JATO

Este ciclo é representado pela Figura 27:

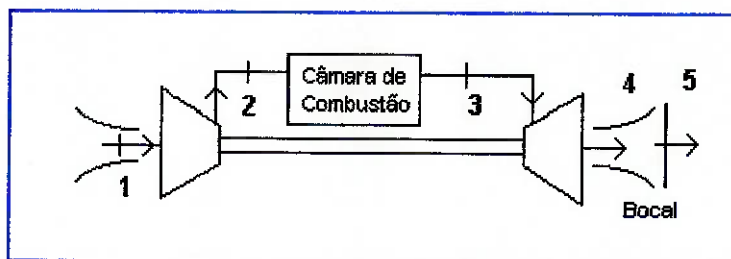


Figura 27 - Ciclo Padrão a Ar para Propulsão a Jato

Neste ciclo, o trabalho efetuado pela turbina é exatamente o suficiente para acionar o compressor.

Devido a este fato, a pressão de saída da turbina será superior a do meio envolvente e o gás poderá ser expandido num bocal até a pressão deste meio. Como os gases saem do bocal a alta velocidade, estes apresentam uma variação de quantidade de movimento e disto resulta um empuxo sobre o avião no qual o motor está instalado.

Este ciclo opera de modo similar ao do ciclo de Brayton e a expansão no bocal é modelada como adiabática e reversível.

Os dados de entrada deste ciclo são os mesmos do ciclo de Brayton.

As possíveis mensagens de erro são:

- A temperatura máxima não pode ser menor que a mínima!
- A pressão máxima não pode ser menor que a mínima!
- Para estes dados de entrada o trabalho realizado no compressor não é suficiente para acionar a turbina, resultando numa "temperatura negativa" em 4! Você deve aumentar a temperatura máxima do ciclo ou diminuir a pressão máxima.

5.11.3.CICLOS DE REFRIGERAÇÃO

O programa apresenta duas opções de ciclo de refrigeração, uma a vapor, utilizando a equação de Lee e Kesler, e uma a ar, utilizando as equações de gás perfeito.

CICLO DE COMPRESSÃO A VAPOR

O ciclo de compressão a vapor é representado pela seguinte figura (Figura 28):

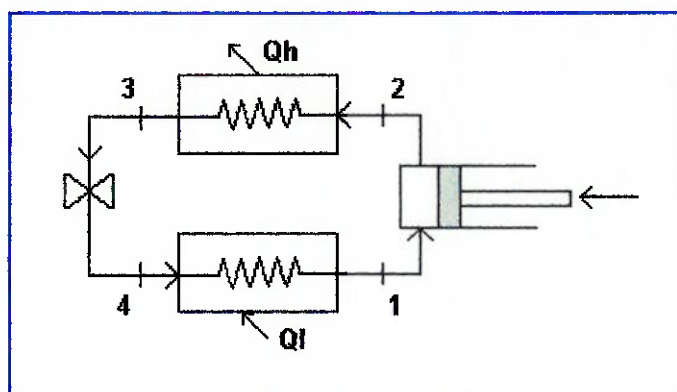


Figura 28 - Ciclo de Compressão a Vapor

Este ciclo é composto das seguintes etapas:

- vapor saturado a baixa pressão entra no compressor e sofre uma compressão adiabática reversível 1-2.
- calor é rejeitado à pressão constante no processo 2-3 e o fluido de trabalho deixa o condensador como líquido saturado.
- o fluido sofre um processo de estrangulamento adiabático 3-4.
- o fluido é evaporado à pressão constante no processo 4-1, completando o ciclo.

A semelhança entre esse ciclo e o ciclo de Rankine é evidente, pois é essencialmente o mesmo ciclo ao inverso, com exceção da válvula de expansão que substitui a bomba. Este processo de estrangulamento é irreversível, enquanto que o processo de bombeamento do ciclo de Rankine é reversível.

O desempenho de um ciclo frigorífero é dado em termos do coeficiente de eficácia, B , definido como a razão entre o calor rejeitado (Q_l) e o trabalho do compressor.

Os dados de entrada no programa são os mesmos do ciclo de Rankine simples.

Este ciclo pode apresentar as seguintes mensagens de erro:

- Erro causado pelo dado de entrada da zona de evaporação!
- Erro causado pelo dado de entrada da zona de condensação!
- Erro causado pelo dado de entrada para superaquecimento!
- Erro causado pelo dado de entrada para subresfriamento!
- Erro causado pelo dado de entrada da eficiência do compressor!
- A temperatura da zona de condensação, do aquecedor e da zona de evaporação devem estar em ordem crescente!

CICLO DE REFRIGERAÇÃO A AR

O ciclo padrão de refrigeração a ar é, essencialmente, o inverso do ciclo de Brayton. Ele é representado pela figura abaixo (Figura 29):

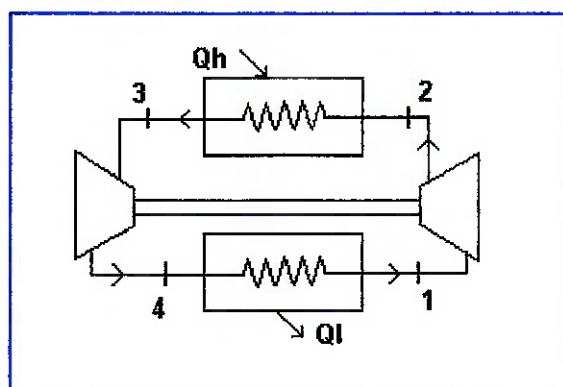


Figura 29 - Ciclo de Refrigeração a Ar

Após a compressão de 1 a 2, o ar é resfriado em consequência da transferência de calor para o meio ambiente, que está a uma certa temperatura T_3 . O ar é, então expandido, no processo 3 - 4, até a pressão de entrada no compressor e a temperatura cai para T_4 . O calor pode então ser transferido do meio a ser refrigerado ao ar, para que a temperatura atinja T_1 .

Na prática, esse ciclo tem sido utilizado para o resfriamento de avião, segundo um ciclo aberto. Saindo do expansor o ar frio é soprado diretamente para a cabina, proporcionando, assim, o efeito de resfriamento onde é necessitado.

Quando são incorporados trocadores de calor de contracorrente, pode-se obter temperaturas muito baixas. Esse é, essencialmente, o ciclo usado nas usinas de liquefação de ar a baixa pressão e em outros dispositivos de liquefação.

Os dados de entrada são os mesmos do ciclo de Brayton.

Este ciclo pode apresentar as seguintes mensagens de erro:

- A temperatura máxima não pode ser menor que a mínima!
- A pressão máxima não pode ser menor que a mínima!
- Para estes dados de entrada o valor mínimo da Temperatura máxima é K, caso contrário a temperatura após a rejeição de calor (ponto 3) será maior que a anterior (ponto 2)!

5.12. ADIÇÃO DA JANELA DE AJUDA

Em todas as telas do programa foi adicionado o item do menu Ajuda, contendo as principais informações teóricas e ajuda sobre o funcionamento do programa. A seguir serão relatadas, resumidamente, as informações contidas em cada caso.

Tela Principal

O item Ajuda do menu desta janela possui duas opções:

- Funcionamento do Programa: traz algumas informações sobre as opções oferecidas pelo programa (Cálculo de Propriedades em um Ponto, Construção de Tabelas, Construção de Gráficos e Estudo de Ciclos), como é possível observar da figura abaixo (Figura 30);
- Sobre...: contém informações genéricas sobre o programa, como nome, versão, nome da universidade, do orientador e do elaborador, de acordo com a figura abaixo (Figura 31);

Tela de Cálculos das Propriedades em um Ponto

O item Ajuda do menu desta janela possui as seguintes opções, que são apresentadas de modo semelhante a Ajuda da Tela Inicial:

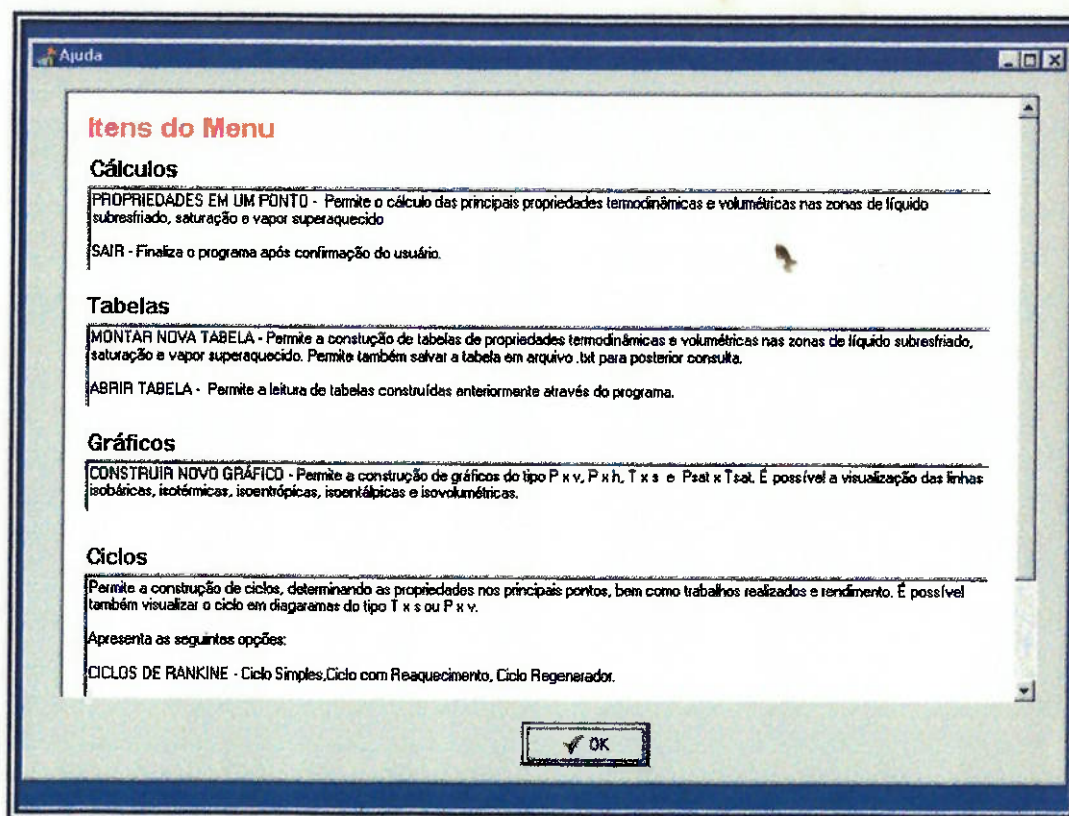


Figura 30 - Tela de Ajuda - Funcionamento do Programa

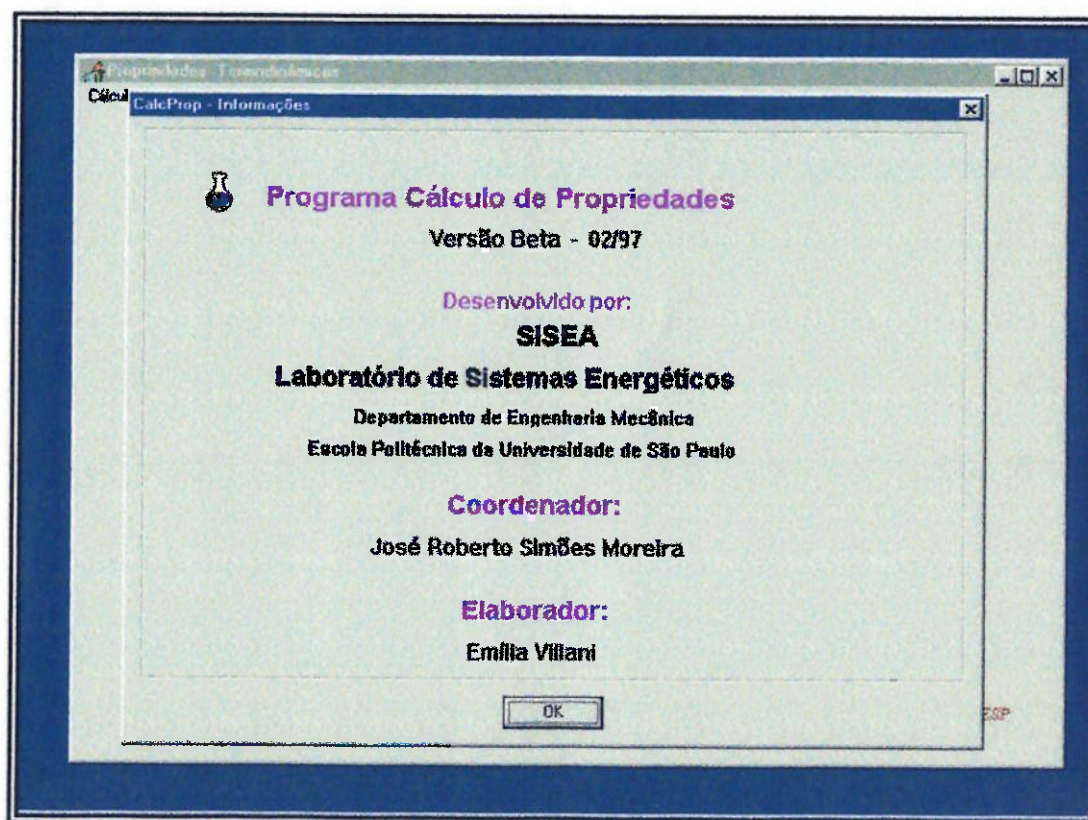


Figura 31 - Tela de Informações Sobre o Programa

- **Funcionamento do Programa:** traz algumas informações sobre o funcionamento e a finalidade de cada item da janela, como botões e menus, e o significado de eventuais mensagens de erro;
- **Informações Teóricas:** possui informações sobre a equação de Lee e Kesler e sobre os métodos utilizados na construção das diversas opções de curva de saturação;
- **Referências Bibliográficas:** possui as referências bibliográficas utilizadas no desenvolvimento teórico do programa, e que podem ser úteis a quem desejar se aprofundar no tema;

Tela de Construção de Tabelas

O item Ajuda do menu desta janela possui as seguintes opções, que são apresentadas de modo semelhante a Ajuda da Tela Inicial:

- **Funcionamento do Programa:** traz algumas informações sobre o funcionamento e a finalidade de cada item da janela, como botões e menus, e o método utilizado pelo programa para salvar tabelas;
- **Informações Teóricas:** possui informações sobre a equação de Lee e Kesler e sobre os métodos utilizados na construção das diversas opções de curva de saturação;
- **Referências Bibliográficas:** possui as referências bibliográficas utilizadas no desenvolvimento teórico do programa, e que podem ser úteis a quem desejar se aprofundar no tema;

Tela de Escolha de Substância

Esta tela não possui menu, para dar acesso a Ajuda foi adicionado um botão que é responsável pela ativação de uma nova tela contendo informações sobre o banco de dados de propriedades de substâncias.

Tela de Gráficos

O item Ajuda do menu desta janela possui a seguinte sub-opção:

- Funcionamento do Programa: chama a tela de ajuda e fornece informações sobre a função de cada item da janela em questão;

Tela de Ciclos

O item Ajuda do menu desta janela possui dois sub-itens:

- Ciclos: onde estão presentes as principais informações teóricas sobre cada tipo de ciclo (Figura 32);
- Sobre: onde estão presentes as principais informações sobre o programa, como nome, versão, elaborador, etc.;

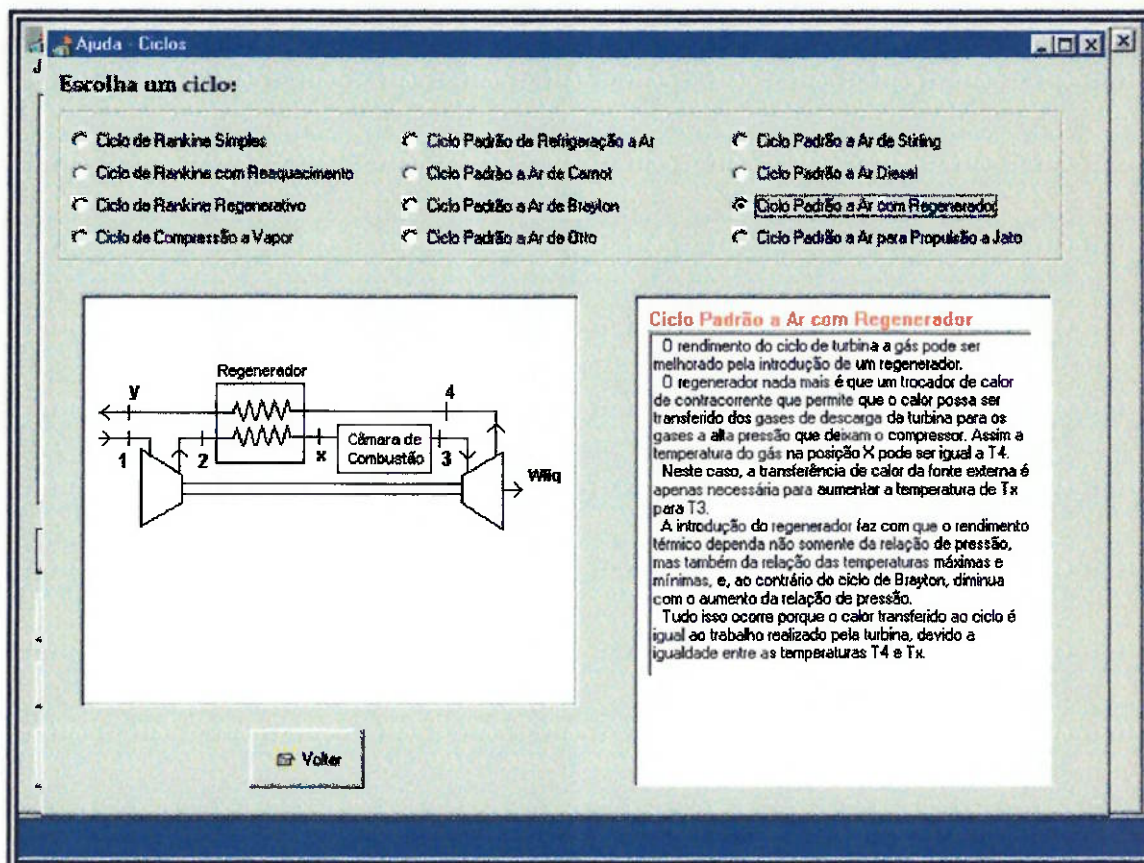


Figura 32 - Ajuda de Ciclos

6. REALIZAÇÃO DOS CÁLCULOS

6.1. INTRODUÇÃO

Atualmente o programa é formado por 42 “units” e um programa principal. A listagem das diversas “units” e do programa principal se encontram no Anexo 3.

Resumidamente, o conteúdo das “units” pode ser agrupado da seguinte forma:

- ♦ 18 “units” referentes as telas do programa;
- ♦ 2 “units” para manipulação de tabelas e arquivos;
- ♦ 20 “units” para realização dos cálculos;

Toda a parte referente aos cálculos é gerenciada pela “Unit Main”, em particular pelo “Procedure Principal” que, no caso de eventuais referencias até a análise do último grupo, será considerado como uma “caixa preta” cuja entrada é dois vetores, um contendo informações sobre os cálculos a serem realizados e outro as propriedades fornecidas pelo usuário. A saída é estes mesmos vetores modificados.

O vetor de informações, chamado de “s”, é composto por números inteiros, sua estrutura e os valores possíveis para cada componente do vetor estão elencados abaixo:

[1] - Zona

1. Zona de Líquido Saturado (não abordada pelo programa);
2. Zona de Saturação;
3. Zona de Vapor Superaquecido;

[2] - Caso (entradas fornecidas):

1. Saturação - Entrada: Tsat;
2. Saturação - Entrada: Psat;
3. Vapor Superaquecido - Entrada: T,P
4. Vapor Superaquecido - Entrada: P,v
5. Vapor Superaquecido - Entrada: T,v
6. Vapor Superaquecido - Entrada: P,h
7. Vapor Superaquecido - Entrada: P,s
8. Vapor Superaquecido - Entrada: T,s

9. Zona de Saturação - Entrada: T, v
10. Zona de Saturação - Entrada: P, v
11. Zona de Saturação - Entrada: P, h
12. Zona de Saturação - Entrada: T, s
13. Zona de Saturação - Entrada: P, s
14. Zona de Saturação - Entrada: T, x
15. Zona de Saturação - Entrada: P, x
16. Líquido Comprimido - Entrada: T, P
17. Líquido Comprimido - Entrada: P, v
18. Líquido Comprimido - Entrada: T, v
19. Líquido Comprimido - Entrada: P, h
20. Líquido Comprimido - Entrada: P, s
21. Líquido Comprimido - Entrada: T, s

[3] - Equação:

Zona de Saturação:

- 1- Equação de Lee-Kesler - M , todo da fugacidade
- 2- Equação de Lee-Kesler - Aproximação de Curva de Pressão de Vapor de Lee-Kesler
- 3- Equação de Lee-Kesler - Aproximação de Curva de Pressão de Vapor compilada por Reid e outros

Vapor Superaquecido ou Líquido Comprimido:

- 4- Lee-Kesler

[4] - Tamanho do sistema a ser resolvido - os valores possíveis serão abordados na parte de cálculos

[5] - Erro

- 0- Não ocorreu erro;
- 1- Zona errada;
- 2- Restrição da equação escolhida;
- 3- Restrição do método de resolução da equação escolhida;

O vetor de propriedades, chamado de “p”, formado por números reais, tem a seguinte estrutura:

1- T	6- Z	11- h_l
2- P	7- Z_l	12- h_v
3- v	8- Z_v	13- s
4- v_l	9- x (título)	14- s_l
5- v_v	10- h	15- s_v

6.2. “UNITS” REFERENTES AS TELAS

Em geral estas units possuem procedimentos referentes apenas aos eventos gerados pelos objetos presentes na respectiva janela. O nome do procedimento é a junção do nome do objeto com o evento que desencadeia a execução do procedimento.

As “units” referentes a tela são listadas a seguir:

- Unit1;
- Unit2;
- Unit3;
- Unit4;
- Unit5
- Unit6
- Unit7
- Unit8;
- Unit9
- Unit10
- Unit11
- Unit12
- Unit13
- UnitAboutBox;
- UnitAboutBox1;
- UnitAboutBox1;
- UnitAboutBox2;
- UnitAboutBox3;
- UnitInicio;

Como exemplo serão analisadas as cinco primeiras “units”, as demais seguem a mesma linha de funcionamento e a mesma estrutura.

Unit 1

Possui 4 procedimentos referentes as 4 opções do menu da “Tela Inicial”, todos eles são referentes ao evento de “um click” sobre o item do menu em questão. São eles:

- ♦ procedure Propriedadesemum ponto1Click - referente a opção “Propriedades em um ponto”, cria a “Tela de Cálculos de Propriedades em um Ponto”;
- ♦ procedure Sair1Click - referente a opção “Sair”, emite uma mensagem de confirmação e finaliza o programa caso a resposta seja positiva;

- ♦ procedure MontaNovaTabela1Click - referente a opção “Montar Nova Tabela”, cria a tela referente a tabelas;
- ♦ procedure AbrirTabela1Click - referente a opção “Abrir Tabela”, lê o nome do arquivo onde está a tabela, cria a “Tela referente a Tabelas” e executa o procedimento “Abrir_Tabela” da Unit Arquivo;

Unit 2

Possui 10 procedimentos, dos quais 3 são referentes as opções do menu, 4 aos botões presentes na tela, 2 a escolha das entradas a serem fornecidas e 1 a filtragem da entrada de dados.

