



COMPARAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE ESTADO PARA VALORES EXPERIMENTAIS DA ÁGUA SATURADA

Sávia D. V. TERRA¹; Amanda P. GONÇALVES²; Victor A. M. GOMES³

RESUMO

Uma equação de estado é uma equação termodinâmica que descreve um estado da matéria sob um dado conjunto de condições físicas. É uma equação constitutiva a qual provê uma relação matemática entre duas ou mais funções de estado associadas com a matéria, tais como sua temperatura, pressão, volume, energia interna ou entropia. Equações de estado são muito utilizadas para descrever propriedades de fluidos, misturas de fluidos, sólidos, e até mesmo o interior de estrelas. Existem inúmeras equações de estado existente e aqui será feita uma comparação entre algumas delas em relação a faixa de pressão em que se aplicam através do cálculo do volume específico para valores experimentais da água saturada. As equações utilizadas foram: Gases Ideais (GI), Virial, Van der Waals (VdW), Soave/Redlich/Kwong (SRK), Peng/Robinson (PR) e Correlação generalizada de Lee/Kesler.

Palavras-chave: Equações de estado; Propriedades de fluidos; Funções de estado.

1. INTRODUÇÃO

Na indústria química, petroquímica e na indústria do petróleo diversas propriedades são utilizadas constantemente na descrição de diversos processos. Devido à dificuldade de se obter experimentalmente as variáveis de interesse industrial, faz-se necessário o uso de uma equação de estado.(LEAL, 2012)

Equações de Estado é uma relação matemática entre as grandezas termodinâmicas de estado e entre funções de estado de um sistema termodinâmico. Sob um dado conjunto de condições físicas, a Equação de estado é, na verdade, uma equação termodinâmica. A modelagem de equilíbrios líquido-vapor de sistemas constituídos por hidrocarbonetos e outras substâncias apolares ou fracamente polares é usualmente feita através de equações de estado do tipo cúbicas. (OLIVEIRA; CARVALHO, 2013)

Por isso objetiva-se com esse trabalho analisar as equações de estado dos Gases Ideais (GI), Virial, Van der Waals (VdW), Soave/Redlich/Kwong (SRK), Peng/Robinson (PR) e Correlação generalizada de Lee/Kesler com intuito de compará-las, verificando até qual faixa de pressão elas se aplicam através de dados experimentais tabelados para a água saturada. Assim como também objetiva-se analisar os erros relativos em relação aos volumes específicos calculados.

1 IFSULDEMINAS – Campus Pouso Alegre, Pouso Alegre/MG, e-mail: saviadelvale_terra@hotmail.com ;

1 IFSULDEMINAS – Campus Pouso Alegre, Pouso Alegre/MG, e-mail:amamdapegon93@gmail.com;

1 IFSULDEMINAS – Campus Pouso Alegre, Pouso Alegre/MG, e-mail:victor.aias@ifsuldeminas.edu.br



2. MATERIAL E MÉTODOS

O presente trabalho foi realizado utilizando o software LibreOffice Calc, no qual foi ferramenta de estudo na comparação das equações de estado dos Gases Ideais (GI), Virial, Van der Waals (VdW), Soave/Redlich/Kwong (SRK), Peng/Robinson (PR) e Correlação generalizada de Lee/Kesler. A execução do trabalho se deu através do cálculo do volume específico em cada uma das equações de estado e posteriormente a comparação com o volume tabelado conforme mencionado pela literatura, utilizando-se de pressão (Pa), temperatura (K) previamente convertidos para o SI. Como se trata de volume específico fez-se uso da massa molar da água de 0,018 Kg/mol e também da constante dos gases ideais (R). Abaixo estão representadas as equações de estado utilizadas:

- **Gases Ideais:**

$$PV=nRT$$

- **Van der Waals (VdW); Soave/Redlich/Kwong (SRK); Peng/Robinson:** Para estes três casos fez-se uso da Equação de Estado Cúbica Genérica do tipo vapor.

$$Z = 1 + \beta - q\beta \frac{Z - \beta}{(Z + \epsilon\beta)(Z + \sigma\beta)}$$

- **Correlação generalizada de Lee/Kesler:**

$$Z = Z^0 + \omega Z^1$$

- **Equação do Virial:**

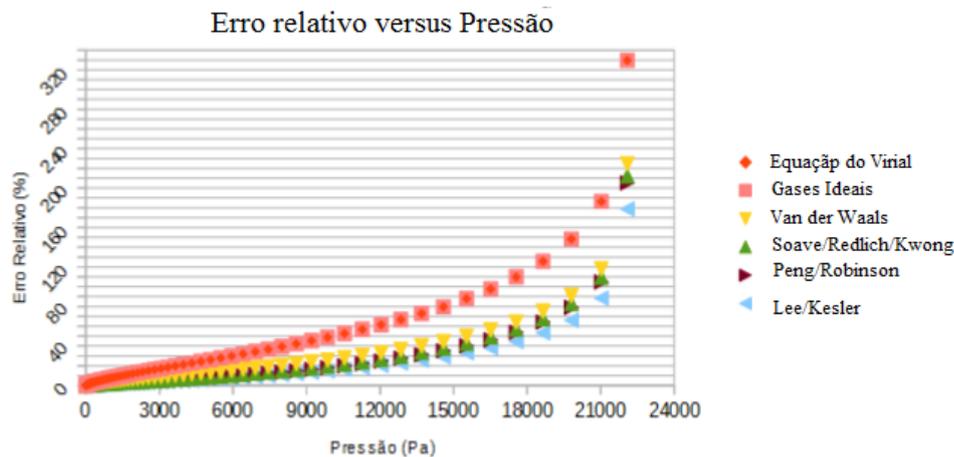
$$Z = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2}$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Através dos resultados obtidos dos cálculos de volume específico, realizados no software do LibreOffice Calc, referentes a cada uma das equações de estado aqui trabalhadas, notou-se que existe uma semelhança entre a equação dos Gases Ideais e a equação do Virial em termos de erro relativo, pois apresentaram erros praticamente iguais. Entretanto se comparamos com as outras equações aqui trabalhadas, poderemos verificar que houve uma diferença significativa entre os erros relativos.