Os procedimentos referentes ao evento de clicar em um item do menu são:

- ♦ procedure VoltaraoMenuPrincipal1Click - referente a opção “Voltar ao Menu Principal”, fecha a “Tela de Cálculo de Propriedades em um Ponto”, reativando assim a “Tela Inicial”;
- ♦ procedure SairdoPrograma1Click - referente a opção “Sair do Programa”, emite uma mensagem de confirmação e finaliza o programa caso a resposta seja positiva;
- ♦ procedure LimparDados1Click - atribui a todas as variáveis modificadas pelo usuário após a entrada na “Tela de Cálculo de Propriedades em um Ponto”, seu valor inicial;

Os procedimentos referentes ao evento de clicar em um botão são:

- ♦ procedure BitBtn1Click - referente ao botão “Escolha de Substância”, cria a “Tela de Escolha de Substancia”;
- ♦ procedure BitBtn2Click - referente ao botão “Escolha da Zona”, cria a “Tela de Escolha de Zona”, permitindo a visualização apenas da caixa de opção de zonas (ComboBox1);
- ♦ procedure BitBtn3Click - referente ao botão “Modificação da Equação”, cria a “Tela de Modificação de Equação”, permitindo a visualização apenas da caixa de opção referente a zona escolhida (s[1]) ;
- ♦ procedure BitBtn4Click - referente ao botão “OK”, inicialmente lê os valores dos dados de entrada e os armazena na posição correta do vetor “p”, de acordo com o caso escolhido (RadioBox1.ItemIndex ou RadioBox2.ItemIndex), em seguida faz as conversões de dados necessárias e chama o procedimento “Principal”, finalmente,

em caso de erro (s[5]), mostra a mensagem adequada, ou, na não ocorrência de erro, mostra os resultados obtidos, após convertê-los para o formato "string";

Os procedimentos de seleção de entradas são:

- ♦ procedure RadioGroup1Click - referente as opções da Zona de Vapor Superaquecido;
- ♦ procedure RadioGroup2Click - referente as opções da Zona de Saturação;

Cada caixa de seleção (RadioGroup) é visível apenas no caso da zona a qual se refere ter sido escolhida. Ao selecionar uma opção (clicando sobre ela) o painel para entrada de dados se torna visível, recebendo a indicação de onde deverá ser entrado cada dado, e s[2] recebe o valor apropriado.

Finalmente temos o procedimento de filtragem dos dados de entrada:

- ♦ procedure Edit4KeyPress - permite a digitação apenas dos seguintes caracteres: "0...9", ".", "-", "+".

Unit 3

Possui apenas 3 procedimentos referentes aos 3 botões presentes na tela. São eles:

- ♦ procedure BitBtn1Click - referente ao botão "Procurar", abre a janela de escolha do arquivo de propriedades (OpenDialog1), faz visível a tabela (StringGrid1) e carrega nela as constantes do arquivo através do procedimento Carrega_Const da Unit Data;
- ♦ procedure BitBtn2Click - referente ao botão "OK", realiza as seguintes tarefas
 - ◊ lê os valores da tabela referentes a substância escolhida e armazena em variáveis globais;
 - ◊ se foi adicionada uma nova substância, calcula os valores de A e B (Procedure Calc_AB - Unit Nova);
 - ◊ salva a tabela (Procedure Salva_Const - Unit Data);
 - ◊ atribui aos vetores do h_ref e s_ref (vetores de propriedades similares a "p") os valores de pressão e temperatura do ponto de referência do cálculo da entalpia e da entropia;
 - ◊ calcula o valor da pressão no ponto triplo (Pp);

- ◊ de acordo com a tela de onde foi inicialmente chamada esta tela (indicada pela variável global “nform”), realiza as modificações necessárias naquela tela para que o usuário possa passar a próxima etapa na realização dos cálculos.
- ♦ procedure BitBtn3Click - referente ao botão “Nova Substância”, permite a visualização de todos os campos da tabela e emite uma mensagem para o usuário não preencher os campos A e B;

Unit 4

Possui apenas um procedimento referente ao único botão existente na tela:

- ♦ procedure BitBtn1Click - referente ao botão “OK”, de acordo com a opção que está sendo feita (zona ou equação) associa valores a s[1] ou s[2] e realiza as modificações necessárias na tela inicial de onde esta tela foi chamada.

Unit 5

Possui 23 procedimentos, 3 referentes ao menu, 5 referentes aos 5 botões da tela, 2 referentes a escolha do tipo de tabela e o restante a modificação dos parâmetros da tabela.

Os procedimentos referentes ao menu são idênticos aqueles da Unit 2:

- ♦ procedure LimparDados1ClickClick;
- ♦ procedure SairdoPrograma1Click;
- ♦ procedure VoltaraoMenuPrincipal1Click;

Dos procedimentos referentes aos botões, os três primeiros também são idênticos aos da Unit 2, portanto somente os últimos dois serão analisados:

- ♦ procedure BitBtn1Click - referente ao botão “Escolha de Substância”;
- ♦ procedure BitBtn2Click - referente ao botão “Escolha da Zona”;
- ♦ procedure BitBtn3Click - referente ao botão “Modificação da Equação”;
- ♦ procedure BitBtn4Click - referente ao botão “OK”, verifica se os limites inferior e superior da tabela são consistentes, em caso negativo emite mensagem de erro e em caso afirmativo executa o procedimento Montar_Tabela (Unit Arquivo);

- ♦ procedure BitBtn5Click - referente ao botão “Salvar Tabela”, abre a janela de leitura do nome do arquivo onde deverá ser salva a tabela e salva a tabela através do procedure Salvar_Tabela (Unit Arquivo);

No caso de ser escolhida a zona de saturação existem dois tipos de tabela, um baseado na temperatura, onde são escolhidos as temperaturas limites inferiores e superiores da tabela e variação entre duas temperaturas, e outro baseado na pressão. No caso da zona de vapor superaquecido a tabela é baseada tanto na pressão como na temperatura.

A opção entre estes dois casos possíveis é feita através de dois “CheckBox” que são desabilitados no caso de vapor superaquecido.

- ♦ procedure CheckBox1Click - referente à pressão, associa $s[2]=2$;
- ♦ procedure CheckBox2Click - referente à temperatura, associa $s[2]=1$;

Finalmente temos os procedimentos que modificam os parâmetros da tabela a ser construída, através da associação de valores as seguintes variáveis globais:

- ♦ Tab_T1: limite de temperatura inferior;
- ♦ Tab_T2: limite de temperatura superior;
- ♦ dT: distância entre duas temperaturas;
- ♦ Tab_P1: limite de pressão inferior;
- ♦ Tab_P2: limite de pressão superior;
- ♦ dP: distância entre duas pressões;

Os valores possíveis de dT e dP estão armazenados em dois vetores (vet_T e vet_P) e a posição atual de dT ou dP dentro do vetor é indicada pelas variáveis varT e varP. Ao aumentar-se ou diminuir-se dT ou dP, avança-se ou recua-se dentro dos vetores. Ao aumentar-se ou diminuir-se os limites de temperatura ou pressão, adiciona-se ou subtrai-se dT ou dP. Os procedimentos referentes a estas modificações são:

- ♦ procedure SpinButton1DownClick;
- ♦ procedure SpinButton1UpClick;
- ♦ procedure SpinButton2DownClick;

- ♦ procedure SpinButton2UpClick;
- ♦ procedure SpinButton3DownClick;
- ♦ procedure SpinButton3UpClick;
- ♦ procedure SpinButton4DownClick;
- ♦ procedure SpinButton4UpClick;
- ♦ procedure SpinButton5DownClick;
- ♦ procedure SpinButton5UpClick;
- ♦ procedure SpinButton6DownClick;
- ♦ procedure SpinButton6UpClick;

6.3. “UNITS” REFERENTES A MANIPULAÇÃO DE TABELAS E ARQUIVOS DE PROPRIEDADES

Unit Data

É responsável pela manipulação do arquivo de propriedades, que é um arquivo texto. Basicamente, utiliza-se das funções de leitura e escrita em arquivos (“assignfile”, “reset”, “rewrite”, “closefile”, “write”, “read”, etc.) e do objeto StringGrid1 da Unit3, que representa a tabela a ser mostrada ao usuário, transportando valores do arquivo para tabela e vice-versa. Possui os seguintes procedimentos:

- ♦ Procedure Carrega_Const - carrega o arquivo na tabela da Tela 3 ;
- ♦ Procedure Salva_Const - carrega a tabela no arquivo de propriedades;
- ♦ Procedure Read_Const - associa as constantes da substância escolhida as variáveis globais utilizadas no decorrer dos cálculos;

Unit Arquivo

É responsável pela construção de tabelas, pelo seu armazenamento destas em arquivos texto e pela abertura destes arquivos. Também utiliza-se das funções de leitura e escrita em arquivos.

A construção de tabelas é feita através da execução do Procedure Princ diversas vezes, de acordo com os parâmetros da tabela estabelecidos, e da associação dos resultados obtidos ao StringGrid1 da “Tela referente a Tabelas”, que representa a tabela em questão.

Possui os seguintes procedimentos:

- ♦ Procedure Monta_Tabela;
- ♦ Procedure Salvar_Tabela;
- ♦ Procedure Abrir_Tabela;

6.4. “UNITS” PARA A REALIZAÇÃO DOS CÁLCULOS

Unit Main

De acordo com o próprio nome, esta é a principal unit do programa, pois é responsável pelo gerenciamento da parte de cálculos. Contém apenas 2 procedimentos:

- Procedure Calc_Vet_ref - é responsável pelo cálculo dos volumes reduzidos para o ponto de referência da entalpia e da entropia, o que é conseguido através da resolução do Caso 1 ou Caso 3 para o ponto fornecido. Atualmente a opção padrão é temperatura de 25°C e pressão de 1,0135MPa, caso esta temperatura esteja muito próxima ao ponto crítico a temperatura torna-se 10°C por motivos que serão explicados mais adiante. Caso este ponto pertença a zona de saturação é adotado como ponto de entalpia e entropia zero o líquido saturado na temperatura fornecida. Estes valores, no entanto, são atribuídos na Unit 2 e futuramente poderão ser modificados pelo usuário através de um sub-item do item “Opções” do menu.
- Procedure Principal - é responsável por chamar o procedimento adequado a cada caso, o que faz após calcular os vetores de referência através do procedimento acima.

Todas as demais “units” de cálculo estão subordinadas a esta Unit, como é possível verificar-se através do diagrama de hierarquia. Algumas estão subordinadas diretamente, como TypeUnit, Caso12, Caso3, Caso45, Caso6_8, Caso9_15 e Auxiliar.

Unit TypeUnit

Esta Unit é utilizada por todas as demais unit do programa, não contém nenhum procedimento, mas é onde se encontra a declaração das variáveis globais do programa e onde está a definição de algumas constantes e de alguns tipos de variáveis.

As demais "units" de cálculos serão apresentadas no decorrer da descrição dos diversos casos implementados.

6.5. CASOS IMPLEMENTADOS

Caso 1 - Entrada: T_{sat} - Zona de Saturação

Este caso se refere ao cálculo das propriedades volumétricas e termodinâmicas a partir de uma temperatura de saturação.

Para a equação de Lee-Kesler, assim como no caso daquela de Soave, utilizou-se o método de Newton-Raphson.

PRESSÃO DE SATURAÇÃO

Existem 3 opções para o cálculo da pressão de saturação. São elas:

1-Método da Fugacidade

Como no caso da equação de Soave, utiliza-se da igualdade de fugacidades entre o ponto de líquido saturado e aquele de vapor saturado. O sistema a ser resolvido possui, então, 5 equações:

1- Equação 2 para fluido simples e fase líquida

$$0 = - \frac{P_r V_r^{(0)}_1}{T_r} = 1 + \frac{B}{V_r^{(0)}_1} + \frac{C}{V_r^{(0)2}_1} + \frac{D}{V_r^{(0)5}_1} + \frac{c_4}{T_r^3 V_r^{(0)2}_1} * \left(\beta + \frac{\gamma}{V_r^{(0)}_1} \right) \exp \left(- \frac{\gamma}{V_r^{(0)}_1} \right) \quad (6.1)$$

2- Equação 2 para fluido de referência e fase líquida

$$0 = - \frac{P_r V_r^{(r)}_1}{T_r} = 1 + \frac{B}{V_r^{(r)}_1} + \frac{C}{V_r^{(r)2}_1} + \frac{D}{V_r^{(r)5}_1} + \frac{c_4}{T_r^3 V_r^{(r)2}_1} * \left(\beta + \frac{\gamma}{V_r^{(r)}_1} \right) \exp \left(- \frac{\gamma}{V_r^{(r)}_1} \right) \quad (6.2)$$

3- Equação 2 para fluido simples e fase de vapor

$$0 = -\frac{P_r V_r^{(0)} v}{T_r} = 1 + \frac{B}{V_r^{(0)} v} + \frac{C}{V_r^{(0)2} v} + \frac{D}{V_r^{(0)5} v} + \frac{c_4}{T_r^3 V_r^{(0)2} v} * \left(\beta + \frac{\gamma}{V_r^{(0)2} v} \right) \exp \left(-\frac{\gamma}{V_r^{(0)2} v} \right) \quad (6.3)$$

4- Equação 2 para fluido de referência e fase de vapor

$$0 = -\frac{P_r V_r^{(r)} v}{T_r} = 1 + \frac{B}{V_r^{(r)} v} + \frac{C}{V_r^{(r)2} v} + \frac{D}{V_r^{(r)5} v} + \frac{c_4}{T_r^3 V_r^{(r)2} v} * \left(\beta + \frac{\gamma}{V_r^{(r)2} v} \right) \exp \left(-\frac{\gamma}{V_r^{(r)2} v} \right) \quad (6.4)$$

5- Equação de igualdade de fugacidades

$$0 = \ln(f/P)_{\text{liq}} - \ln(f/P)_{\text{vapor}} \quad (6.5)$$

onde as fugacidades são calculadas pelo método descrito anteriormente.

As incógnitas do sistema são: P_r , $V_r^{(r)} v$, $V_r^{(0)} v$, $V_r^{(r)l}$, $V_r^{(0)l}$

2 - Equação de Pressão de Vapor de Lee-Kesler

Nesta opção a pressão de vapor é calculada através da equação proposta por Lee-Kesler em seu trabalho:

$$\ln P_r = 5,92714 - 6,09648/T_r - 1,28862 * \ln T_r + 0,169347 * T_r^6 + w * (15,2518 - 15,6875/T_r - 13,4721 * \ln T_r + 0,43577 T_r^6)$$

(6.6)

O sistema do método anterior fica, então, reduzido as 4 primeiras equações e a pressão reduzida de saturação deixa de ser uma incógnita.

3- Equação de Pressão de Vapor compilada por Reid e outros

Outra aproximação para a curva de pressão e saturação é aquela proposta por Reid e que utiliza os coeficientes V_{pa} , V_{pb} , V_{pc} e V_{pd} , pertencentes ao banco de dados de propriedades de fluidos. Esta equação pode ser de 3 tipos, o grupo ao qual ela pertence é a variável "Equação" do banco de dados.

Equação 1:

$$\ln(P/P_c) = (1-x)^{-1} * [(V_{pa})x + (V_{pb})x^{1.5} + (V_{pc})x^3 + (V_{pd})x^6] \quad (6.7)$$

$$x = 1 - T/T_c$$

Equação 2:

$$\ln P = V_{pa} - (V_{pb})/T + (V_{pc}) \ln T + (V_{pd})P/T^2 \quad (6.8)$$

Equação 3:

$$\ln P = V_{pa} - (V_{pb})/[T + V_{pc}] \quad (6.9)$$

Como no segundo método, o sistema de equações fica reduzido a 4 equações.

ESTIMATIVA INICIAL

Para disparar o método de Newton-Raphson é necessário uma estimativa inicial das incógnitas.

No caso do método da fugacidade a estimativa da pressão é obtida através da equação de Clapeyron:

$$P = \exp(A - B/T) \quad (6.10)$$

As constantes A e B são obtidas usando-se o ponto crítico e o ponto de temperatura reduzida 0.6, no qual as propriedades são calculadas pela resolução da equação tendo como chute inicial os seguintes valores:

$$Pr = 0,02 \quad (6.11)$$

$$Vr^{(0)}_l = 0,003 Pr/Tr \quad (6.12)$$

$$Vr^{(r)}_l = 0,9 Pr/Tr \quad (6.13)$$

$$Vr^{(0)}_v = 0,003 Pr/Tr \quad (6.14)$$

$$Vr^{(r)}_v = 0,9 Pr/Tr \quad (6.15)$$

Estes valores foram escolhidos através da observação da facilidade de convergência do método nesta zona. Os coeficientes A e B são constantes do arquivo de propriedade e só são calculados quando a substância é adicionada ao banco de dados.

Para a estimativa dos volumes específicos utilizou-se a equação de estado de van der Waals:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} \quad (6.16)$$

Os termos “a” e “b” são calculados a partir das propriedades no ponto crítico considerando como nulas a primeira e a segunda derivada neste ponto:

$$a = \frac{9}{8} R T_c V_c \quad (6.17)$$

$$b = \frac{1}{3} V_c \quad (6.18)$$

CÁLCULO DAS PROPRIEDADES TÉRMICAS REAIS

Para o cálculo da entropia e da entalpia reais entre dois pontos (P_1-T_1 , P_2-T_2) quaisquer dividiu-se o cálculo em três partes:

- ♦ Cálculo da entalpia da pressão P_1 até uma pressão próxima de zero P_0 a temperatura constante T_1 .
- ♦ Cálculo da entalpia da temperatura T_1 a T_2 a pressão P_0 (gás ideal).
- ♦ Cálculo da entalpia da pressão P_0 até a pressão P_2 a temperatura constante T_2 .

Analiticamente temos:

$$\Delta H = \int_{P_1}^{P_0} \left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_{T_1} dP + \int_{T_1}^{T_2} C_p^0 dT + \int_{P_0}^{P_2} \left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_{T_2} dP \quad (6.19)$$

Da equação acima a primeira e a última integral são calculadas através da expressão para cálculo da entalpia residual de Lee-Kesler. O calor específico a pressão constante é aproximado por uma equação de terceiro grau cujos coeficientes são constantes do banco de dados:

$$C_p = C_{pa} + C_{pb} T + C_{pc} T^2 + C_{pd} T^3 \quad (6.20)$$

O cálculo da entropia é feito de maneira semelhante.

A equação para o cálculo da entropia fica então:

$$\Delta S = \int_{P_1}^{P_0} \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_{T_1} dP + \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p^0}{T} dT + \int_{P_0}^{P_2} \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_{T_2} dP \quad (6.21)$$

PONTO CRÍTICO

Na vizinhança do ponto crítico, para algumas substâncias, a equação de Lee-Kesler apresentou problemas de convergência. Para resolver este problema utilizou funções como aproximação das propriedades a serem calculadas.

Cálculo do Volume Específico

No cálculo do volume específico a função utilizada é composta da união de duas parábolas do 2º grau, uma utilizada no cálculo do volume específico do líquido e outra do vapor. As condições usadas na determinação das constantes da equação são:

- ♦ derivada nula no ponto crítico;
- ♦ um ponto da curva o mais perto possível ponto crítico, calculado através da equação de Lee-Kesler;

- ♦ o próprio ponto crítico, cujo valor do volume específico e pressão são propriedades do banco de dados

Através destas condições garante-se que as duas curvas serão contínuas no seu cruzamento (ponto crítico), como é possível verificar através da figura abaixo (Figura 33):

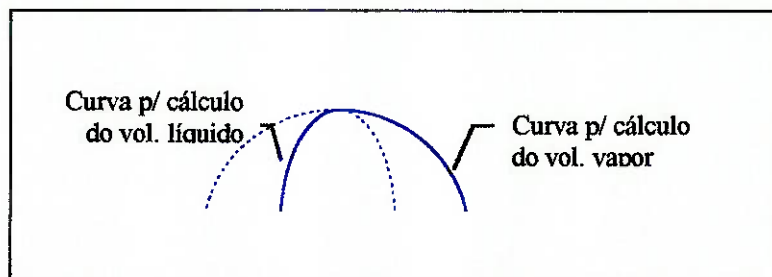


Figura 33-Aproximação do volume específico no ponto crítico

Cálculo das Propriedades Térmicas

Para o cálculo da entropia e da entalpia nesta região utiliza-se o seguinte método:

- define-se a propriedade para o líquido saturado através de uma equação do 2º grau que tem como condições de contorno três pontos, os mais vizinhos possíveis da zona crítica, onde as propriedades são calculadas pelo método de Lee e Kesler;
- calcula-se, utilizando a equação apenas definida, o valor da propriedade no ponto crítico;
- define-se a propriedade para o vapor saturado através de uma equação do 2º grau que tem como condições de contorno dois pontos, os mais vizinhos possíveis da zona crítica, onde as propriedades são calculadas pelo método de Lee e Kesler, e o ponto crítico, calculado pela equação do líquido saturado.

Pode-se visualizar a aproximação através da figura abaixo (Figura 34):

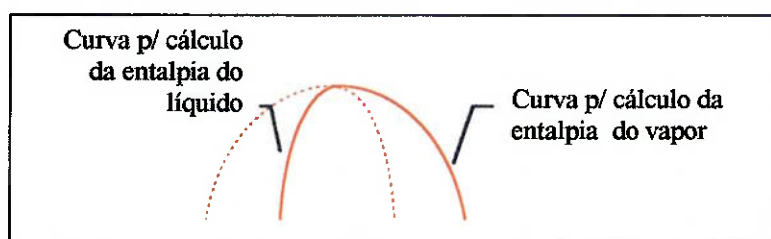


Figura 34-Aproximação da entalpia no ponto crítico

Seqüência do Programa

Na resolução do problema, a partir da entrada no procedimento específico deste caso (Procedure Caso1_2 - Unit 2) o programa tem a seguinte seqüência de passos:

- Passo 1 - Verifica se a temperatura entrada se encontra na zona de saturação, ou seja, se está entre a temperatura do ponto triplo e aquela do ponto crítico (Procedure Teste1_2 - Unit Caso12), em caso negativo pára o processo;
- Passo 2 - Verifica se a temperatura de saturação se encontra muito próxima ao ponto crítico ($T_c - 10 < T \leq T_c$), em caso afirmativo calcula os volumes específicos, as entalpias e as entropias, do líquido e do vapor, através do método descrito acima e pára o processo.
- Passo 3 - Começa a resolução do sistema de equações (Procedure Solução - Unit Proc_Sol), inicialmente calcula a estimativa inicial, de acordo com o descrito acima (Procedure Calc_xo - Unit Início).
- Passo 4 - Enquanto o erro não for suficientemente pequeno, monta o sistema de matrizes do método de Newton-Raphson (Unit Sistema) a partir das funções de Lee-Kesler (Unit Func) e o resolve (Unit Sist_lin).
- Passo 5 - A partir dos volumes reduzidos calcula os valores dos fatores de compressibilidade e os volumes específicos do líquido e do vapor (Procedure Calc_PVZ - Unit Auxiliar).
- Passo 6 - A partir dos volumes reduzidos calcula as entropias e entalpias do líquido e do vapor (Procedure Entalpia, Procedure Entropia - Unit Prop_Term).

Caso 2 - Entrada P_{sat} - Zona de Saturação

Neste caso a entrada fornecida pelo usuário é a pressão de saturação.

Para a solução do problema, primeiramente foi desenvolvido um método para encontrar a temperatura, e uma vez determinada esta variável, aplicou-se as subrotinas do Caso 1.

Considerando a pressão como função da temperatura ($P = f(T)$), podemos escrever a seguinte equação para a determinação da temperatura de saturação:

$$F(T) = P_{\text{sat}} - f(T) \quad (6.22)$$

A equação acima é nula quando $T = T_{\text{sat}}$, assim a partir de uma estimativa inicial de T (T_0) pode-se aplicar o método de Newton-Raphson para a solução da equação:

$$F(T) = 0 = F(T_0) + \left. \frac{dF}{dT} \right|_{T=T_0} (T - T_0) \quad (6.23)$$

A derivada dF/dT foi aproximada por:

$$\frac{dF}{dT} = \frac{\Delta F}{\Delta T} = \frac{F_0 - F_1}{T_0 - T_1} \quad (6.24)$$

Considerou-se $T_1 = 0,99T_0$.

A estimativa inicial da temperatura foi fornecida pela equação de Clapeyron, já apresentada anteriormente (Equação 5.10).

Seqüência de Passos:

Na resolução do problema, a partir da entrada no procedimento específico deste caso (Procedure Caso1_2 - Unit 2) o programa tem a seguinte seqüência de passos:

- Passo 1 - Verifica se a pressão entrada se encontra na zona de saturação, ou seja, se está entre a pressão do ponto triplo e aquela do ponto crítico (Procedure Teste1_2 - Unit Caso12), em caso negativo pára o processo;
- Passo 2 - Calcula-se a temperatura de saturação (Procedure Calc_Ts - Unit Início).
- Passo 3 - Repete os passos de 2 a 6 do Caso1, ignorando os comandos para o cálculo da pressão.

Caso 3 - Entradas P e T (Vapor Superaquecido)

O método de resolução do caso 3 é muito parecido ao dos casos 1 e 2, com a simplificação de não ser necessário o cálculo da pressão e temperatura.

Neste caso o sistema utilizado reduz-se a metade, pois não temos mais as incógnitas para a parte de líquido saturado.

As novas equações são:

$$0 = - \frac{P_r V_r^{(0)}}{T_r} = 1 + \frac{B}{V_r^{(0)}} + \frac{C}{V_r^{(0)2}} + \frac{D}{V_r^{(0)5}} + \frac{c_4}{T_r^3 V_r^{(0)2}} * \left(\beta + \frac{\gamma}{V_r^{(0)2}} \right) \exp \left(- \frac{\gamma}{V_r^{(0)2}} \right) \quad (6.25)$$

$$0 = - \frac{P_r V_r^{(r)}}{T_r} = 1 + \frac{B}{V_r^{(r)}} + \frac{C}{V_r^{(r)2}} + \frac{D}{V_r^{(r)5}} + \frac{c_4}{T_r^3 V_r^{(r)2}} * \left(\beta + \frac{\gamma}{V_r^{(r)2}} \right) \exp \left(- \frac{\gamma}{V_r^{(r)2}} \right) \quad (6.26)$$

As incógnitas são $V_r^{(r)}$ e $V_r^{(0)}$.

Seqüência de passos:

Passo 1 - Verifica se a pressão e a temperatura estão na zona de convergência da equação ($T < 4T_c$ e $P < 10P_c$), se os dados não se encontram na zona de saturação, e se não apresentará problemas devido a limitação do programa, o que acontece para temperaturas muito baixas ($P < 10\text{Pa}$), onde implica em um V_r da ordem de 10^6 , o que, quando elevado a potência de 6, supera a ordem de grandeza disponível ao tipo de variável utilizado (Procedure Teste3 - Unit Caso3), em caso negativo pára o processo;

Passo 2 - Repete os passos de 3 a 6 do Caso1, ignorando os comandos para o cálculo da pressão, e trabalhando com um sistema de 2 equações.

Caso 4 - Entradas P e v - Vapor Superaquecido

Para o cálculo da temperatura utiliza-se um método similar ao do caso 2. Considera-se o volume específico como função de P e T ($v = f(P, T)$), monta-se a seguinte equação, onde v_u é o volume específico fornecido pelo usuário:

$$F(T) = v_u - f(P, T) \quad (6.27)$$

De modo análogo ao Caso 2 tem-se que a equação é nula quando $T = T_u$, assim obtém-se a solução através do método de Newton-Raphson. Aqui a derivada da função também foi aproximada ($dF/dT = \Delta F/\Delta T$).

A estimativa inicial da temperatura é feita através da equação de estado de van der Waals, já apresentada anteriormente (Equação 16).

Seqüência de passos:

- Passo 1 - Verifica se a pressão e o volume se encontram na zona de vapor superaquecido e dentro da zona de convergência da equação (Procedure Caso4 - Unit Caso45);
- Passo 2 - Calcula uma estimativa inicial da temperatura (Procedure Calc_T_ini - Unit Caso45).
- Passo 3 - Aplica o método de Newton-Raphson até a temperatura se encontrar dentro do erro relativo permitido (Calc_Caso4_Aquec, Calc_Dg_P - Unit Caso45).
- Passo 4 - Calcula as propriedades termodinâmicas, através da aplicação do Caso 3 a P e T, pois apesar de possuir o valor do volume específico, é necessário a determinação dos volumes reduzidos para o cálculo da entropia e entalpia.

Caso 5 - Entradas T e v - Vapor Superaquecido

Este caso é resolvido de modo idêntico ao Caso 4, apenas trocando a variável T por P, aqui também se utiliza a equação de van der Waals para obter-se uma estimativa inicial da pressão a ser calculada.

Caso 6 - Entrada P e h - Vapor Superaquecido

Também aqui se utiliza o método aplicado nos dois últimos casos. A equação a ser resolvida é:

$$F(T) = h_u - f(P, T) \quad (5.27)$$

Na equação acima h_u é a entalpia fornecida pelo usuário.

Para o cálculo da estimativa inicial utilizou-se gás perfeito. A temperatura estimada foi calculada através do método de dicotomia dentro do intervalo entre a temperatura do ponto triplo e o limite da equação de Lee-Kesler ($4T_c$), o erro adotado foi de 0.1 para temperatura reduzida, o que, apesar de parecer grande, é o mais adequado ao caso, uma vez que estamos apenas calculando uma estimativa inicial.

Caso 7 - Entradas: P e s - Vapor Superaquecido

Idêntico ao anterior, apenas utilizando a entropia no lugar da entalpia. O cálculo da estimativa inicial também é feito do mesmo modo.

Caso 8 - Entradas: T e s - Vapor Superaquecido

Também idêntico aos dois últimos casos. Aqui a estimativa inicial da pressão também é obtida pelo método da dicotomia, mas, para uma maior rapidez do método, aplicou-se uma escala logarítmica aos intervalos, pois esta é mais próxima ao comportamento da função $s(P)$.

Caso 9 - Entradas T e v - Zona de Saturação

Caso 10 - Entradas P e v - Zona de Saturação

Caso 11 - Entradas P e h - Zona de Saturação

Caso 12 - Entradas T e s - Zona de Saturação

Caso 13 - Entradas P e s - Zona de Saturação

Caso 14 - Entradas T e título - Zona de Saturação

Caso 15 - Entradas P e título - Zona de Saturação

Os casos acima são calculados todos de maneira semelhante.

Seqüência de passos:

- Passo 1 - Verifica se a pressão ou temperatura fornecida estão na Zona de Saturação;
- Passo 2 - Calcula os valores de volume específico, entropia, entalpia e fator de compressibilidade do líquido e do vapor saturado, através dos Casos 1 ou 2, de acordo com a variável fornecida pelo usuário, obtendo, também, a pressão ou temperatura não fornecida;
- Passo 3 - Interpola o valor da outra variável fornecida pelo usuário (v , h ou s) de modo a obter o título (este passo não é necessário nos casos 14 e 15);
- Passo 4 - Calcula as demais variáveis (v , h , s e z) utilizando o título e os valores para líquido e vapor saturado obtidos no Passo 2.

Caso 16 - Entradas T e P - Líquido Comprimido

Semelhante ao caso T e P para vapor superaquecido.

Caso 17 - Entradas P e v - Líquido Comprimido**Caso 18 - Entradas T e v - Líquido Comprimido****Caso 19 - Entradas P e h - Líquido Comprimido****Caso 20 - Entradas P e s - Líquido Comprimido****Caso 21 - Entradas T e s - Líquido Comprimido**

Os casos acima são calculados de maneira semelhante ao caso correspondente para vapor superaquecido, a única diferença está na estimativa inicial, que aqui é feita a partir do valor da temperatura ou pressão na zona de saturação.

A seqüência de passos também é a mesma.

7. ANÁLISE DOS RESULTADOS OBTIDOS

Para avaliação dos resultados obtidos foram construídas tabelas de dados de algumas substâncias para a zona de saturação e de vapor superaquecido, utilizando-se a opção de construção de tabelas do programa. Estas tabelas foram posteriormente modificadas e formatadas, permitindo assim a comparação de resultados e construção de gráficos.

Através da comparação fornecidos no "Perry's Chemical Engineers' Handbook" (1984) foram calculados os erros relativos para as propriedades volumétricas e térmicas. Estes resultados encontram-se no Anexo 4. Foram construídos gráficos ilustrativos da curva de pressão de vapor e dos erros relativos.

Foram estudadas as seguintes substâncias:

- Água
- Amônia
- Butano
- Metano
- Octano

Zona de Saturação

Analisando os resultados obtidos (Anexo 4) no cálculo das propriedades volumétricas da Zona de Saturação, observa-se que os erros relativos obtidos para a equação de Lee-Kesler foram consideravelmente menores que aqueles obtidos para equação de Giorgio-Soave, principalmente no caso de hidrocarbonetos, onde o erro foi inferior a 1% na maioria dos pontos. Para estas substâncias os maiores erros foram obtidos na vizinhança do ponto triplo.

No caso das demais substâncias analisadas (amônia e água), o volume específico do líquido saturado apresentou um erro constante da ordem de 15-20%. Para a pressão e para o volume específico do vapor saturado o erro encontrado foi consideravelmente menor, da ordem de 2% na maioria dos pontos, com exceção da região próxima ao ponto crítico, onde o erro aumenta sensivelmente.

Para o metano foi realizada também uma comparação entre as diversas curvas de pressão de vapor e observou-se que os resultados apresentados pela aproximação de Reid foram os melhores, sendo que aqueles da aproximação de Lee-Kesler foram ligeiramente piores e os obtidos pelo método de igualdade de fugacidades foi consideravelmente pior.

Para a comparação da entalpia o método mais apropriado seria subtrair dos valores apresentados na tabela de referência o valor presente nesta mesma tabela da entalpia no ponto utilizado como ponto de entalpia nula na construção da tabela pela equação de Lee-Kesler. No entanto este método não foi possível devido a ausência na tabela de referência do ponto de entalpia adotado, como solução alternativa considerou-se como referência o menor valor (entalpia da tabela construída, assim foi subtraído dos valores da tabela de referência a diferença entre a entalpia das duas tabelas, como consequência o erro calculado pelo ponto de menor entalpia da tabela.

Ressalta-se ainda que para este método de comparação de entalpia o erro relativo depende da proximidade do ponto usado do ponto de entalpia nula da tabela construída, quanto maior for a distância entre estes pontos menor será o erro relativo para um mesmo erro absoluto.

Zona de Vapor Superaquecido

Em geral os erros obtidos nesta zona são menores que aqueles da zona de saturação, tanto no caso das propriedades termodinâmicas como volumétricas.

No caso das propriedades volumétricas adotado o mesmo processo descrito para a zona de saturação.

8. DIFICULDADES ENCONTRADAS

As principais dificuldades surgiram na convergência do método de Newton-Raphson perto do ponto crítico, estas dificuldades foram contornadas através da aproximação das propriedades por curvas polinomiais de 2º grau, de acordo com o método descrito anteriormente. Foi necessário também um “chute inicial” adequado, o que foi conseguido através das equações de Clapeyron e de van der Waals.

Alguns problemas foram encontrados durante a implementação da interface em Delphi, entre eles a escolha do tipo de banco de dados mais apropriado para guardar os valores das constantes das diversas substâncias. Inicialmente adotou-se a utilização de um banco de dados do programa Paradox, posteriormente esta solução foi abandonada devido a necessidade de serem copiados diversos arquivos, juntamente ao arquivo executável, para o funcionamento do programa em um microcomputador sem o programa Paradox instalado.

9. DIVULGAÇÃO DO TRABALHO

O programa desenvolvido está sendo divulgado de acordo com as etapas abaixo:

- Divulgação entre os professores das disciplinas de termodinâmica, dentro da própria universidade;
- Divulgação entre os alunos das disciplinas de termodinâmica, dentro da própria universidade, para detecção de possíveis problemas e obtenção de sugestões;
- Divulgação via Internet, com a possibilidade de fazer um “download” no programa;

Atualmente o programa já está sendo utilizado por alunos e aguarde-se para a obtenção de resultados.

O programa também tem sido divulgado através de artigos, como o mandado ao III Congresso Iberoamericano de Ingeniería Mecánica (CIDIM/97), presente no Anexo 7, que se realizará de 23 a 26 de setembro de 1997 no *Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría*, em La Habana, Cuba.

10. CONCLUSÃO

Em linhas gerais, o programa foi elaborado conforme o previamente proposto, possuindo como características a facilidade de uso e uma interface interativa.

Procurou-se dar uma abordagem aos tópicos presentes de modo semelhante aos livros de termodinâmica mais utilizados para que o programa propicie aos alunos uma melhor compreensão dos fenômenos termodinâmicos. Do que se sabe, o programa será o primeiro a ser desenvolvido na parte referente a ciclos, em todo o país.

Os resultados obtidos através da equação de Lee-Kesler foram plenamente satisfatórios do ponto de vista didático.

As subrotinas referentes ao cálculo de propriedades, desenvolvidas em Pascal e de modo independente do resto do programa, pode ser uma ferramenta muito útil em outros trabalhos que venham a ser desenvolvidos.

11. BIBLIOGRAFIA

- LEE, B. I. e KESLER, M.;** *A Generalized Thermodynamic Correlation Based on Three-Parameter Corresponding State*; AIChE Journal; Vol. 21(3); pp. 510-27, 1975.
- PERRY, R. H. e GREEN, D.;** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, 6a. edição, McGraw-Hill, 1984.
- REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M. e POLING, B. E.;** *The Properties of Gases and Liquids*, 4a. edição, McGraw-Hill, 1987.
- REYNOLDS, W. C.;** *Graphs, Tables and Computational Equations for 40 Substances*, 1a. edição, Dept. of Mech. Eng., Stanford Univ., 1979.
- SOAVE, Giorgio;** *Equilibrium Constants from a modified Redlich-Kwong Equation of State*; Chemical Engineering Science ; Vol. 27; pp. 1197-1203, 1972.
- VAN WYLEN, Gordon J. e SONNTAG, Richard E.;** *Fundamentos da Termodinâmica Clássica*; Editora Edgard Blücher Ltda., 1993.

Anexo - 1

Listagem do programa
referente à equação
de Soave

Devido ao grande volume da listagem do programa referente a equação de Soave, esta se encontra em um disquete presente na contra-capa final, no diretório “Soave”.

Anexo - 2

Resultados obtidos para a
equação de Soave

PROPRIEDADES DO METANO SATURADO

Cálculo do Erro Relativo para a Equação Original de Soave

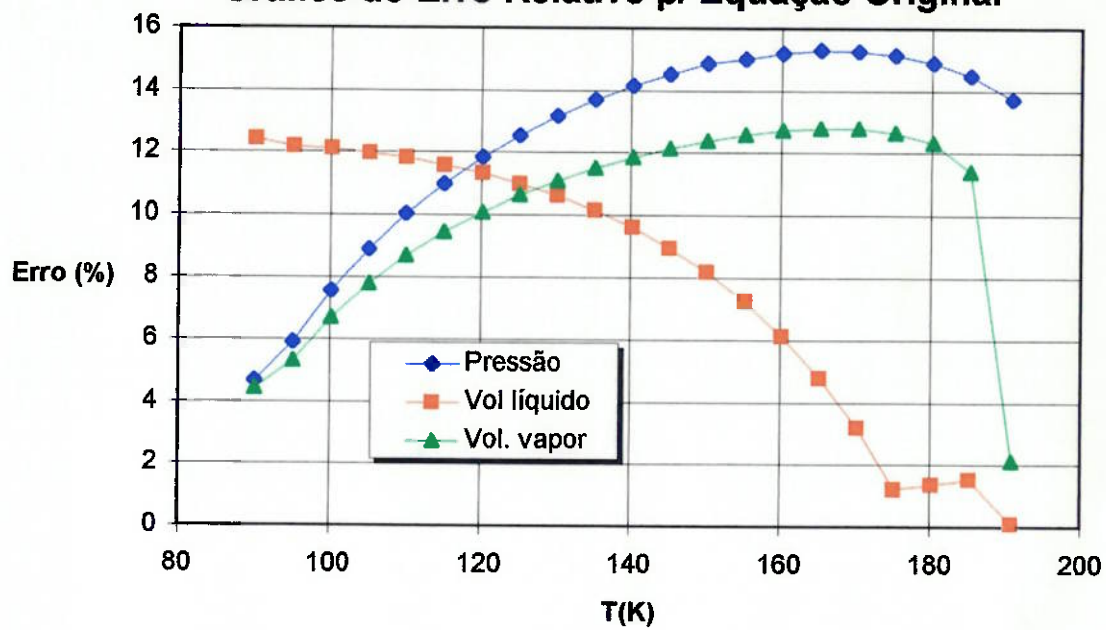
<i>T</i> (K)	<i>P</i> _{calc}	<i>P</i> _{tab}	<i>E_p</i>	<i>v</i> _{liq} calc	<i>v</i> _{liq} tab	<i>E_v</i> _{liq}	<i>v</i> _{vapor} calc	<i>v</i> _{vapor} tab	<i>E_v</i> _{vapor}
90	0,00984	0,01174	16,2	0,002206	0,002215	0,4	4,7168	3,9720	18,8
95	0,01855	0,01991	6,8	0,002240	0,002243	0,1	2,6319	2,4450	7,6
100	0,03264	0,03451	5,4	0,002277	0,002278	0,0	1,5670	1,4770	6,1
105	0,05417	0,05657	4,2	0,002317	0,002314	0,1	0,9850	0,9393	4,9
110	0,08554	0,08840	3,2	0,002360	0,002353	0,3	0,6480	0,6241	3,8
115	0,12943	0,13260	2,4	0,002407	0,002394	0,5	0,4431	0,4303	3,0
120	0,18876	0,19190	1,6	0,002458	0,002438	0,8	0,31294	0,30610	2,2
125	0,26665	0,26940	1,0	0,002515	0,002485	1,2	0,22721	0,22360	1,6
130	0,36637	0,36810	0,5	0,002578	0,002536	1,7	0,16886	0,16700	1,1
135	0,49126	0,49130	0,0	0,002648	0,002591	2,2	0,12801	0,12720	0,6
140	0,64478	0,64230	0,4	0,002726	0,002652	2,8	0,09866	0,09842	0,2
145	0,83041	0,82450	0,7	0,002814	0,002718	3,5	0,07711	0,07718	0,1
150	1,05164	1,04100	1,0	0,002916	0,002792	4,4	0,06095	0,06118	0,4
155	1,31200	1,29700	1,2	0,003033	0,002875	5,5	0,04861	0,04890	0,6
160	1,61500	1,59400	1,3	0,003171	0,002971	6,7	0,03902	0,03932	0,8
165	1,96414	1,93700	1,4	0,003337	0,003083	8,2	0,03145	0,03171	0,8
170	2,36291	2,33100	1,4	0,003542	0,003218	10,1	0,02536	0,02557	0,8
175	2,81479	2,78000	1,3	0,003806	0,003388	12,3	0,02036	0,02050	0,7
180	3,32325	3,28900	1,0	0,004170	0,003618	15,3	0,01616	0,01621	0,3

Cálculo do Erro Relativo para a Equação Alterada de Soave

<i>T</i> (K)	<i>P</i> _{calc}	<i>P</i> _{tab}	<i>E_p</i>	<i>v</i> _{liq} calc	<i>v</i> _{liq} tab	<i>E_v</i> _{liq}	<i>v</i> _{vapor} calc	<i>v</i> _{vapor} tab	<i>E_v</i> _{vapor}
90	0,01119	0,01174	4,7	0,001940	0,002215	12,4	4,1482	3,9720	4,4
95	0,02109	0,01991	5,9	0,001970	0,002243	12,2	2,3146	2,4450	5,3
100	0,03712	0,03451	7,6	0,002002	0,002278	12,1	1,3781	1,4770	6,7
105	0,06160	0,05657	8,9	0,002037	0,002314	12,0	0,8662	0,9393	7,8
110	0,09727	0,08840	10,0	0,002075	0,002353	11,8	0,5699	0,6241	8,7
115	0,14717	0,13260	11,0	0,002117	0,002394	11,6	0,3897	0,4303	9,4
120	0,21464	0,19190	11,8	0,002162	0,002438	11,3	0,27522	0,30610	10,1
125	0,30320	0,26940	12,5	0,002212	0,002485	11,0	0,19982	0,22360	10,6
130	0,41658	0,36810	13,2	0,002267	0,002536	10,6	0,14851	0,16700	11,1
135	0,55860	0,49130	13,7	0,002328	0,002591	10,2	0,11258	0,12720	11,5
140	0,73316	0,64230	14,1	0,002397	0,002652	9,6	0,08677	0,09842	11,8
145	0,94423	0,82450	14,5	0,002475	0,002718	8,9	0,06781	0,07718	12,1
150	1,19578	1,04100	14,9	0,002564	0,002792	8,2	0,05360	0,06118	12,4
155	1,49183	1,29700	15,0	0,002667	0,002875	7,2	0,04275	0,04890	12,6
160	1,83636	1,59400	15,2	0,002789	0,002971	6,1	0,03432	0,03932	12,7
165	2,23336	1,93700	15,3	0,002935	0,003083	4,8	0,02766	0,03171	12,8
170	2,68679	2,33100	15,3	0,003115	0,003218	3,2	0,02230	0,02557	12,8
175	3,20061	2,78000	15,1	0,003347	0,003388	1,2	0,01791	0,02050	12,6
180	3,77876	3,28900	14,9	0,003667	0,003618	1,4	0,01421	0,01621	12,3
185	4,42517	3,86500	14,5	0,004039	0,003979	1,5	0,01094	0,01235	11,4
190,6	5,23045	4,59900	13,7	0,006226	0,006233	0,1	0,00637	0,00623	2,1