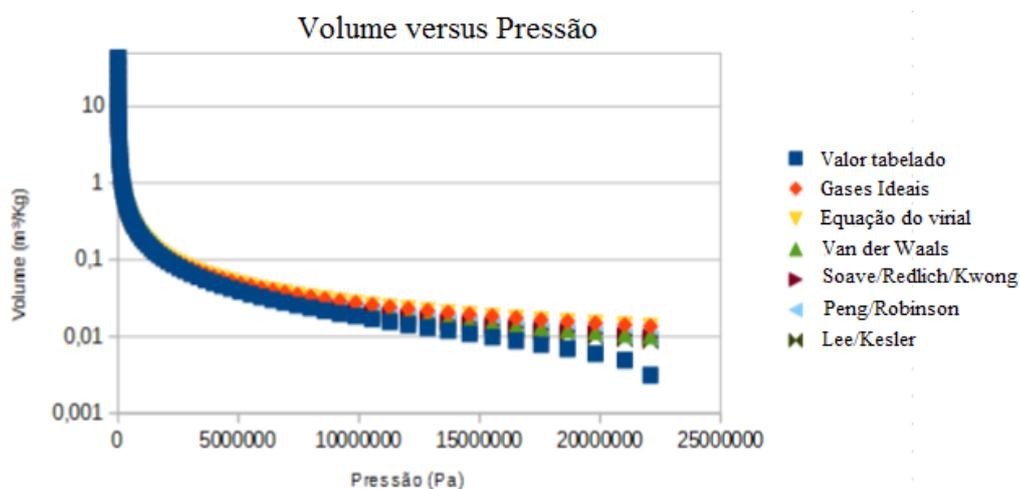


Figura 1 - Erro relativo em função da Pressão



Através do gráfico podemos verificar que com o aumento da pressão, o erro relativo foi aumentando. Sendo que o maior erro se manifestou para as equações de Virial e Gases Ideais, atingindo mais de 300% de erro em altas pressões. Podemos observar também que a equação que melhor se ajusta em altas pressões (Comparado às demais), é a correlação generalizada de Lee/Kesler, no qual apresentou um erro de aproximadamente 180%, o menor verificado entre as demais. As equações de VdW, SRK e PR apresentaram um erro intermediário de mais de 200% em altas pressões. Através dos erros relativos observados, nota-se que as equações de estado se aplicam até certas pressões, de modo que com o aumento da pressão esse erro se torna discrepante. (SMITH et al.,2007)

Figura 2 - Volume Específico em função da Pressão



O gráfico acima mostra que ao se afastar da idealidade, ocorre um desvio entre o volume



específico calculado pelas equações de estado e o tabelado. Nota-se também que esse desvio aumenta à medida que se aproxima da pressão crítica da água, que se trata da maior pressão em que um material puro pode existir na fase gasosa em equilíbrio com a fase líquida. Pelos dados obtidos, analisando as porcentagens de erros, pode-se fazer uma consideração de que até aproximadamente 8% de erro estas equações podem ser aplicadas, pois trata-se de um erro relevante.

4. CONCLUSÕES

Através da realização do trabalho é possível concluir que as presentes equações de estado se aplicam em certas faixas de pressão. Ao considerarmos um erro relativo de 8% sendo o máximo válido, as faixas de pressão em que as respectivas equações se aplicam, podem ser dadas como aproximadamente:

Tabela 1 – Faixa de pressão para as respectivas equações de estado.

Equações	Faixa de Pressão (MPa)
GI	0,0006113 – 1,0
Virial	0,0006113 – 1,0
VdW	0,0006113 – 2,5
SRK	0,0006113 – 4,5
PR	0,0006113 – 5,1
Lee Kesler	0,0006113 – 6,0

E devido ao aumento crescente do erro relativo com o aumento da pressão, até um valor máximo que é dado na pressão crítica, pode-se concluir que esse aumento é decorrente do fato das equações de estado utilizadas se aplicarem para fase vapor e como a pressão crítica é um ponto de máximo equilíbrio entre líquido e vapor e também de alta instabilidade, é provável que conforme a pressão crítica vai se aproximando, maior vai se tornando esta instabilidade entre líquido e vapor e as equações de estado utilizadas que são aplicadas para o volume de vapor podem não ser mais válidas e isso justifica o aumento crescente dos erros entre volume calculado e volume tabelado.

REFERÊNCIAS

- LEAL, Denise dos Santos. **Avaliação de equações de estado no cálculo de propriedades do dióxido de carbono úteis ao estudo do seu escoamento**. 2012. 280 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Industrial, Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2012.
- OLIVEIRA, Flora Dimitria Melo; CARVALHO, Thaís Gadelha. **Equação de Estado Cúbica**. 2013. 12 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia Química, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2013.
- SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M.. **Introdução à termodinâmica da engenharia química**. 7. ed. Rio de Janeiro: Ltc, 2007. 626 p.