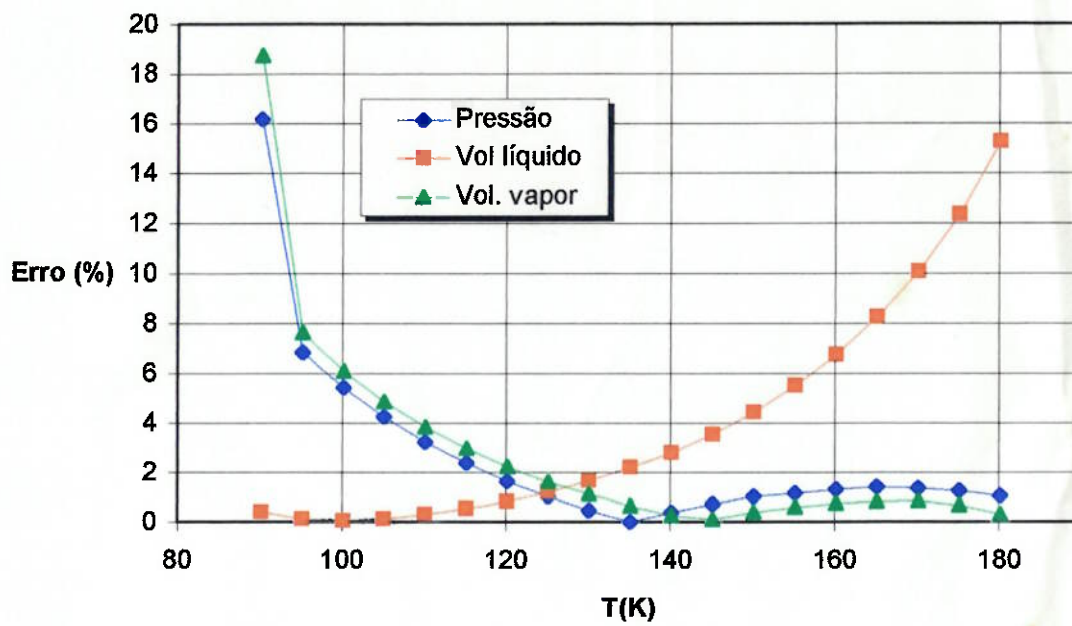
PROPRIEDADES DO METANO SATURADO

Gráfico do Erro Relativo p/ Equação Original



PROPRIEDADES DO METANO SATURADO

Gráfico do Erro Relativo p/ Equação Alterada



PROPRIEDADES DO FREON 12 SATURADO

Cálculo do Erro Relativo para a Equação Original de Soave

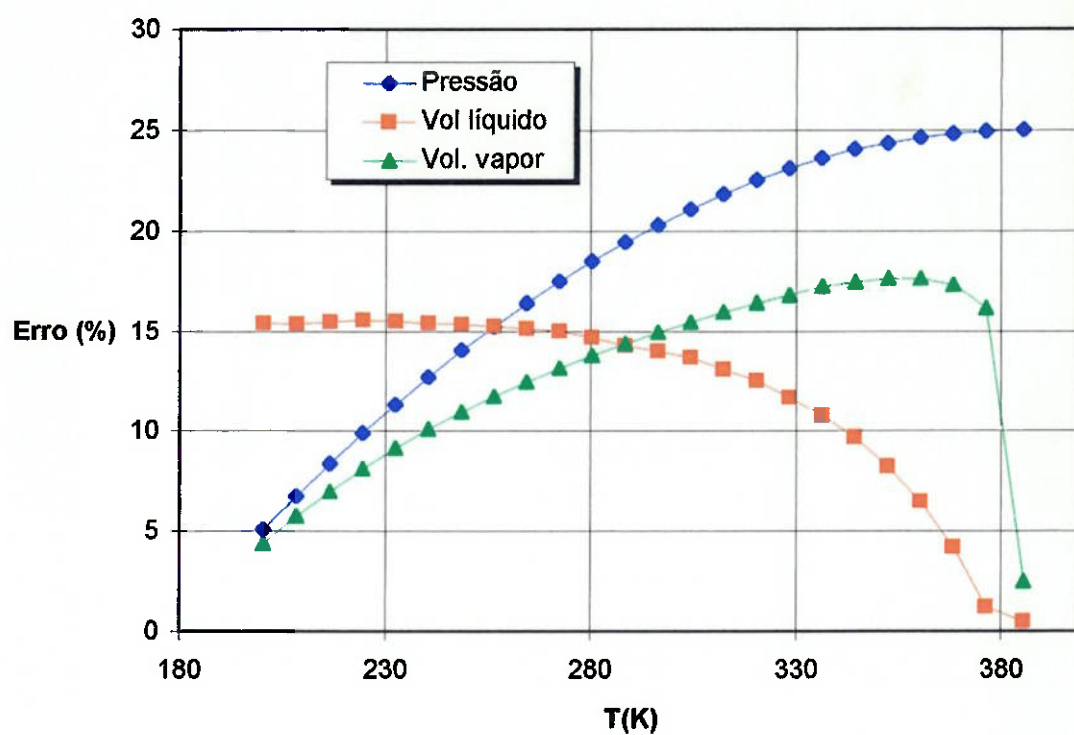
T (K)	P _{calc}	P _{tab}	Ep	v _{liq} calc	v _{liq} tab	Ev _{liq}	v _{vapor} calc	v _{vapor} tab	Ev _{vapor}
200	0,00837	0,00996	15,9	0,000659	0,000623	5,8	1,6360	1,3690	19,5
208	0,01421	0,01663	14,6	0,000667	0,000631	5,7	1,0004	0,8492	17,8
216	0,02304	0,02658	13,3	0,000676	0,000640	5,6	0,6383	0,5490	16,3
224	0,03593	0,04087	12,1	0,000685	0,000649	5,5	0,4227	0,3680	14,9
232	0,05409	0,06073	10,9	0,000695	0,000658	5,6	0,2892	0,2546	13,6
240	0,07894	0,08754	9,8	0,000706	0,000668	5,7	0,2036	0,1811	12,4
248	0,11205	0,12280	8,8	0,000717	0,000678	5,8	0,14695	0,13200	11,3
256	0,15517	0,16830	7,8	0,000730	0,000689	6,0	0,10842	0,09827	10,3
264	0,21018	0,22570	6,9	0,000744	0,000701	6,1	0,08155	0,07453	9,4
272	0,27910	0,29690	6,0	0,000759	0,000714	6,3	0,06239	0,05746	8,6
280	0,36404	0,38400	5,2	0,000776	0,000728	6,6	0,04843	0,04494	7,8
288	0,46724	0,48900	4,4	0,000794	0,000742	7,0	0,03808	0,03558	7,0
296	0,59100	0,61400	3,7	0,000815	0,000758	7,5	0,03028	0,02848	6,3
304	0,73772	0,76140	3,1	0,000838	0,000776	8,0	0,02431	0,02300	5,7
312	0,90985	0,93340	2,5	0,000864	0,000795	8,7	0,01966	0,01872	5,0
320	1,10990	1,13200	2,0	0,000894	0,000817	9,4	0,01601	0,01532	4,5
328	1,34045	1,36100	1,5	0,000928	0,000841	10,3	0,01310	0,01259	4,0
336	1,60411	1,62200	1,1	0,000969	0,000868	11,6	0,01075	0,01038	3,5
344	1,90356	1,91800	0,8	0,001018	0,000901	13,0	0,00882	0,00855	3,2
352	2,24149	2,25300	0,5	0,001078	0,000940	14,7	0,00723	0,00702	3,0
360	2,62068	2,62800	0,3	0,001156	0,000989	16,9	0,00590	0,00572	3,0
368	3,04392	3,04800	0,1	0,001262	0,001054	19,7	0,00474	0,00459	3,4
376	3,51408	3,51500	0,0	0,001427	0,001156	23,4	0,00370	0,00353	4,8

Cálculo do Erro Relativo para a Equação Alterada de Soave

T (K)	P _{calc}	P _{tab}	Ep	v _{liq} calc	v _{liq} tab	Ev _{liq}	v _{vapor} calc	v _{vapor} tab	Ev _{vapor}
200	0,01046	0,00996	5,1	0,000527	0,000623	15,4	1,3090	1,3690	4,4
208	0,01775	0,01663	6,7	0,000534	0,000631	15,4	0,8005	0,8492	5,7
216	0,02880	0,02658	8,4	0,000541	0,000640	15,5	0,5108	0,5490	7,0
224	0,04490	0,04087	9,9	0,000548	0,000649	15,6	0,3382	0,3680	8,1
232	0,06760	0,06073	11,3	0,000556	0,000658	15,5	0,2314	0,2546	9,1
240	0,09865	0,08754	12,7	0,000565	0,000668	15,4	0,1629	0,1811	10,0
248	0,14004	0,12280	14,0	0,000574	0,000678	15,3	0,11758	0,13200	10,9
256	0,19393	0,16830	15,2	0,000584	0,000689	15,2	0,08675	0,09827	11,7
264	0,26268	0,22570	16,4	0,000595	0,000701	15,1	0,06525	0,07453	12,4
272	0,34881	0,29690	17,5	0,000607	0,000714	15,0	0,04992	0,05746	13,1
280	0,45497	0,38400	18,5	0,000621	0,000728	14,7	0,03875	0,04494	13,8
288	0,58394	0,48900	19,4	0,000636	0,000742	14,3	0,03047	0,03558	14,4
296	0,73861	0,61400	20,3	0,000652	0,000758	14,0	0,02423	0,02848	14,9
304	0,92198	0,76140	21,1	0,000670	0,000776	13,7	0,01945	0,02300	15,4
312	1,13710	0,93340	21,8	0,000691	0,000795	13,1	0,01573	0,01872	16,0
320	1,38712	1,13200	22,5	0,000715	0,000817	12,5	0,01281	0,01532	16,4
328	1,67526	1,36100	23,1	0,000743	0,000841	11,7	0,01048	0,01259	16,8
336	2,00477	1,62200	23,6	0,000775	0,000868	10,7	0,00860	0,01038	17,2
344	2,37901	1,91800	24,0	0,000814	0,000901	9,7	0,00706	0,00855	17,4
352	2,80135	2,25300	24,3	0,000863	0,000940	8,2	0,00579	0,00702	17,6
360	3,27525	2,62800	24,6	0,000925	0,000989	6,5	0,00472	0,00572	17,6
368	3,80421	3,04800	24,8	0,001010	0,001054	4,2	0,00379	0,00459	17,3
376	4,39179	3,51500	24,9	0,001142	0,001156	1,2	0,00296	0,00353	16,1
385,2	5,14472	4,11600	25,0	0,001692	0,001700	0,5	0,00174	0,00170	2,5

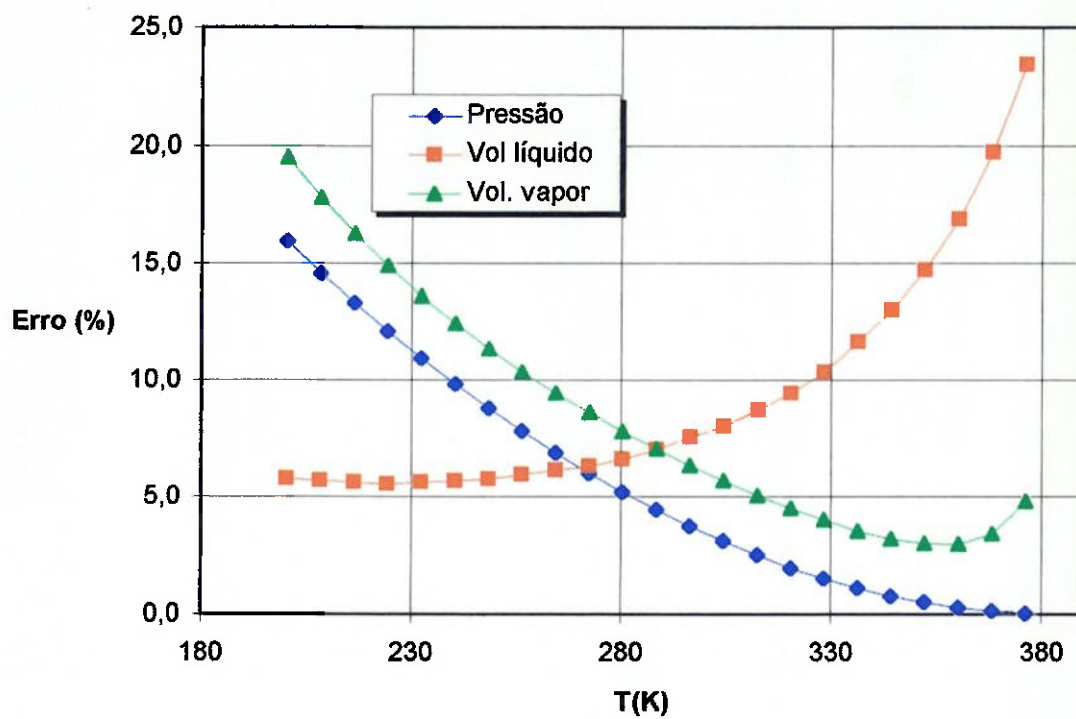
PROPRIEDADES DO FREON 12 SATURADO

Gráfico do Erro Relativo p/ Equação Alterada de Soave



PROPRIEDADES DO FREON 12 SATURADO

Gráfico do Erro Relativo p/ Equação Original de Soave



PROPRIEDADES DA ÁGUA SATURADA

Cálculo do Erro Relativo para a Equação Original de Soave

<i>T</i> (°C)	<i>P</i> _{calc}	<i>P</i> _{tab}	<i>E_p</i>	<i>v</i> _{liq} <i>calc</i>	<i>v</i> _{liq} <i>tab</i>	<i>E_v</i> <i>liq</i>	<i>v</i> _{vapor} <i>calc</i>	<i>v</i> _{vapor} <i>tab</i>	<i>E_v</i> <i>vapor</i>
0	0,00041	0,00061	32,9	0,001300	0,001000	30,0	311,1779	206,1400	51,0
10	0,00086	0,00123	29,9	0,001308	0,001000	30,8	152,6690	106,3800	43,5
20	0,00171	0,00234	26,9	0,001317	0,001002	31,4	79,3291	57,7900	37,3
30	0,00322	0,00425	24,2	0,001326	0,001004	32,1	43,3927	32,8900	31,9
40	0,00581	0,00738	21,3	0,001336	0,001008	32,5	24,8544	19,5200	27,3
50	0,01004	0,01235	18,7	0,001346	0,001012	33,0	14,8381	12,0300	23,3
60	0,01669	0,01994	16,3	0,001357	0,001017	33,4	9,19536	7,67100	19,9
70	0,02680	0,03119	14,1	0,001368	0,001023	33,7	5,89385	5,04200	16,9
80	0,04168	0,04739	12,0	0,001380	0,001029	34,1	3,89466	3,40700	14,3
90	0,06299	0,07014	10,2	0,001393	0,001036	34,5	2,64564	2,36100	12,1
100	0,09273	0,10132	8,5	0,001406	0,001044	34,7	1,84272	1,67290	10,2
110	0,13329	0,14327	7,0	0,001420	0,001052	35,0	1,31295	1,21020	8,5
120	0,18742	0,19853	5,6	0,001435	0,001060	35,4	0,95495	0,89190	7,1
130	0,25831	0,27010	4,4	0,001451	0,001070	35,6	0,70768	0,66850	5,9
140	0,34952	0,36130	3,3	0,001468	0,001080	35,9	0,53342	0,50890	4,8
150	0,46501	0,47580	2,3	0,001485	0,001091	36,1	0,40831	0,39280	3,9
160	0,60913	0,61780	1,4	0,001505	0,001102	36,6	0,31696	0,30710	3,2
170	0,78659	0,79170	0,6	0,001525	0,001114	36,9	0,24919	0,24280	2,6
180	1,00247	1,00210	0,0	0,001547	0,001127	37,3	0,19817	0,19405	2,1
190	1,26215	1,25440	0,6	0,001571	0,001141	37,7	0,15926	0,15654	1,7
200	1,57135	1,55380	1,1	0,001596	0,001157	37,9	0,12919	0,12736	1,4
210	1,93606	1,90620	1,6	0,001624	0,001173	38,4	0,10570	0,10441	1,2
220	2,36258	2,31800	1,9	0,001654	0,001190	39,0	0,08714	0,08619	1,1
230	2,85743	2,79500	2,2	0,001686	0,001209	39,5	0,07232	0,07158	1,0
240	3,42739	3,34400	2,5	0,001722	0,001229	40,1	0,06039	0,05976	1,1
250	4,07946	3,97300	2,7	0,001761	0,001251	40,8	0,05070	0,05013	1,1
260	4,82085	4,68800	2,8	0,001805	0,001276	41,5	0,04275	0,04221	1,3
270	5,65899	5,49900	2,9	0,001853	0,001302	42,3	0,03619	0,03564	1,5
280	6,60148	6,41200	3,0	0,001908	0,001332	43,2	0,03072	0,03017	1,8
290	7,6561	7,4360	3,0	0,001970	0,001366	44,2	0,02614	0,02557	2,2
300	8,8310	8,5810	2,9	0,002041	0,001404	45,4	0,02226	0,02167	2,7
310	10,1341	9,8560	2,8	0,002124	0,001447	46,8	0,01897	0,01835	3,4
320	11,5739	11,2740	2,7	0,002223	0,001499	48,3	0,01613	0,01549	4,2
330	13,1590	12,8450	2,4	0,002343	0,001561	50,1	0,01368	0,01300	5,3
340	14,8980	14,5860	2,1	0,002494	0,001638	52,3	0,01152	0,01080	6,7
350	16,7999	16,5130	1,7	0,002695	0,001740	54,9	0,00959	0,00881	8,9
360	18,8738	18,6510	1,2	0,002992	0,001893	58,1	0,00780	0,00695	12,3
374,1	22,0914	22,0900	0,0						

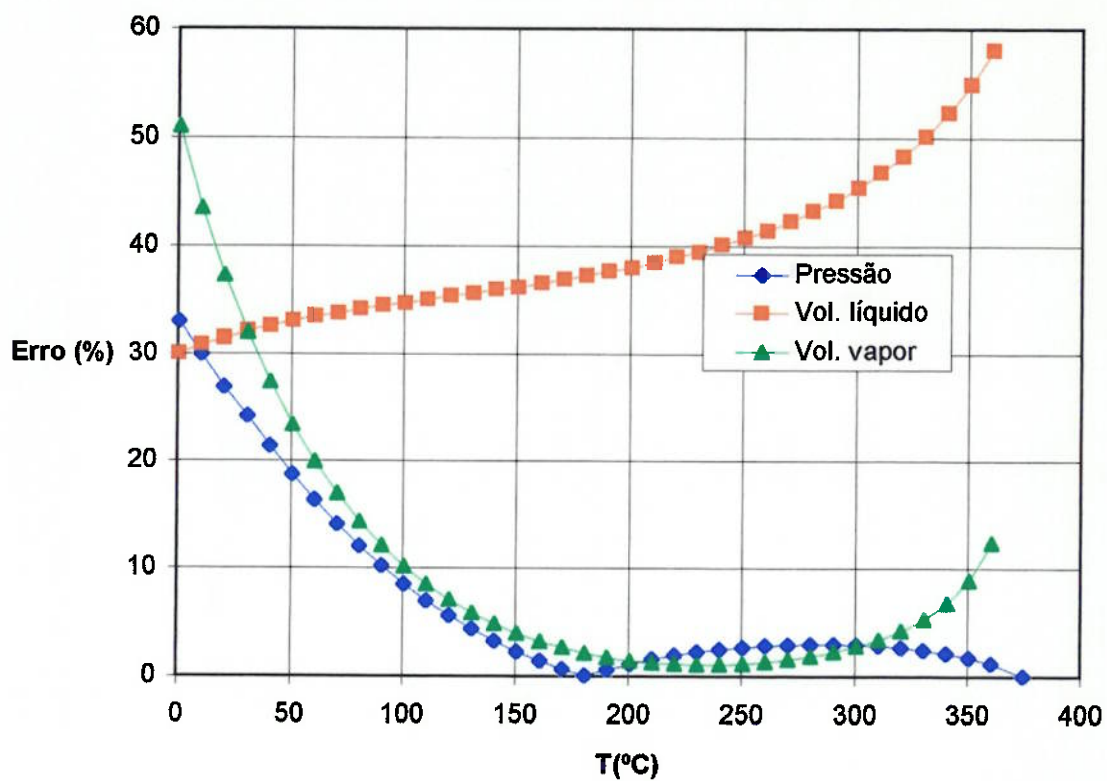
PROPRIEDADES DA ÁGUA SATURADA

Cálculo do Erro Relativo para a Equação Alterada de Soave

T (°C)	P_{calc}	P_{tab}	Ep	v_{liq} calc	v_{liq} tab	Ev_{liq}	v_{vapor} calc	v_{vapor} tab	Ev_{vapor}
0	0,00057	0,00061	6,8	0,000919	0,001000	8,1	220,0398	206,1400	6,7
10	0,00121	0,00123	1,4	0,000925	0,001000	7,5	107,9551	106,3800	1,5
20	0,00241	0,00234	3,0	0,000931	0,001002	7,1	56,0951	57,7900	2,9
30	0,00456	0,00425	7,4	0,000938	0,001004	6,6	30,6838	32,8900	6,7
40	0,00822	0,00738	11,3	0,000945	0,001008	6,3	17,5750	19,5200	10,0
50	0,01420	0,01235	15,0	0,000952	0,001012	5,9	10,4923	12,0300	12,8
60	0,02360	0,01994	18,4	0,000960	0,001017	5,6	6,50221	7,67100	15,2
70	0,03789	0,03119	21,5	0,000967	0,001023	5,5	4,16765	5,04200	17,3
80	0,05894	0,04739	24,4	0,000976	0,001029	5,2	2,75399	3,40700	19,2
90	0,08908	0,07014	27,0	0,000985	0,001036	4,9	1,87078	2,36100	20,8
100	0,13114	0,10132	29,4	0,000994	0,001044	4,8	1,30302	1,67290	22,1
110	0,18849	0,14327	31,6	0,001004	0,001052	4,6	0,92841	1,21020	23,3
120	0,26505	0,19853	33,5	0,001015	0,001060	4,2	0,67526	0,89190	24,3
130	0,36530	0,27010	35,2	0,001026	0,001070	4,1	0,50041	0,66850	25,1
140	0,49428	0,36130	36,8	0,001038	0,001080	3,9	0,37719	0,50890	25,9
150	0,65761	0,47580	38,2	0,001050	0,001091	3,8	0,28873	0,39280	26,5
160	0,86142	0,61780	39,4	0,001064	0,001102	3,4	0,22413	0,30710	27,0
170	1,11239	0,79170	40,5	0,001078	0,001114	3,2	0,17620	0,24280	27,4
180	1,41768	1,00210	41,5	0,001094	0,001127	2,9	0,14013	0,19405	27,8
190	1,78492	1,25440	42,3	0,001111	0,001141	2,6	0,11261	0,15654	28,1
200	2,22218	1,55380	43,0	0,001129	0,001157	2,4	0,09135	0,12736	28,3
210	2,73796	1,90620	43,6	0,001148	0,001173	2,1	0,07474	0,10441	28,4
220	3,34114	2,31800	44,1	0,001169	0,001190	1,8	0,06162	0,08619	28,5
230	4,04095	2,79500	44,6	0,001192	0,001209	1,4	0,05114	0,07158	28,6
240	4,84698	3,34400	44,9	0,001218	0,001229	0,9	0,04271	0,05976	28,5
250	5,76913	3,97300	45,2	0,001245	0,001251	0,5	0,03585	0,05013	28,5
260	6,81760	4,68800	45,4	0,001276	0,001276	0,0	0,03023	0,04221	28,4
270	8,00288	5,49900	45,5	0,001311	0,001302	0,7	0,02559	0,03564	28,2
280	9,33574	6,41200	45,6	0,001349	0,001332	1,3	0,02172	0,03017	28,0
290	10,8272	7,4360	45,6	0,001393	0,001366	2,0	0,01848	0,02557	27,7
300	12,4886	8,5810	45,5	0,001443	0,001404	2,8	0,01574	0,02167	27,4
310	14,3315	9,8560	45,4	0,001502	0,001447	3,8	0,01341	0,01835	26,9
320	16,3677	11,2740	45,2	0,001572	0,001499	4,9	0,01141	0,01549	26,3
330	18,6093	12,8450	44,9	0,001657	0,001561	6,1	0,00967	0,01300	25,6
340	21,0686	14,5860	44,4	0,001763	0,001638	7,6	0,00815	0,01080	24,5
350	23,7582	16,5130	43,9	0,001906	0,001740	9,5	0,00678	0,00881	23,0
360	26,6911	18,6510	43,1	0,002116	0,001893	11,8	0,00552	0,00695	20,6
370	29,8805	21,0300	42,1	0,002521	0,002213	13,9	0,00419	0,00493	14,9
374,1	31,2414	22,0900	41,4	0,003132	0,003155	0,7	0,00324	0,00316	2,8

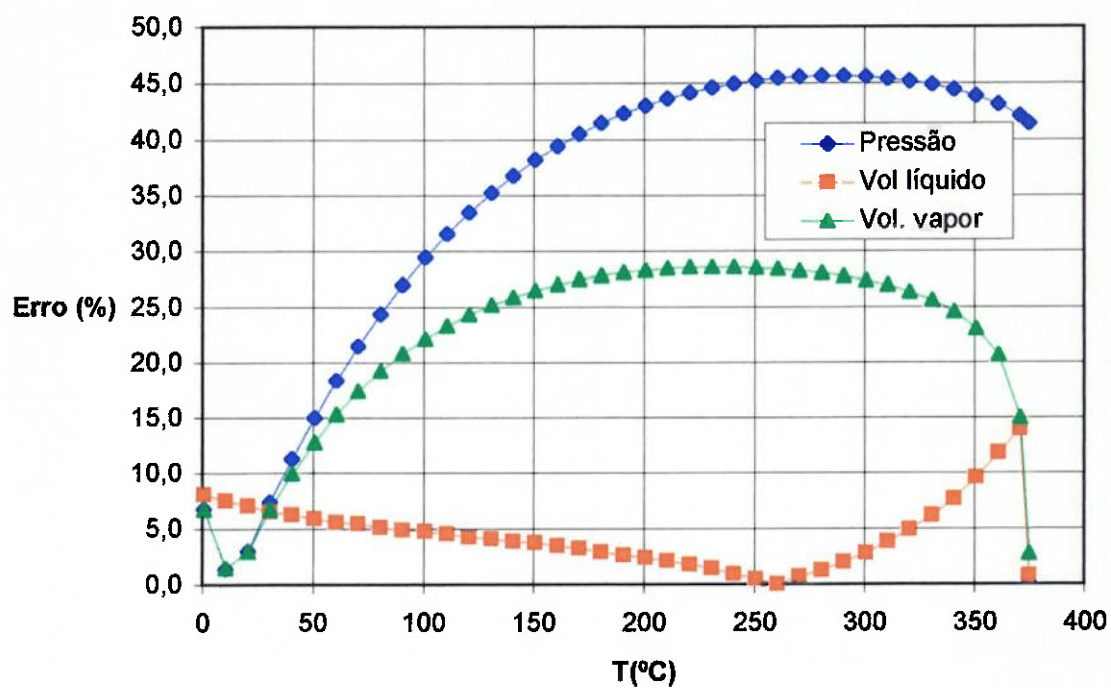
PROPRIEDADES DA ÁGUA

Gráfico do Erro Relativo p/ Equação Original de Soave



PROPRIEDADES DA ÁGUA

Gráfico do Erro Relativo p/ Equação Alterada de Soave



Anexo - 3

Listagem do programa
referente a equação de
Lee-Kesler

((Programa Final))

Devido ao grande volume da listagem do programa final, esta se encontra em um disquete presente na contra-capa final, no diretório “PRODITER”.

Anexo - 4

Resultados obtidos para
equação de Lee-Kesler

PROPRIEDADES DO METANO

Cálculo do Erro Relativo para a Equação de Lee-Kesler

Zona de Saturação

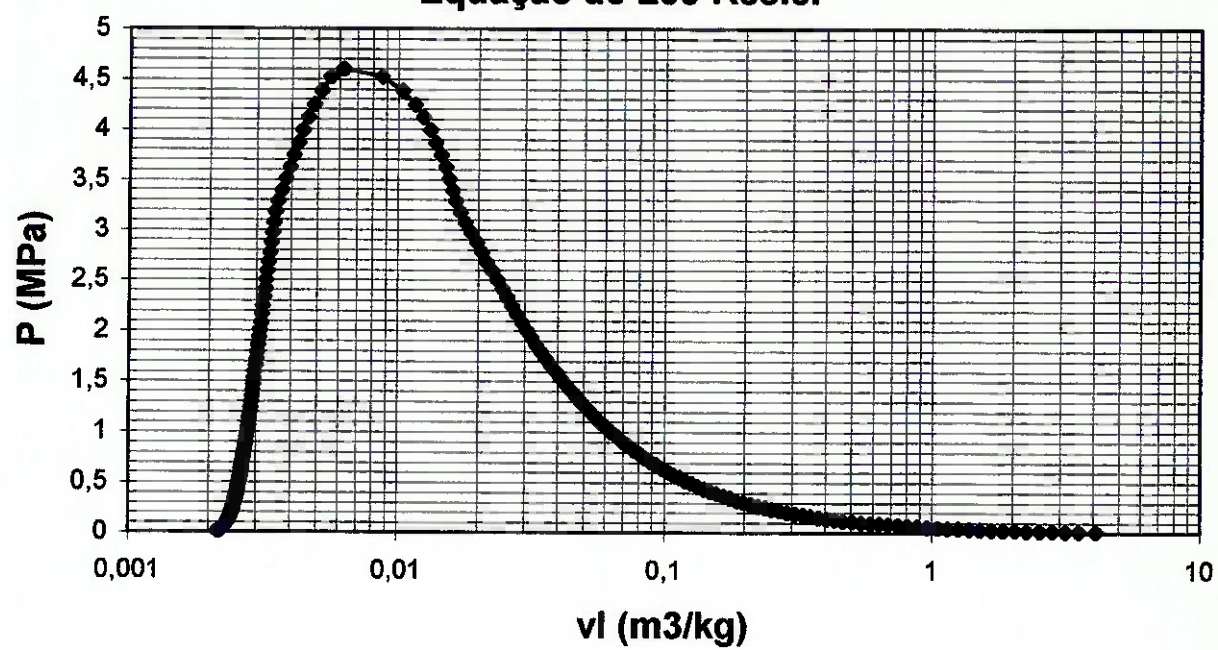
$T\text{ (K)}$	P_{calc}	P_{tab}	E_p	$v_{liq\ calc}$	$v_{liq\ tab}$	Ev_{liq}	$v_{vapor\ calc}$	$v_{vapor\ tab}$	Ev_{vapor}
100,0	0,0335	0,0345	-2,90	0,002250	0,002278	-1,23	1,519	1,479	2,7
120,0	0,1904	0,1919	-0,78	0,002437	0,002438	-0,04	0,308	0,306	0,7
140,0	0,6430	0,6422	0,12	0,002660	0,002652	0,30	0,098	0,098	0,00
160,0	1,5949	1,5940	0,06	0,002969	0,002971	-0,07	0,039	0,039	0,00
180,0	3,2866	3,2960	-0,29	0,003598	0,003619	-0,58	0,016	0,016	0,00
190,6	4,5990	4,5990	0,00	0,006233	0,006233	0,00	0,006	0,006	0,00

$T\text{ (K)}$	$h_{liq\ calc}$	$h_{liq\ tab}$	Es_{liq}	$h_{vapor\ calc}$	$h_{vapor\ tab}$	Es_{vapor}
100,0	-903,0	-903,0	0,00	-363,8	-372,4	-2,31
120,0	-838,8	-834,0	0,6	-340,4	-338,9	0,45
140,0	-771,9	-759,8	1,6	-325,3	-314,5	3,45
160,0	-698,3	-677,2	3,1	-323,7	-306,3	5,70
180,0	-605,2	-576,4	5,0	-359,2	-331,2	8,5
190,6	-529,5	-444,9	19,01	-529,5	-444,9	19,01

$T\text{ (K)}$	$s_{liq\ calc}$	$s_{liq\ tab}$	Es_{liq}	$s_{vapor\ calc}$	$s_{vapor\ tab}$	Es_{vapor}
100,0	-5,025	-5,025	0,00	0,361	0,281	22,16
120,0	-4,538	-4,393	3,3	-0,389	-0,267	31,36
140,0	-4,111	-3,830	7,3	-0,927	-0,649	29,99
160,0	-3,708	-3,298	12,4	-1,37	-0,980	28,47
180,0	-3,255	-2,738	18,88	-1,888	-1,376	27,12
190,6	-2,904	-2,065	40,63	-2,904	-2,065	28,89

Curva de Vapor do Metano

Equação de Lee-Kesler



PROPRIEDADES DO METANO

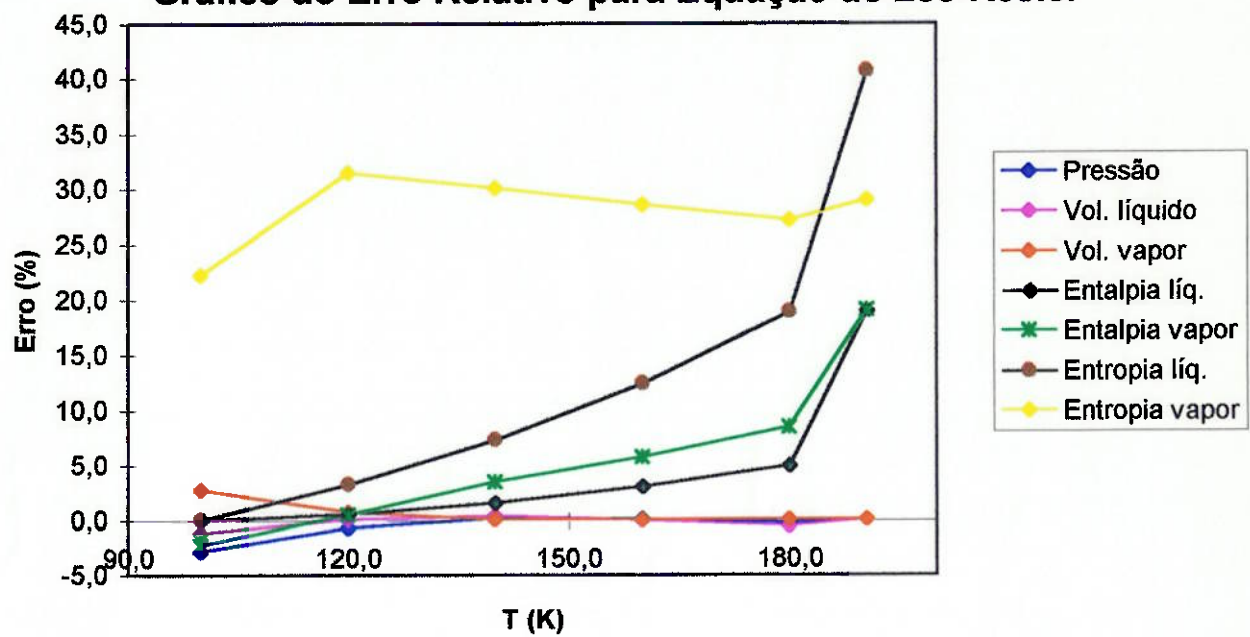
Cálculo do Erro Relativo para a Equação de Lee-Kesler

Zona de Vapor Superaquecido

P (Mpa)	T (K)	Prop calc	Prop tab	Ep	Prop calc	Prop tab	Ep	Prop calc	Prop tab	Ep
		300			400			500		
1,0	v	0,1527	0,1528	-0,07	0,206	0,2063	-0,15	0,2586	0,259	-0,15
	h	4,3	4,3	0,00	248,3	245,7	1,05	525,3	519,0	1,22
	s	0,017	0,017	0,00	0,568	0,709	-19,89	1,069	1,318	-18,89
4,0	v	0,0364	0,0363	0,28	0,051	0,051	0,00	0,0648	0,0648	0,00
	h	-25,1	-25,8	-2,55	232,3	229,4	1,26	515,7	509,7	1,16
	s	-0,774	-0,776	-0,26	-0,183	-0,043	76,50	0,332	0,581	-42,86
8,0	v	0,0171	0,0171	0,00	0,0253	0,0252	0,40	0,0325	0,0324	0,31
	h	-65,7	-66,6	-1,26	211,9	208,6	1,56	503,7	498,1	1,12
	s	-1,236	-1,239	-0,24	-0,586	-0,446	31,39	-0,052	0,198	-126,26

Metano Saturado

Gráfico do Erro Relativo para Equação de Lee-Kesler



PROPRIEDADES DO OCTANO

Cálculo do Erro Relativo para a Equação de Lee-Kesler

Zona de Saturação

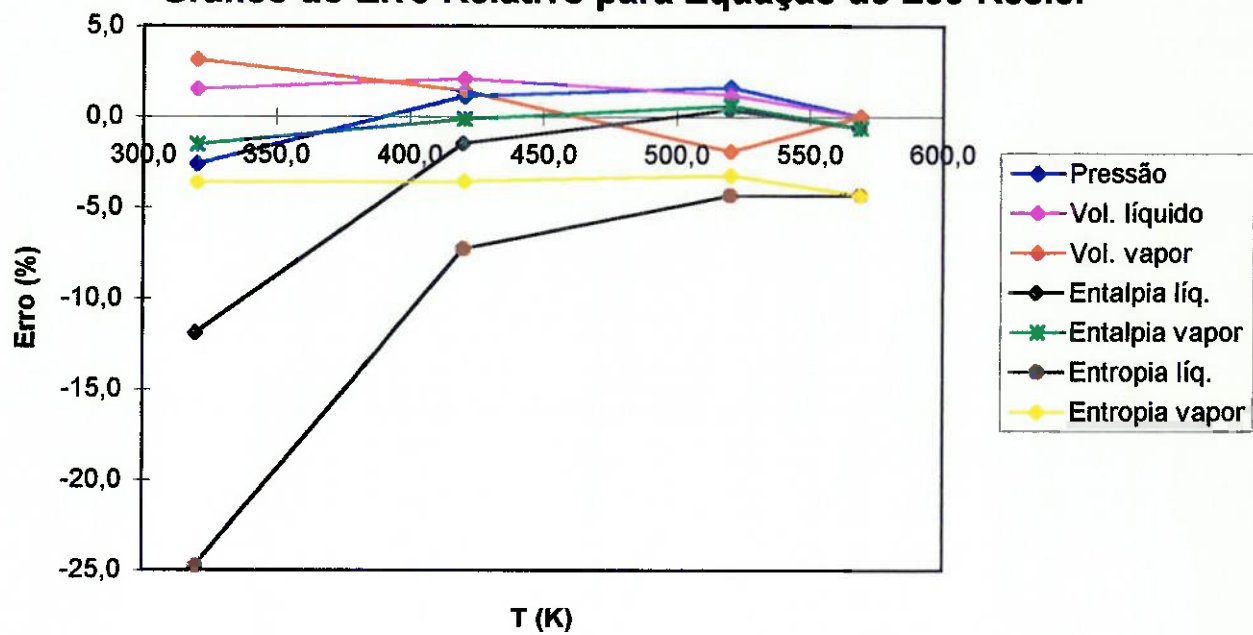
$T\text{ (K)}$	P_{calc}	P_{tab}	E_p	$v_{liq\ calc}$	$v_{liq\ tab}$	Ev_{liq}	$v_{vapor\ calc}$	$v_{vapor\ tab}$	Ev_{vapor}
220,0	0	0,0000	0,0	0,001322	-	-	5113,101	-	-
320,0	0,0056	0,0058	-2,61	0,001479	0,001457	1,5	4,1359	4,01	3,14
420,0	0,1778	0,1758	1,14	0,001720	0,001685	2,1	0,1577	0,1555	1,41
520,0	1,235	1,215	1,63	0,002186	0,002160	1,2	0,0206	0,021	-1,90
568,8	2,497	2,497	0,00	0,004260	0,004260	0,00	0,0043	0,0043	0,00

$T\text{ (K)}$	$h_{liq\ calc}$	$h_{liq\ tab}$	Eh_{liq}	$h_{vapor\ calc}$	$h_{vapor\ tab}$	Eh_{vapor}
220,0	-159,48	-159,48	0,00	249,98	-	-
320,0	50,32	57,12	-11,9	400,90	407,12	-1,53
420,0	305,92	310,42	-1,4	590,23	590,92	-0,12
520,0	605,75	603,32	0,4	790,83	785,92	0,6
568,8	794,10	799,02	-0,62	794,10	799,02	-0,62

$T\text{ (K)}$	$s_{liq\ calc}$	$s_{liq\ tab}$	Es_{liq}	$s_{vapor\ calc}$	$s_{vapor\ tab}$	Es_{vapor}
220,0	-0,595	-0,595	0,00	1,269	-	-
320,0	0,158	0,210	-24,8	1,257	1,304	-3,60
420,0	0,830	0,895	-7,3	1,506	1,562	-3,59
520,0	1,448	1,514	-4,36	1,804	1,865	-3,27
568,8	1,781	1,862	-4,35	1,781	1,862	-4,35

Octano Saturado

Gráfico do Erro Relativo para Equação de Lee-Kesler



PROPRIEDADES DO N-BUTANO

Cálculo do Erro Relativo para a Equação de Lee-Kesler

Zona de Saturação

$T\text{ (K)}$	P_{calc}	P_{tab}	E_p	$v_{liq\ calc}$	$v_{liq\ tab}$	Ev_{liq}	$v_{vapor\ calc}$	$v_{vapor\ tab}$	Ev_{vapor}
160,0	0,0000	0,0000	0,00	0,001385	0,001405	-1,4	694,850	654,000	6,2
220,0	0,0074	0,0078	-5,1	0,001531	0,001528	0,2	4,1991	4,0000	5,0
280,0	0,1322	0,1330	-0,58	0,001707	0,001686	1,2	0,2876	0,286	0,56
340,0	0,7577	0,7535	0,55	0,001952	0,001923	1,5	0,0533	0,0539	-1,11
400,0	2,5022	2,492	0,41	0,002455	0,002447	0,3	0,0136	0,0138	-1,45
425,2	3,7960	3,796	0,00	0,004405	0,004405	0,00	0,0044	0,0044	0,00

$T\text{ (K)}$	$h_{liq\ calc}$	$h_{liq\ tab}$	Eh_{liq}	$h_{vapor\ calc}$	$h_{vapor\ tab}$	Eh_{vapor}
160,0	-297,24	-297,24	0,00	183,21	176,79	3,63
220,0	-180,03	-174,85	3,0	253,16	253,08	0,03
280,0	-44,22	-36,40	21,5	335,17	337,26	-0,62
340,0	108,44	108,91	-0,4	419,08	422,15	-0,73
400,0	289,53	293,51	-1,4	484,82	488,61	-0,8
425,2	401,21	437,16	-8,22	401,21	437,16	-8,22

$T\text{ (K)}$	$s_{liq\ calc}$	$s_{liq\ tab}$	Es_{liq}	$s_{vapor\ calc}$	$s_{vapor\ tab}$	Es_{vapor}
160,0	-1,226	-1,226	-0,01	1,771	1,737	1,98
220,0	-0,653	-0,577	13,2	1,32	1,368	-3,52
280,0	-0,143	-0,123	16,3	1,211	1,309	-7,51
340,0	0,318	0,439	-27,5	1,23	1,360	-9,55
400,0	0,774	0,927	-16,52	1,261	1,415	-10,88
425,2	1,026	1,264	-18,83	1,026	1,264	-18,83

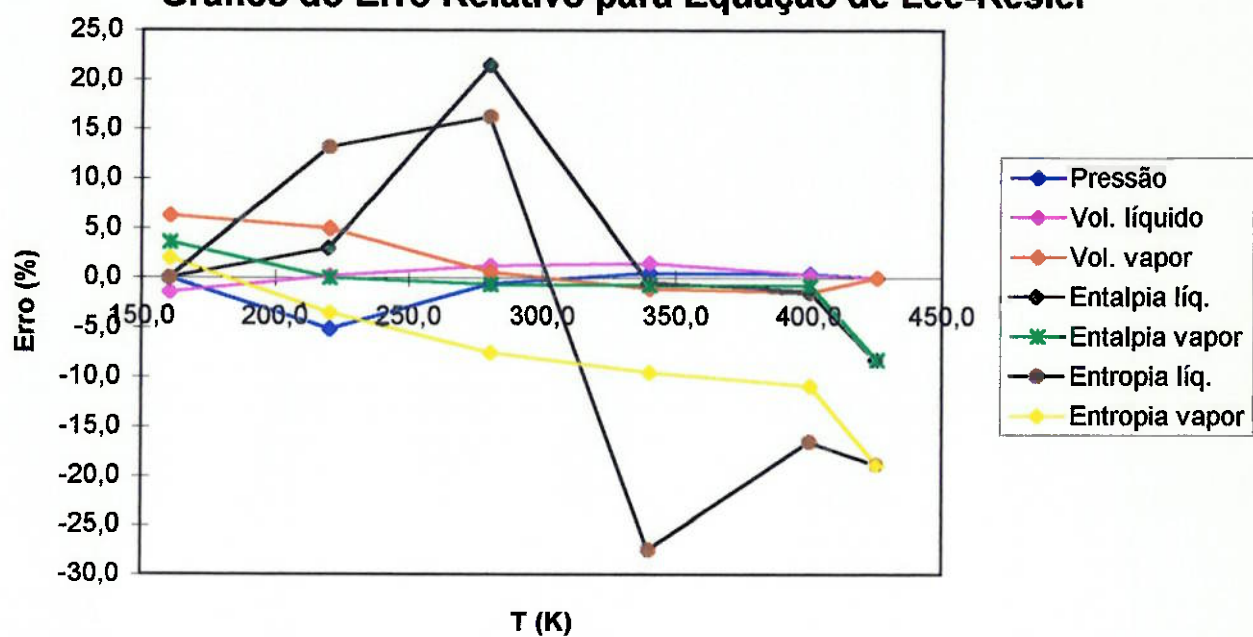
PROPRIEDADES DO N-BUTANO

Cálculo do Erro Relativo para a Equação de Lee-Kesler

Zona de Vapor Superaquecido

P (Mpa)	T (K)	Prop calc	Prop tab	Ep	Prop calc	Prop tab	Ep	Prop calc	Prop tab	Ep
		500			600			700		
2,0	v	0,0318	0,0318	0,00	0,0407	0,0406	0,25	0,0488	0,0487	0,21
	h	771,8	771,8	0,00	1053,2	1055,8	-0,25	1363,5	1367,8	-0,31
	s	1,898	1,898	0,00	2,384	2,414	-1,24	2,84	2,895	-1,90
4,0	v	0,0137	0,0137	0,00	0,0193	0,0192	0,52	0,0239	0,0237	0,84
	h	736,8	737,9	-0,15	1033,5	1036,8	-0,32	1350,3	1354,8	-0,33
	s	1,745	1,747	-0,11	2,259	2,291	-1,40	2,725	2,782	-2,05
8,0	v	0,0049	0,00482	1,66	0,0087	0,00868	0,23	0,0115	0,0114	0,88
	h	650,1	651,3	-0,18	992,5	996,8	-0,43	1324,3	1329,8	-0,41
	s	1,506	1,509	-0,20	2,106	2,141	-1,63	2,595	2,654	-2,22

Normal Butano Saturado
Gráfico do Erro Relativo para Equação de Lee-Kesler



PROPRIEDADES DA ÁGUA

Cálculo do Erro Relativo para a Equação de Lee-Kesler

Zona de Saturação

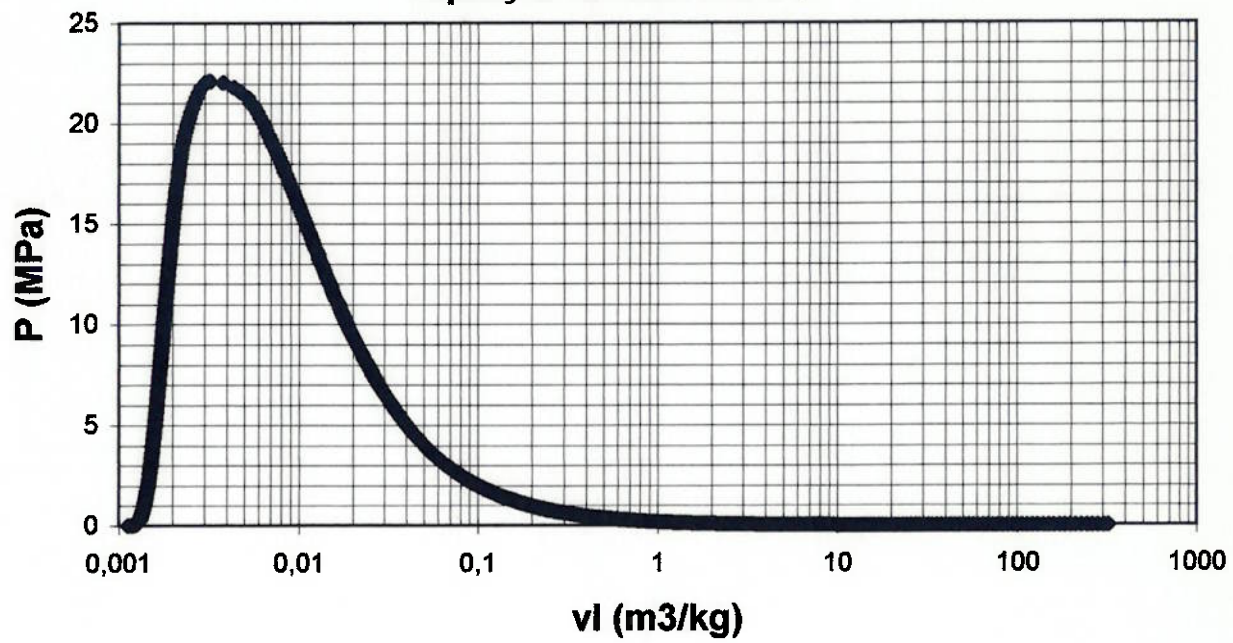
<i>T (K)</i>	<i>P_{calc}</i>	<i>P_{tab}</i>	<i>E_p</i>	<i>v_{liq calc}</i>	<i>v_{liq tab}</i>	<i>Ev_{liq}</i>	<i>v_{vapor calc}</i>	<i>v_{vapor tab}</i>	<i>Ev_{vapor}</i>
300,0	0,0026	0,0035	-26,4	0,001156	0,001003	15,3	54,153	39,130	38,4
350,0	0,0356	0,0416	-14,5	0,001220	0,001027	18,8	4,5139	3,8460	17,4
400,0	0,2324	0,2455	-5,34	0,001294	0,001067	21,3	0,7778	0,7310	6,40
450,0	0,9302	0,9319	-0,18	0,001382	0,001123	23,1	0,2105	0,2080	1,20
500,0	2,6874	2,6400	1,80	0,001491	0,001203	23,9	0,0755	0,0766	-1,44
550,0	6,2276	6,1190	1,77	0,001638	0,001323	23,8	0,0319	0,0317	0,63
600,0	12,468	12,350	0,96	0,001877	0,001541	21,8	0,0142	0,0137	3,65
647,3	22,120	22,120	0,00	0,003170	0,003127	1,38	0,0032	0,0032	0,00

<i>T (K)</i>	<i>h_{liq calc}</i>	<i>h_{liq tab}</i>	<i>Eh_{liq}</i>	<i>h_{vapor calc}</i>	<i>h_{vapor tab}</i>	<i>Eh_{vapor}</i>
300,0	9,77800	9,77800	0,00	2635,067	2447,28	7,67
350,0	276,759	218,978	26,4	2726,443	2536,28	7,50
400,0	543,319	387,678	40,1	2810,808	2613,28	7,56
450,0	806,745	646,478	24,8	2878,905	2670,28	7,81
500,0	1070,02	872,878	22,6	2919,781	2698,28	8,21
550,0	1341,86	1117,278	20,1	2918,910	2681,28	8,86
600,0	1645,17	1403,278	17,2	2841,481	2579,28	10,2
647,3	2149,21	2004,278	7,23	2149,213	2004,28	7,23

<i>T (K)</i>	<i>s_{liq calc}</i>	<i>s_{liq tab}</i>	<i>Es_{liq}</i>	<i>s_{vapor calc}</i>	<i>s_{vapor tab}</i>	<i>Es_{vapor}</i>
300,0	0,030	0,030	0,00	8,806	8,157	7,96
350,0	0,782	0,675	15,9	7,803	7,294	6,98
400,0	1,431	1,242	15,2	7,112	6,695	6,23
450,0	1,995	1,746	14,3	6,601	6,244	5,72
500,0	2,496	2,218	12,5	6,191	5,870	5,47
550,0	2,960	2,676	10,6	5,822	5,519	5,49
600,0	3,428	3,157	8,58	5,418	5,117	5,88
647,3	4,165	4,080	2,08	4,165	4,080	2,08

Curva de Vapor da Água

Equação de Lee-Kesler



PROPRIEDADES DA ÁGUA

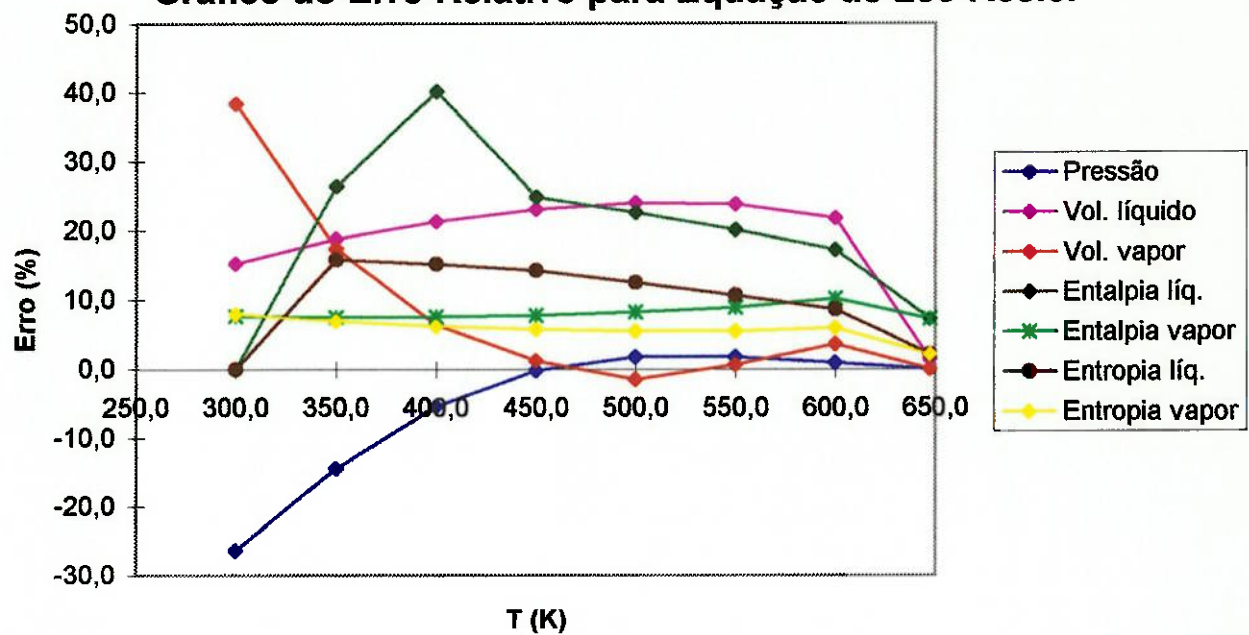
Cálculo do Erro Relativo para a Equação de Lee-Kesler

Zona de Vapor Superaquecido

P (Mpa)	T (K)	Prop calc	Prop tab	Ep	Prop calc	Prop tab	Ep	Prop calc	Prop tab	Ep
		600			700			800		
1,0	v	0,2708	0,271	-0,07	0,319	0,319	0,00	0,3664	0,367	-0,16
	h	3196,0	3196,0	0,00	3407,8	3409,0	-0,03	3623,3	3624,0	-0,02
	s	7,044	7,044	0,00	7,3	7,371	-0,96	7,526	7,658	-1,72
6,0	v	0,0396	0,0396	0,00	0,0498	0,05	-0,40	0,0589	0,0589	0,00
	h	3074,5	3063,0	0,37	3329,3	3334,0	-0,14	3567,5	3572,0	-0,13
	s	6,067	6,045	0,36	6,389	6,465	-1,18	6,646	6,786	-2,06
10,0	v	0,0204	0,0201	1,49	0,0281	0,0283	-0,71	0,0342	0,0343	-0,29
	h	2948,8	2907,0	1,44	3260,2	3266,0	-0,18	3520,9	3529,0	-0,23
	s	5,668	5,596	1,29	6,079	6,155	-1,23	6,365	6,506	-2,17

Água Saturada

Gráfico do Erro Relativo para Equação de Lee-Kesler



PROPRIEDADES DA AMÔNIA

Cálculo do Erro Relativo para a Equação de Lee-Kesler

Zona de Saturação

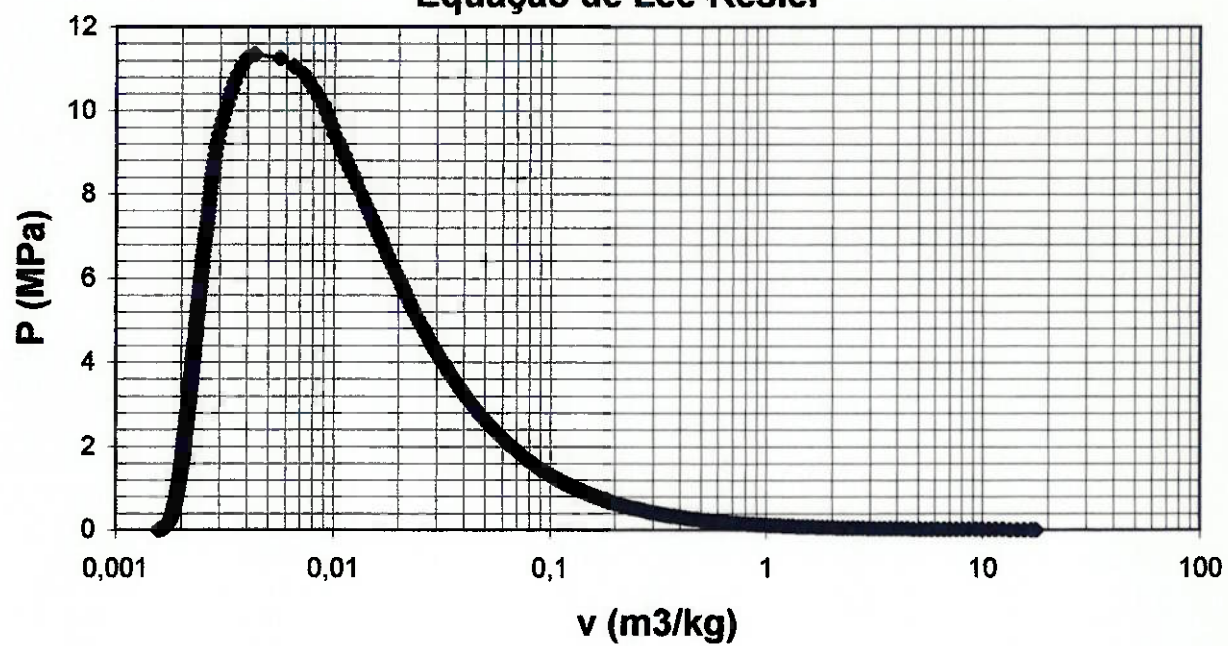
<i>T (K)</i>	<i>P_{calc}</i>	<i>P_{tab}</i>	<i>E_p</i>	<i>v_{liq calc}</i>	<i>v_{liq tab}</i>	<i>Ev_{liq}</i>	<i>v_{vapor calc}</i>	<i>v_{vapor tab}</i>	<i>Ev_{vapor}</i>
200,0	0,0078	0,0087	-9,8	0,001597	0,001372	16,4	12,408	11,237	10,4
250,0	0,1632	0,1650	-1,1	0,001751	0,001495	17,1	0,728	0,7120	2,2
300,0	1,0797	1,0610	1,76	0,001950	0,001666	17,0	0,1218	0,1210	0,66
350,0	3,9071	3,8640	1,12	0,002252	0,001952	15,4	0,0329	0,0319	3,13
400,0	10,311	10,300	0,10	0,003303	0,002882	14,6	0,0085	0,0077	10,39
405,5	11,350	11,300	0,44	0,004257	0,004255	0,05	0,0043	0,0043	0,00

<i>T (K)</i>	<i>h_{liq calc}</i>	<i>h_{liq tab}</i>	<i>Eh_{liq}</i>	<i>h_{vapor calc}</i>	<i>h_{vapor tab}</i>	<i>Eh_{vapor}</i>
200,0	-492,83	-492,83	0,00	1035,477	984,47	5,18
250,0	-242,20	-272,23	-11,0	1123,386	1066,57	5,33
300,0	9,414	13,03	-27,8	1186,351	1117,47	6,16
350,0	274,64	215,97	27,2	1196,325	1111,07	7,67
400,0	641,69	572,47	12,1	879,986	924,97	-4,9
405,5	723,53	738,67	-2,05	723,53	738,67	-2,05

<i>T (K)</i>	<i>s_{liq calc}</i>	<i>s_{liq tab}</i>	<i>Es_{liq}</i>	<i>s_{vapor calc}</i>	<i>s_{vapor tab}</i>	<i>Es_{vapor}</i>
200,0	-1,803	-1,803	0,00	5,856	5,584	4,87
250,0	-0,794	-0,820	-3,2	4,675	4,536	3,06
300,0	0,028	0,021	33,3	3,947	3,880	1,73
350,0	0,751	0,794	-5,4	3,380	3,351	0,87
400,0	1,614	1,699	-5,0	2,210	2,580	-14,34
405,5	1,802	2,102	-14,27	1,802	2,102	-14,27

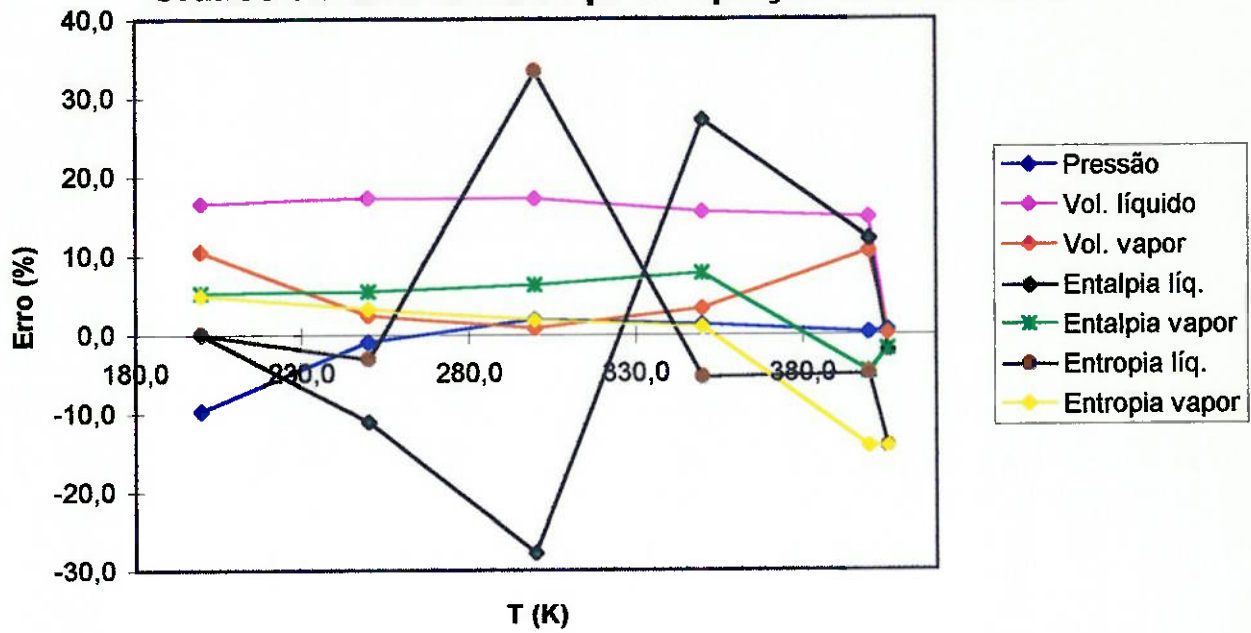
Curva de Vapor da Amônia

Equação de Lee-Kesler



Amônia Saturada

Gráfico do Erro Relativo para Equação de Lee-Kesler



Anexo - 5

Exemplos de Gráficos

Diagrama P x T da Zona de Saturação

Metano

P (MPa)

4.5
4.0
3.5
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5

98 105 112 119 126 133 140 147 154 161 168 175 182 189

T

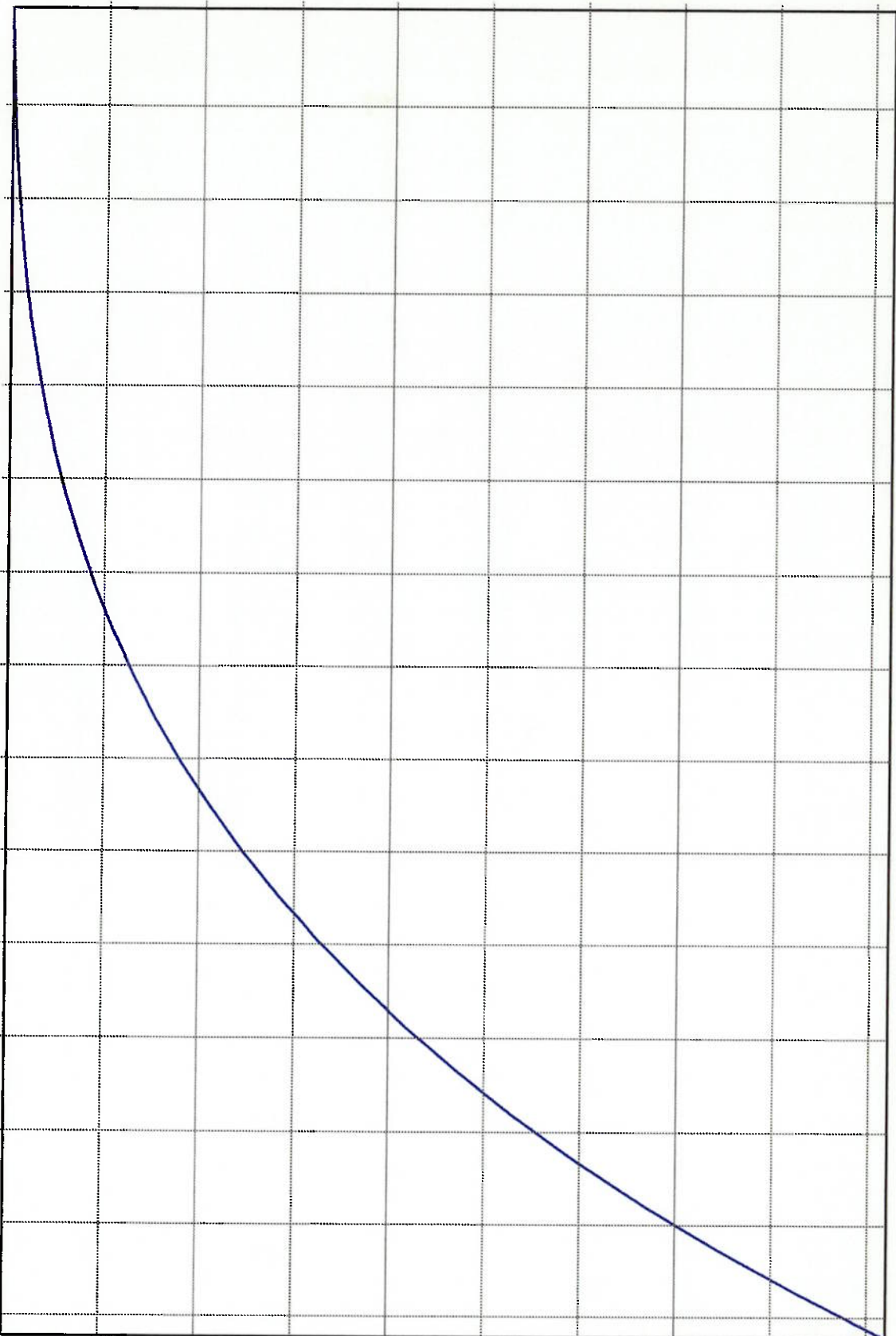


Diagrama P x V

Propano

P (MPa)

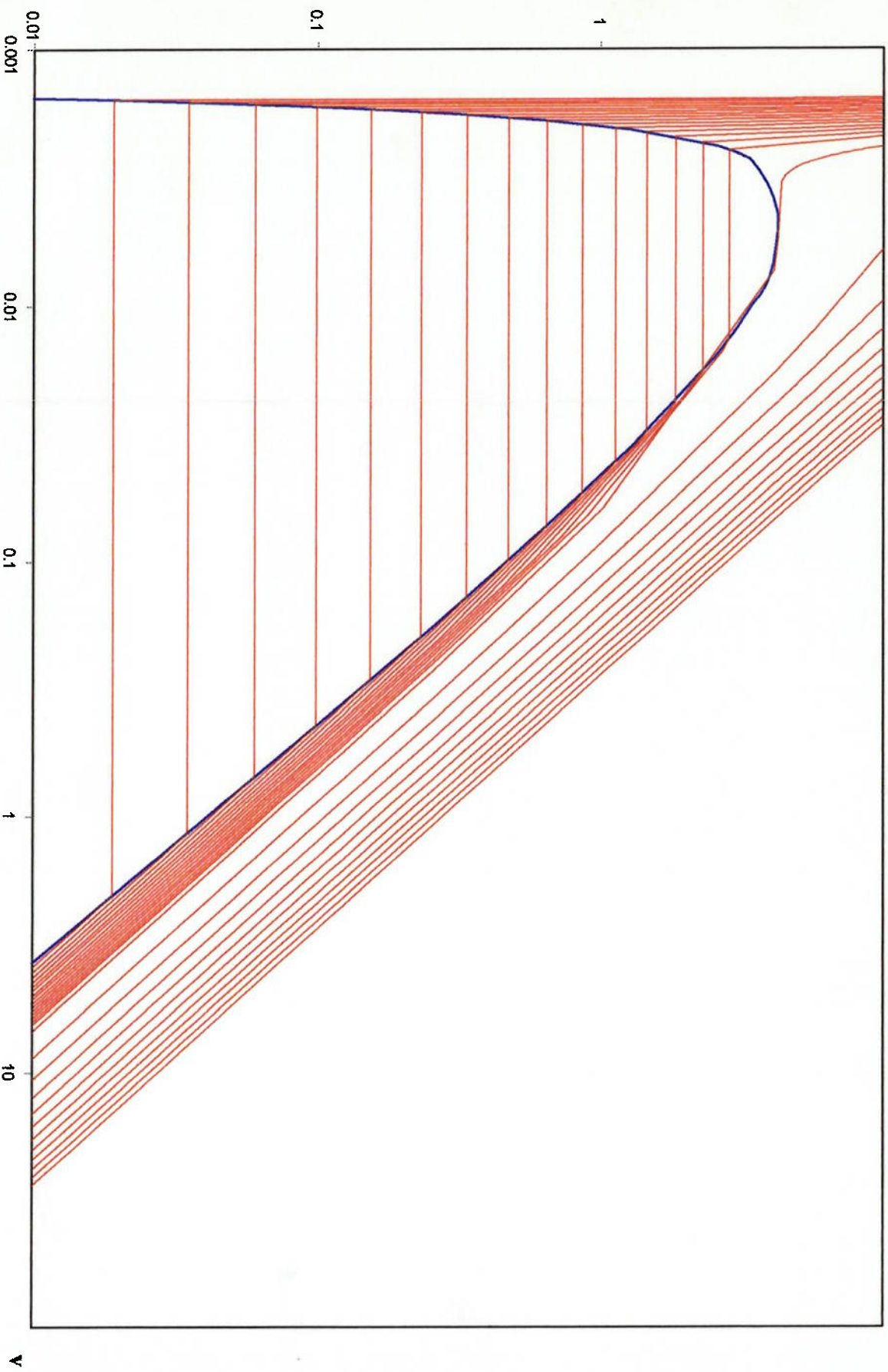


Diagrama P x h

Amônia

P (MPa)

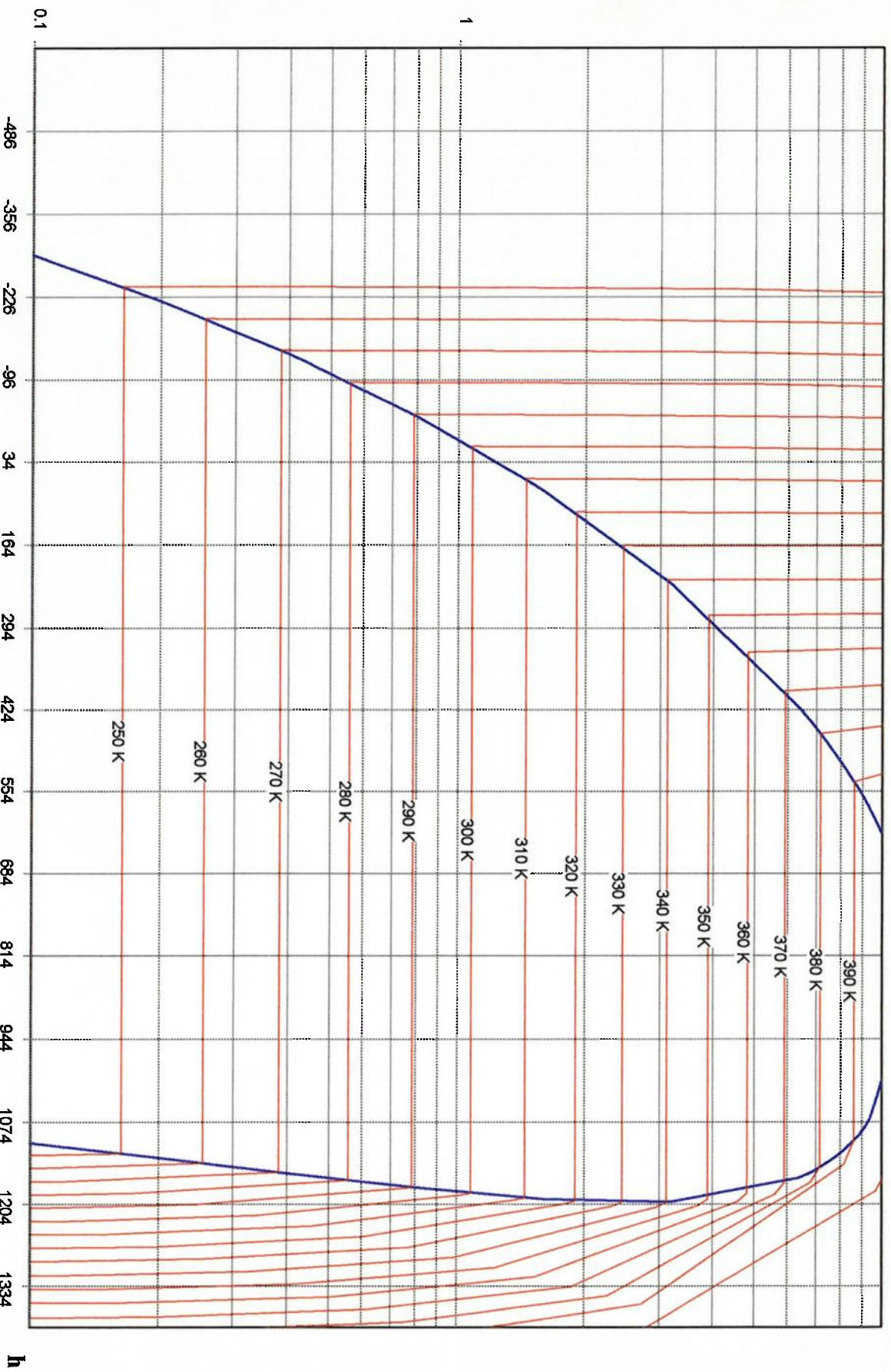


Diagrama P x h

Dodecana

P (MPa)

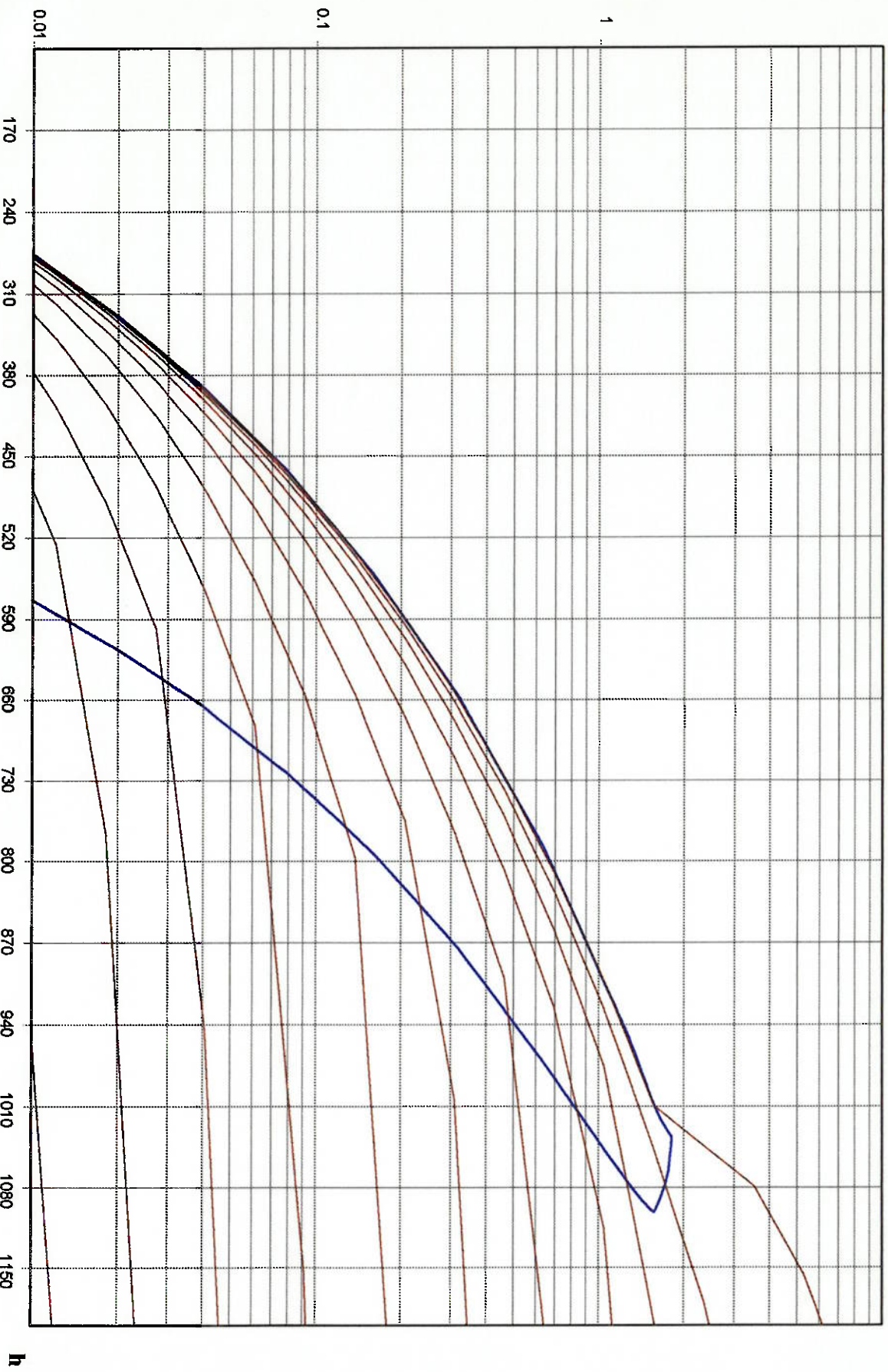
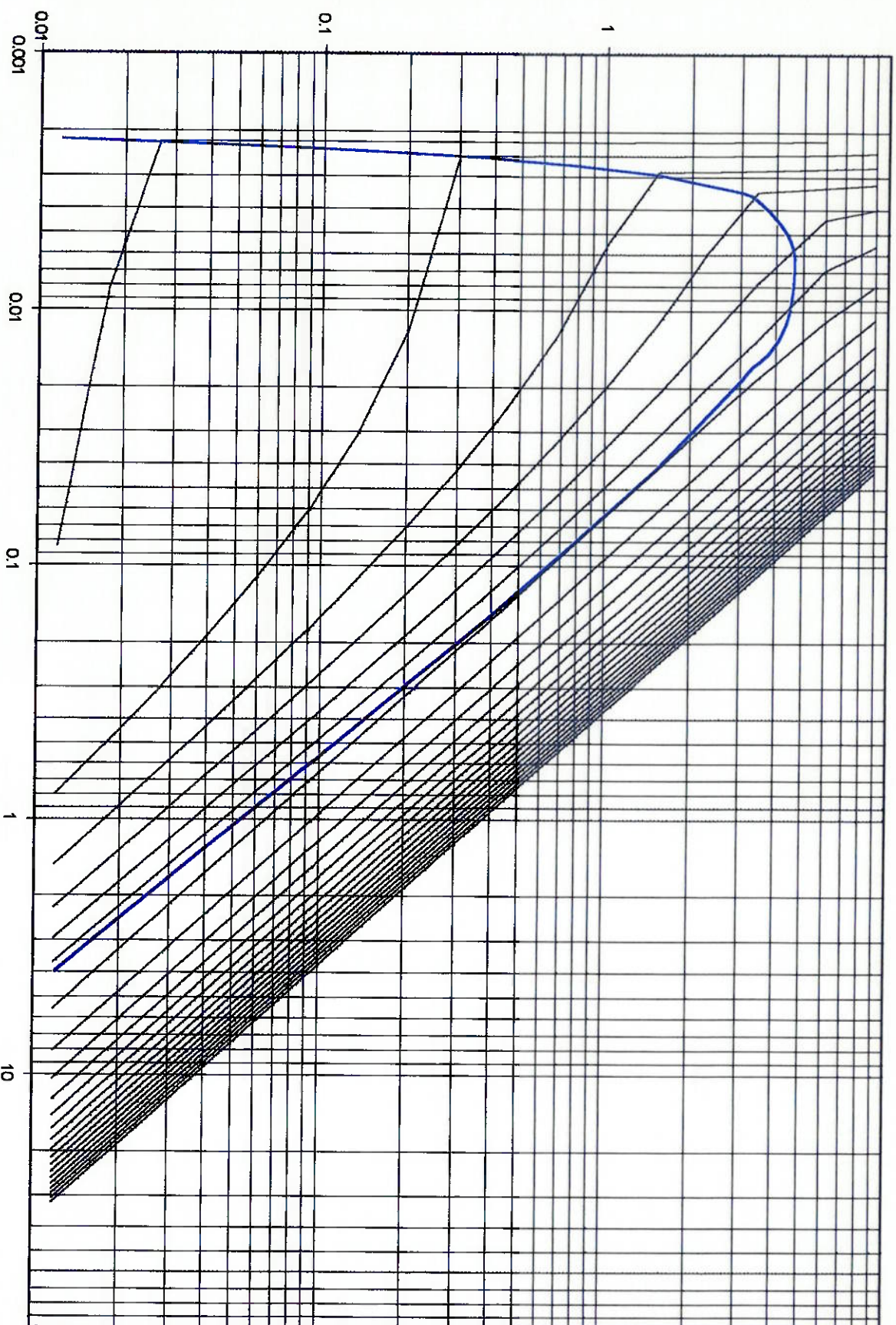


Diagrama P x v

Metano

P (MPa)

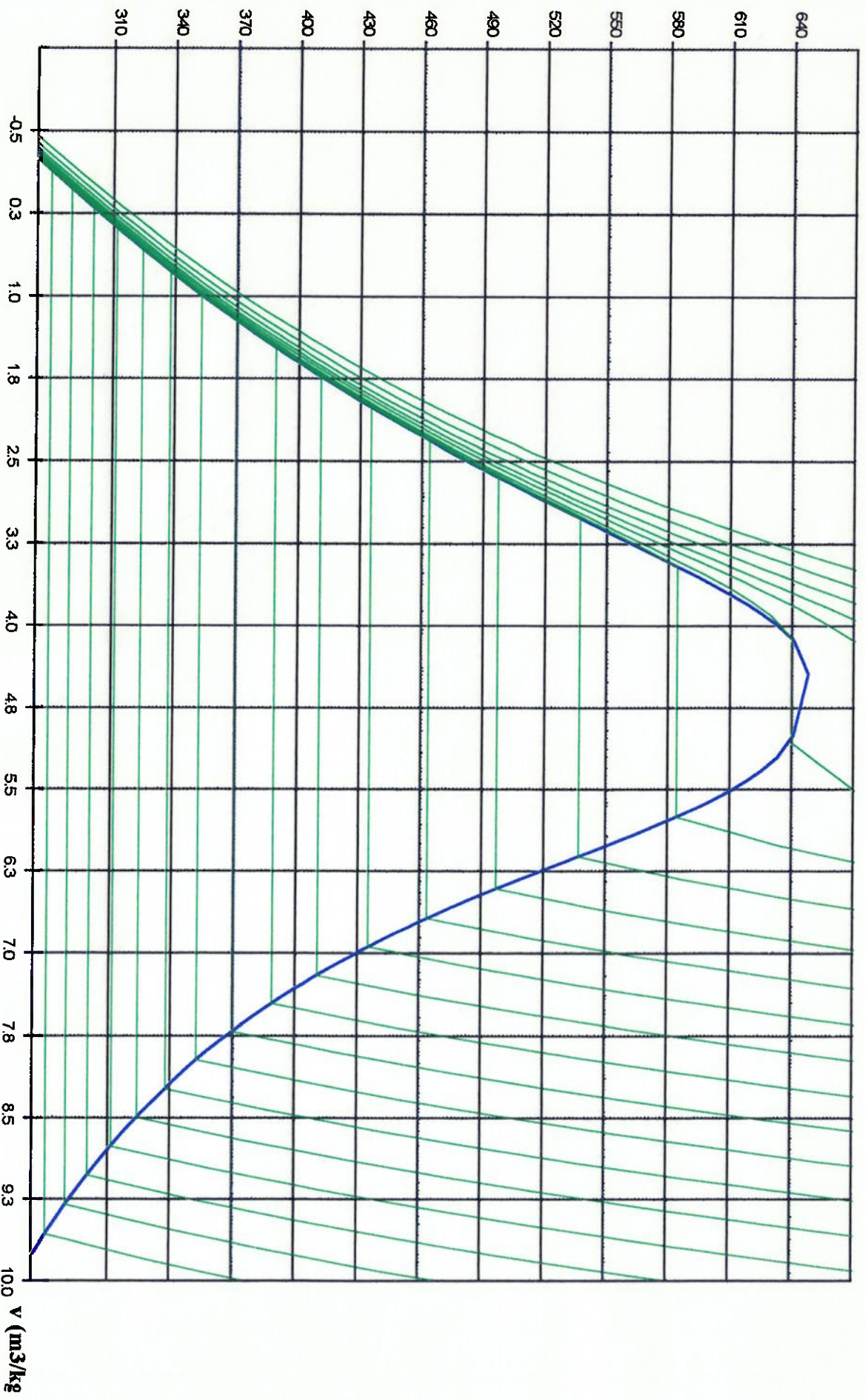


v (m³/kg)

Diagrama T x s

Agua

P (MPa)

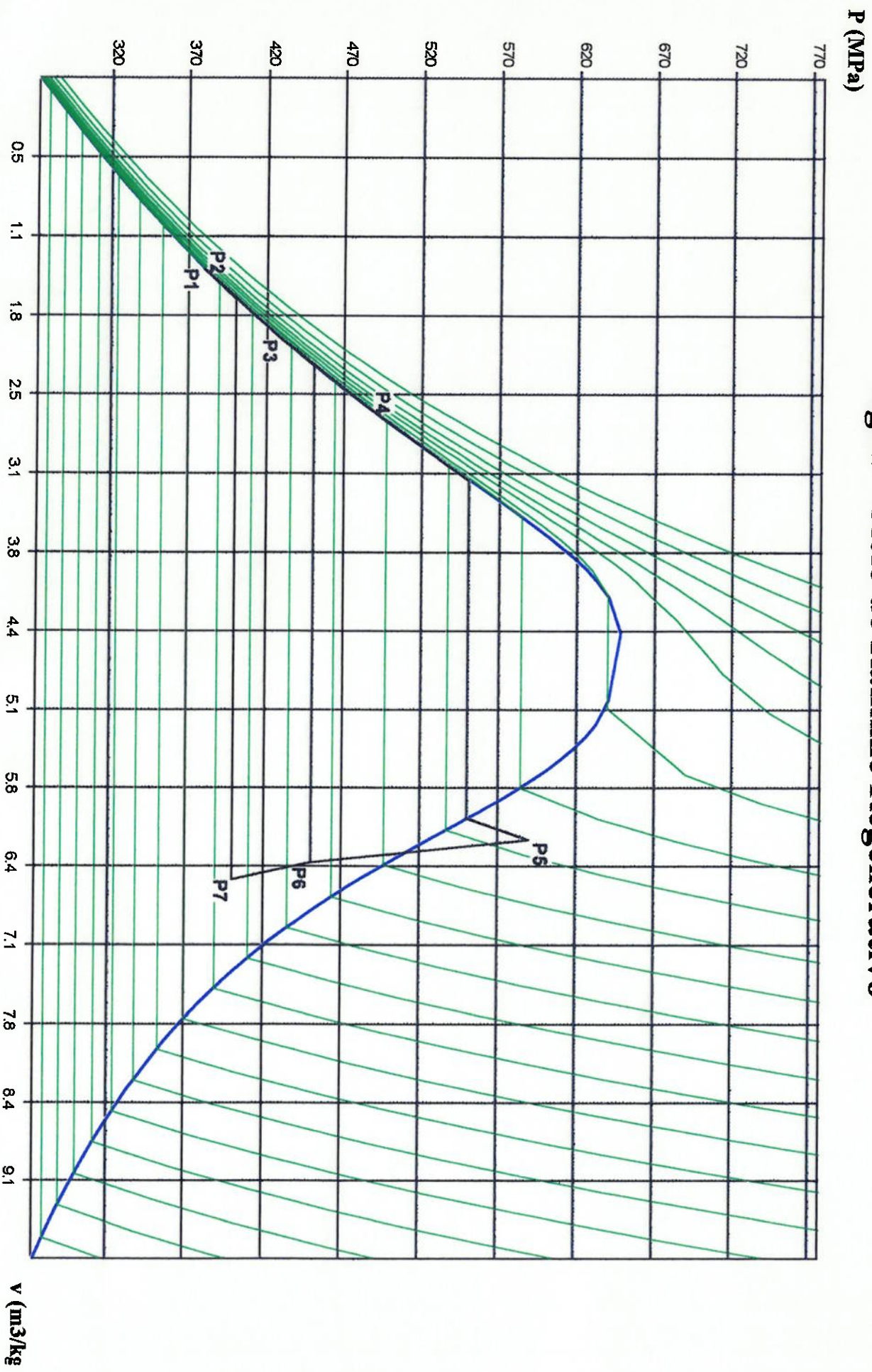


Anexo = 6

Exemplos de Ciclos

Diagrama T x s

Agua - Ciclo de Rankine Regenerativo



Ar - Ciclo Padrão a Ar de Brayton

Diagrama T x s

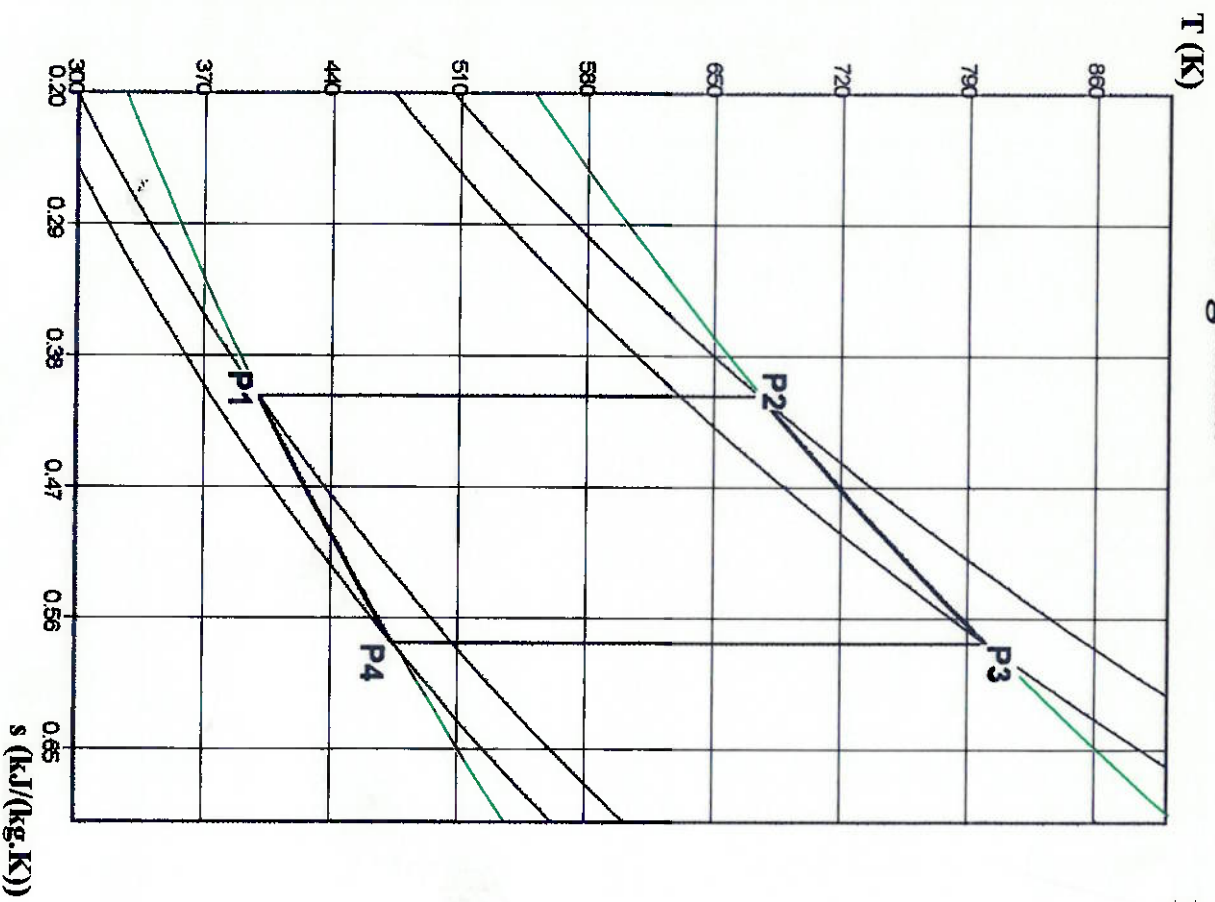
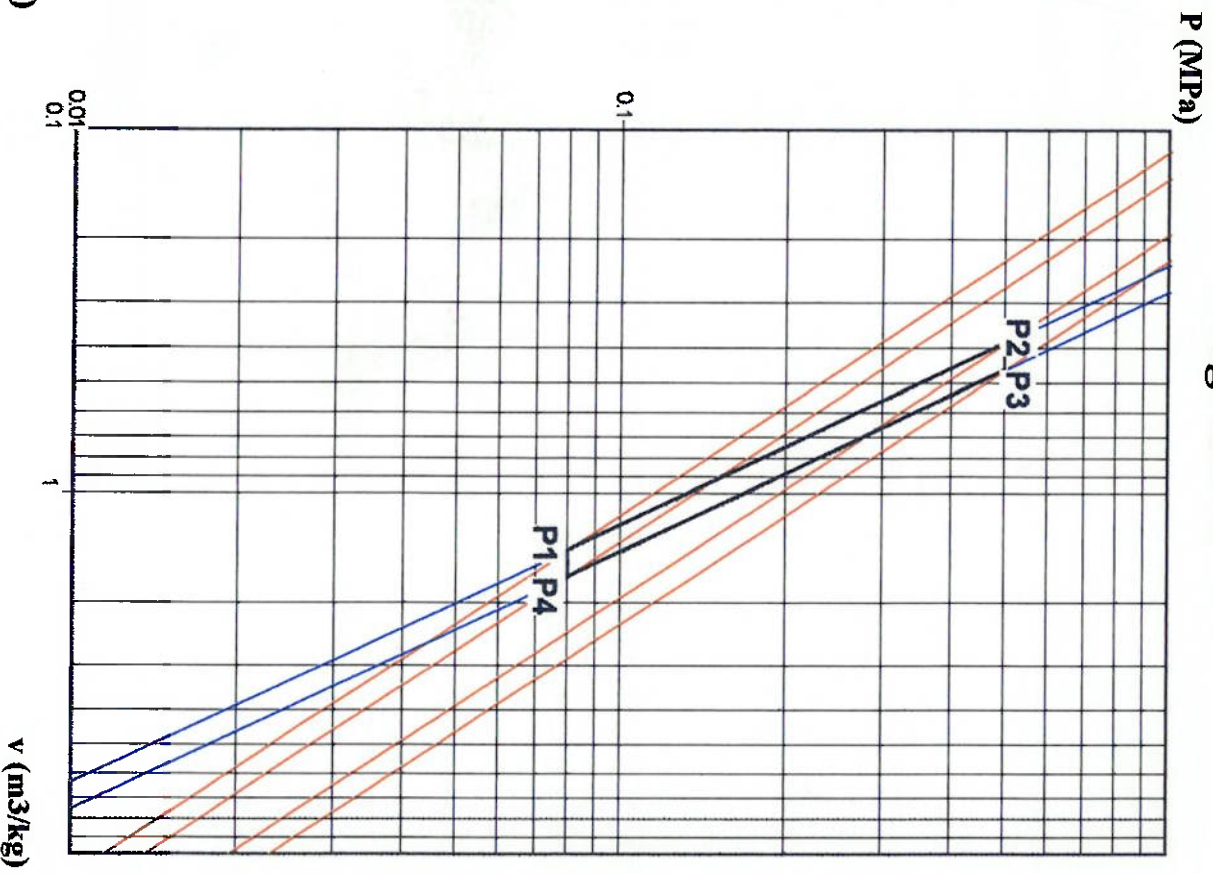


Diagrama P x v



Anexo - 7

Artigo enviado ao CIDIM

PROGRAMA COMPUTACIONAL DIDÁTICO PARA TERMODINÂMICA *PRODITER*

Emília Villani
Juceline D. F. Pessanha
José R. Simões Moreira

Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
Departamento de Engenharia Mecânica
SISEA - Laboratório de Sistemas Energéticos Alternativos
e-mail: jrsimoes@usp.br
caixa postal: 61548 - cep: 05424-970 - São Paulo - SP, BRASIL
Tel.: (+5511) 818-5339 - Fax: (+5511) 813-1886

RESUMO

Este trabalho apresenta o PRODITER, um programa computacional auxiliar ao aprendizado de termodinâmica clássica. Desenvolvido em linguagem visual, o programa permite ao usuário calcular as propriedades do fluido de trabalho, traçar os diagramas termodinâmicos mais importantes e visualizar processos termodinâmicos elementares, bem como o estudo de ciclos termodinâmicos. Em um ambiente gráfico, pode-se trabalhar tanto com gases perfeitos ou fluidos reais, obtendo-se resultados confiáveis e valores de propriedades bastante satisfatórios, considerando-se a sua finalidade didática.

PALAVRAS CHAVES

Programa didático, diagramas termodinâmicos, ciclos termodinâmicos, processos termodinâmicos.

INTRODUÇÃO

Com o objetivo de auxiliar o aprendizado de termodinâmica clássica, foi desenvolvido um programa computacional didático que permite ao usuário o estudo de diversos processos e ciclos termodinâmicos básicos, além da construção de diagramas de estado num ambiente computacional gráfico interativo.

Entre os recursos oferecidos pelo programa destacam-se a interface gráfica tipo Windows 95 e a possibilidade de cálculos das propriedades usando uma equação de estado realista e contemplando diversas substâncias. Existem diversas combinações de dados de entrada para as regiões de mudança de fase e de fase líquida ou vapor.

CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS E DEFINIÇÕES

O programa computacional didático de termodinâmica, PRODITER, permite calcular propriedades tanto do ponto de vista de gases perfeitos como de gases reais. A seguir, conceitos importantes são revistos, bem como uma breve descrição do equacionamento.

Gases Perfeitos

O programa emprega a conhecida equação dos gases ideais dada por:

$$P v = R T, \quad (1)$$

onde: P é a pressão, v é o volume específico, R é a constante particular do gás e T é a temperatura. Além disso, o conhecimento do calor específico a baixa pressão do gás permite calcular as demais propriedades, como entalpia e entropia específicas.

Fluidos Reais

Para os fluidos reais, utiliza-se a equação de estado de Lee e Kesler (1975), que é que uma variante da equação de estado de três parâmetros proposta por Benedict-Webb-Rubin, usando o conceito de fator de acentricidade. Basicamente a Eq. (1) é modificada pela introdução do conceito de fator de compressibilidade, Z , de forma que:

$$P v = Z R T, \quad (2)$$

onde a expressão de Z é fornecida no trabalho destes autores, bem como o procedimento para o cálculo das propriedades reduzidas. Ampla faixa de temperatura e pressão são cobertas, incluindo as regiões de líquido comprimido, vapor superaquecido e saturação. Porém a equação apresenta convergência pobre próximo ao ponto crítico e um método de aproximação e ajuste de pontos foi necessário para melhor representar esta região.

O programa utiliza um banco de dados, onde constam os valores de calor específico a pressão constante (baixa pressão), a massa molecular, as propriedades críticas, além da entalpia e entropia de referência para diversas substâncias. Este banco de dados é flexível e pode ser modificado para incluir dados de outras substâncias.

Curvas de Saturação

Para a determinação da curva de pressão de vapor, são oferecidos ao usuário três métodos:

- 1 - *Método da Fugacidade* - utiliza-se a igualdade de fugacidades entre as fases de líquido e vapor na saturação. A expressão para o cálculo da fugacidade é fornecida por Lee e Kesler em seu artigo e é função apenas do fator de compressibilidade e das propriedades reduzidas.
- 2 - *Equação de Pressão de Vapor de Lee-Kesler* - calcula-se a pressão de vapor através de uma equação proposta por Lee e Kesler em seu trabalho, onde a pressão de saturação é função da temperatura reduzida, T_r , e do fator de acentricidade, ω .
- 3 - *Equação de Pressão de Vapor compilada por Reid e outros (1987)* - são aproximações para a curva de pressão de vapor propostas por Reid e outros, ajustadas para diversas substâncias. Esta é a forma mais recomendada, sendo que o banco de dados inclui os coeficientes das curvas de ajuste para várias substâncias.

OS RECURSOS DO PROGRAMA

Quando o usuário executa o PRODITER, ele é conduzido a janela principal, onde, através de um menu, ele pode escolher entre as diversas opções de trabalho disponíveis, como ilustrado na Fig. 1.

Após a seleção de uma opção, a primeira providência consiste em escolher a substância de trabalho, as equações a serem usadas e, quando necessário, a zona de atuação (líquido, mistura líquido-vapor e vapor). A escolha de gás perfeito ou real está disponível para quase todos os recursos do PRODITER. As opções apresentadas pelo programa são descritas abaixo.

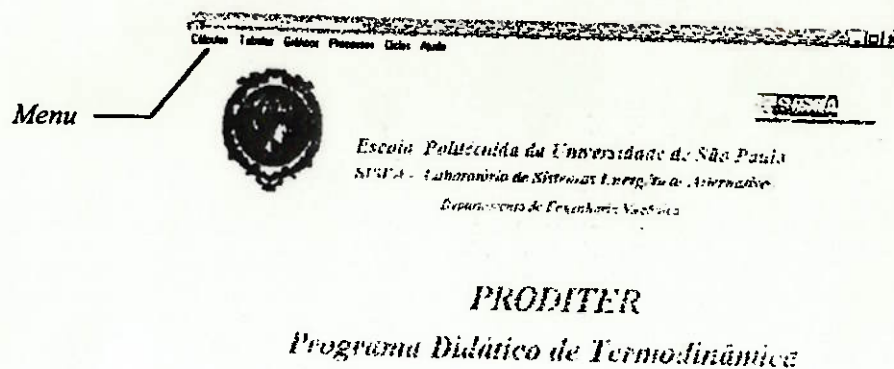


Figura 1 - Janela Principal do PRODITER.

Opção 1 - Cálculo das Propriedades

Esta é a primeira opção do menu da janela principal do programa (Fig. 1). Ao selecioná-la, o programa apresenta a janela de cálculos (Fig. 2), onde o usuário deve fornecer duas propriedades independentes, tais como P e T fora da zona de saturação. O programa passa a verificar a consistência dos dados e então calcula as propriedades incógnitas, dispondo os resultados, como visto na figura.

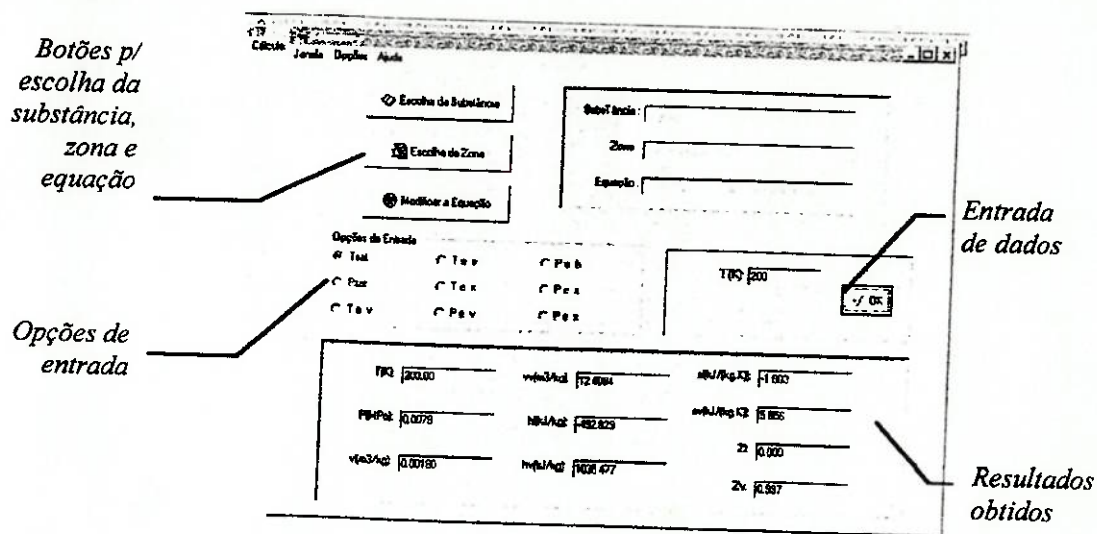


Figura 2 - Janela de Cálculo de Propriedades.

Opção 2 - Construção de Tabelas Termodinâmicas

A opção seguinte é a construção de tabelas de propriedades. Aqui o usuário deve definir os limites de pressão e temperatura e os passos de cálculo desejados. No caso da zona de saturação a tabela pode ser construída determinando-se os limites e o passo para temperatura ou para pressão. Um exemplo de construção de tabela de vapor para o metano é apresentado na Fig. 3.

Finalmente, o usuário pode salvar a tabela em arquivo texto para futura manipulação e impressão.

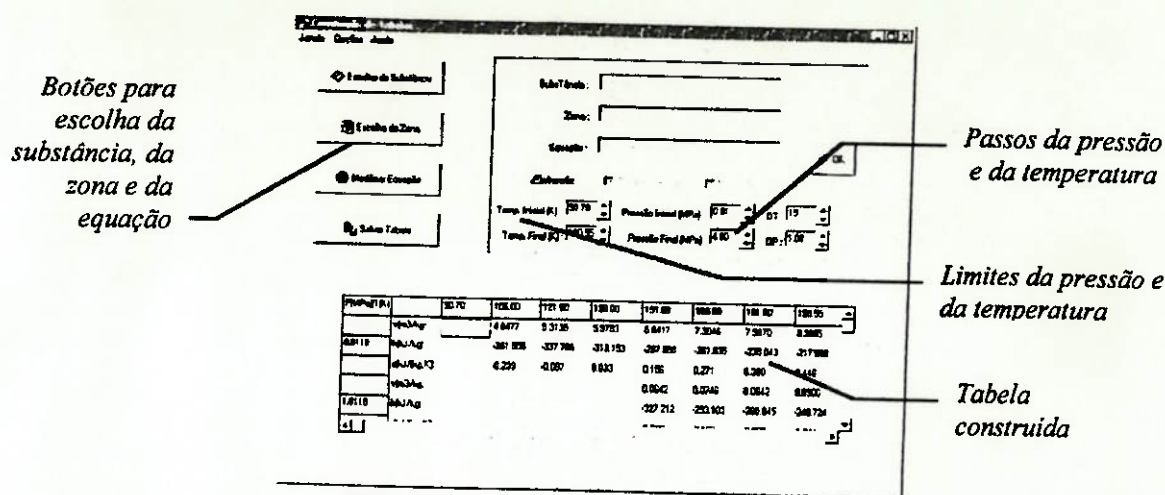


Figura 3 - Tabela gerada pelo PRODITER.

Opção 3 - Diagramas Termodinâmicos

Com esta terceira opção podem ser construídos os diagramas termodinâmicos principais: pressão x volume específico, temperatura x entropia específica e pressão x entalpia específica, além da curva de pressão de vapor. Para isso, basta ao usuário selecionar inicialmente o tipo de abordagem que deseja (perfeito ou real) e a seguir os limites para as escalas dos eixos das propriedades.

Esta opção permite, ainda, o traçado das linhas isobáricas, isoentálpicas, isoentrópicas, isocóricas e isotérmicas, de acordo com o interesse do usuário e com o tipo de gráfico selecionado. Na Fig. 4 está ilustrado o diagrama $P-h$ para a água.

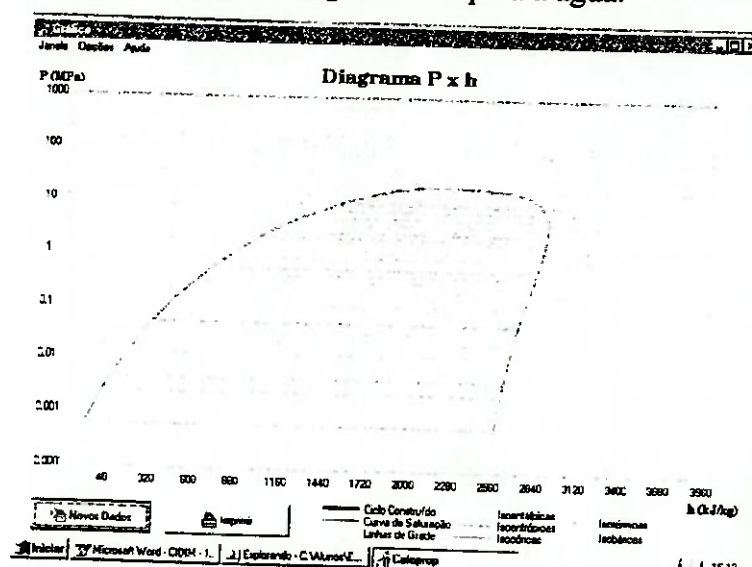


Figura 4 - Diagrama gerado pelo PRODITER.

Opção 4 - Estudo de Processos Termodinâmicos Elementares

Na opção "Processos", diversos processos termodinâmicos elementares podem ser estudados, envolvendo um arranjo tipo pistão-cilindro, como ilustrado na Fig. 5. O pistão pode ser movimentado com o ponteiro ("mouse") e o resultado é visto no diagrama de escolha do usuário, como, por exemplo, o diagrama $P-v$ da figura. O fluido pode ser um gás perfeito ou

um fluido real, e podem ser analisados processos isotérmicos, adiabáticos, isoentrópicos e politrópicos, entre outros.

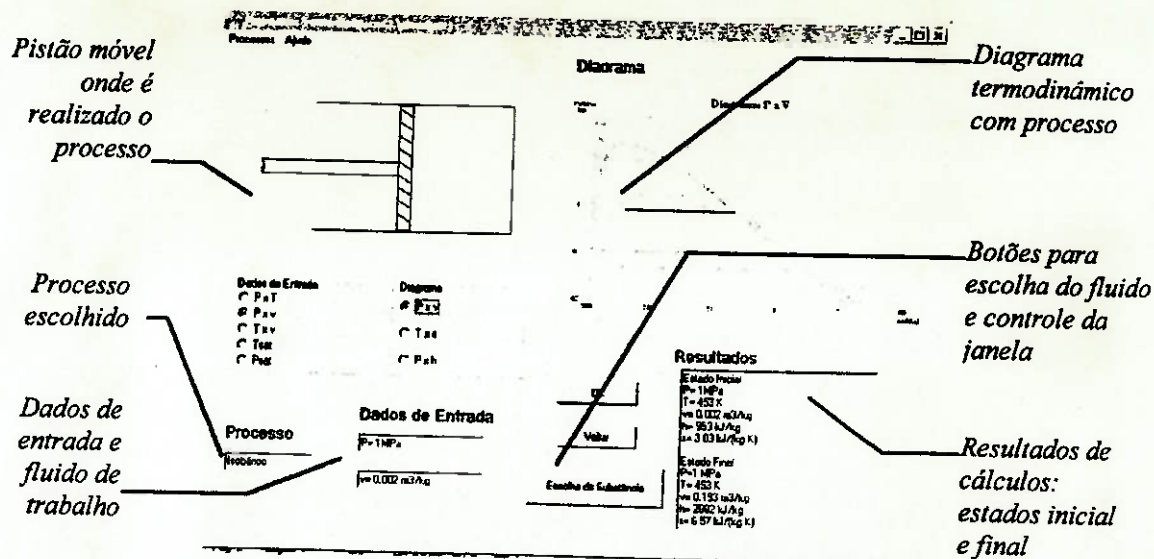


Figura 5 - Estudo de processo termodinâmico elementar gerado pelo PRODITER.

Opção 5 - Ciclos

A última opção, "Ciclos", permite o estudo dos principais tipos de ciclos termodinâmicos básicos, como ciclo de Rankine e suas variações, ciclos padrões a ar e ciclos de refrigeração de compressão a vapor ou a ar.

A Fig. 6 apresenta um exemplo do ciclo básico de Rankine para a água. Para a construção do ciclo o usuário deve fornecer, em uma outra janela, os dados operacionais como a temperatura ou a pressão de evaporação e de condensação, os graus de superaquecimento e subresfriamento e as eficiências isoentrópicas das máquinas. O programa calcula as propriedades (temperatura, pressão, volume específico, entropia e entalpia específicas) nos principais pontos (1, 2, 3 e 4 para o exemplo da Fig. 6) e, se o usuário desejar, representa o ciclo no gráfico apropriado, como ilustrado na Fig. 6b.

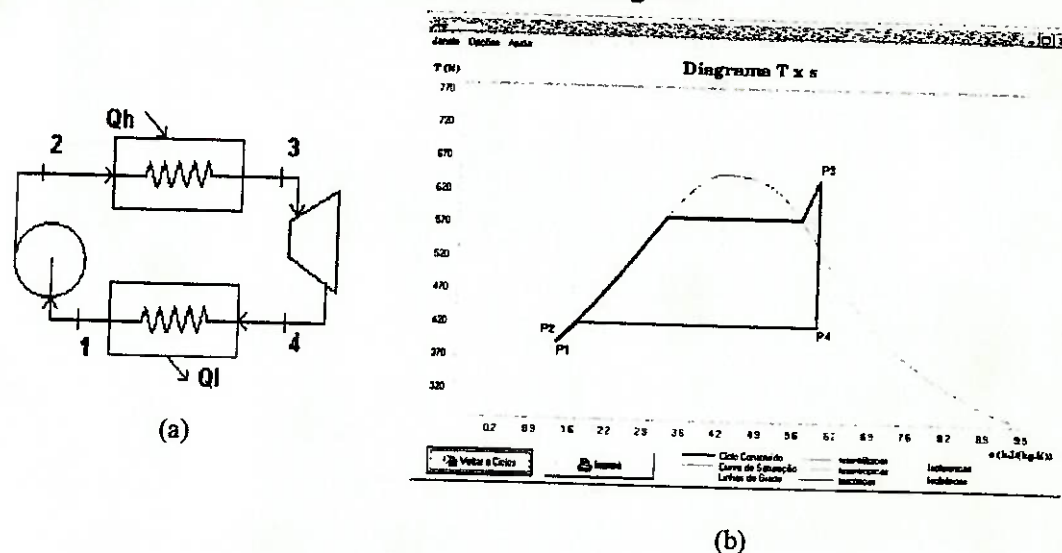


Figura 6 - Ilustração da opção "Ciclo" do PRODITER.

(a) Ciclo básico de Rankine; (b) - Diagrama T-s correspondente.

CONCLUSÕES

O intuito do PRODITER é fornecer ao aluno uma ferramenta que possa auxiliá-lo na compreensão da termodinâmica e, desta forma, complementar seu aprendizado. Graças à sua forma visual, pode-se estudar diversos assuntos envolvendo ciclos, processos e propriedades, tanto para um gás perfeito como para um fluido real.

Não obstante sua finalidade didática, os resultados obtidos apresentam acuidade suficiente para serem empregados como instrumentos de cálculos preliminares de instalações e processos reais.

O programa é distribuído livremente e está disponível na Internet no endereço <http://www.mcef.ep.usp.br/staff/lab/sisea.htm>.

AGRADECIMENTOS

As duas primeiras autoras agradecem o suporte financeiro recebido da FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, Brasil.

REFERÊNCIAS

- Lee, B. I. e Kesler, M., 1975, *A Generalized Thermodynamic Correlation Based on Three-Parameter Corresponding State*, AIChE Journal, Vol. 21(3), pp. 510-27.
- Perry, R. H. e Green, D., 1984, *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, 6a. edição, McGraw-Hill.
- Reid, R. C., Prausnitz, J. M. e Poling, B. E., 1987, *The Properties of Gases and Liquids*, 4a. edição, McGraw-Hill.
- Reynolds, W. C., 1979, *Graphs, Tables and Computational Equations for 40 Substances*, 1a. edição, Dept. of Mech. Eng., Stanford Univ.
- Van Wylen, Gordon J. e Sonntag, Richard E., 1993, *Fundamentos da Termodinâmica Clássica*, Editora Edgard Blücher Ltda. (tradução da 3ª edição original americana).