



Análise da variação de temperatura devido a efeito Joule-Thomson em expansão gasosa livre contendo uma válvula reguladora de pressão

Analysis of temperature variation due to the Joule-Thomson effect in free gas expansion containing a pressure regulating valve

Maria Luiza Silva Oliveira¹, Caroline Marques Lau², Luis Fernando Grigoletto Hirata³, Mateus Batichotti Silva⁴, Flávia Aparecida Reitz Cardoso⁵

RESUMO

Descoberto em 1852 pelos cientistas James Prescott Joule e William Thomson, o fenômeno termodinâmico conhecido como efeito Joule-Thomson é de grande importância para a esfera científica, sendo um processo padrão na indústria petroquímica e em várias aplicações criogênicas. Neste fenômeno, há a variação da temperatura de um fluido - podendo ser um gás ou um líquido - quando, enquanto isolado, o fluido é forçado a realizar passagem por meio de uma válvula, sem possibilidade de troca de calor com o ambiente inserido. O presente projeto compreende como objetivo analisar e desenvolver um modelo matemático relacionado à variação de temperatura ocasionada por efeito termodinâmico, durante um cenário de expansão gasosa livre e controlada por uma válvula reguladora de pressão. Também será abordado neste artigo o uso da fluidodinâmica computacional e suas ferramentas para a validação da equação matemática, em específico simulações envolvendo o sinal do termo fonte na equação de energia fazendo uso do *software* comercial ANSYS FLUENT.

PALAVRAS-CHAVE: Equações; Simulação Computacional; Termodinâmica.

ABSTRACT

Discovered in 1852 by scientists James Prescott Joule and William Thomson, the thermodynamic phenomenon known as the Joule-Thomson effect is of great importance to the scientific sphere, being a standard process in the petrochemical industry and in several cryogenic applications. In this phenomenon, there is a variation in the temperature of a fluid - which can be a gas or a liquid - when, while isolated, this fluid is forced to pass through a valve, without the possibility of exchanging heat with the surrounding environment. The objective of this project is to analyze and develop a mathematical model related to the temperature variation caused by this thermodynamic effect, during a scenario of free gas expansion and controlled by a pressure regulating valve. Furthermore, this article will address the use of computational fluid dynamics and its tools for validating the mathematical equation, specifically simulations involving the sign of the source term in the energy equation using the commercial *software* ANSYS FLUENT.

KEYWORDS: Equations; Computer Simulation; Thermodynamics.

¹ Bolsista do Cnpq. Universidade Federal Tecnológica do Paraná, Campo Mourão, Paraná, Brasil. E-mail: marialuizaoliveira@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 8330537680863440.

² Bolsista do Cnpq. Universidade Federal Tecnológica do Paraná, Campo Mourão, Paraná, Brasil. E-mail: carolinelau@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 0698228494830562

³ Bolsista do Cnpq. Universidade Federal Tecnológica do Paraná, Campo Mourão, Paraná, Brasil. E-mail: luishirata@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 0144651492801182.

⁴ Bolsista do Cnpq. Universidade Federal Tecnológica do Paraná, Campo Mourão, Paraná, Brasil. E-mail: mateusbaticotti@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 5288330053446144.

⁵ Docente do Curso Técnico Integrado em Informática. Universidade Federal Tecnológica do Paraná. Campo Mourão, Paraná, Brasil. E-mail: flaviareitz@gmail.com. ID Lattes: 2663975071704461.



INTRODUÇÃO

O efeito Joule-Thomson é um fenômeno físico em que a passagem de corrente elétrica por um corpo ocasiona uma elevação de sua temperatura em função das colisões entre cargas. Nos processos de escoamento de gases com válvulas reguladoras ou estranguladoras de pressão ocorrem uma variação de temperatura proporcionada pela queda de pressão do efeito Joule-Thomson (Tafazzol et al., 2011). Estas, por sua vez, têm a vantagem de permitir um controle mais preciso da vazão do sistema, como acontece em gasodutos, porém com um grande desperdício de energia.

As operações que fazem parte deste tipo de processo de escoamento, seja de fluidos líquidos ou gasosos, são processos fisicamente complexos e que podem ser estudados nas mais diversas áreas da engenharia, uma vez envolvem fenômenos físicos. Estas operações envolvem fenômenos de transferência de massa, escoamentos multifásicos líquido-líquido e líquido-gás, turbulência e reações bioquímicas, entre outros (Cardoso et al., 2014). Neste sentido, a fluidodinâmica computacional, em parceria com outras ferramentas computacionais, tem se apresentado como um conjunto de ferramentas que permitem uma abordagem mais profunda e fenomenológica dos processos, permitindo avaliar condições de operação de determinado equipamento de muitas formas, avaliar também os efeitos sobre a eficiência da operação e então propor melhorias para a otimização do processo.

Com base nestas considerações, este estudo pretende fornecer uma contribuição científica no que diz respeito ao cálculo da temperatura de saída em processos de estrangulamentos de forma a se atingir uma temperatura de saída desejada com o auxílio da fluidodinâmica computacional e empregando a equação de estado Peng-Robinson.

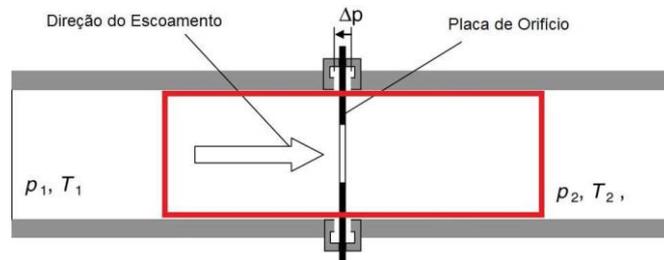
METODOLOGIA

Quando se tem um processo de escoamento poderão haver situações em que haja algum tipo de obstrução em linha, como o uso de válvulas. Nos processos de estrangulamento (Figura 1), ocorre uma expansão, normalmente adiabática, sem concretização de trabalho externo, portanto, isentálpica. Este acontecimento ocasiona uma variação de temperatura, efeito conhecido como expansão Joule-Thomson. Esta variação experimentada pelo gás durante a expansão depende não só das pressões de início e fim, mas também da natureza do gás e das condições da expansão.

A necessidade de permitir a separação entre os produtos e os reagentes não consumidos faz com que seja necessária a despressurização por meio de uma válvula redutora de pressão. Esta queda de pressão provocada no processo de estrangulamento isentálpico é seguida de um aumento de temperatura em função do efeito Joule-Thomson. E considerando que a eficiência da separação entre os produtos e reagentes depende das condições de temperatura e pressão na entrada do vaso, conhecer e monitorar o processo de estrangulamento tem fundamental importância.

Em decorrência da dificuldade de medir experimentalmente a temperatura de saída de uma válvula parcialmente aberta, a inserção de um modelo matemático torna-se uma maneira útil e eficiente. Marcano et al. (2008) e Tafazzol et al. (2011) também fazem uso das equações de estado para modelar o efeito Joule-Thomson no intuito de prever a curva de inversão, ou seja, apresentar a ausência de variação de temperatura com a queda de pressão.

Figura 1 - Representação do comportamento do fluido ao passar por uma restrição



Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

A taxa de variação da temperatura em relação à pressão, à entalpia constante, é o coeficiente de Joule-Thomson, representado por:

$$\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_h \quad (1)$$

onde T é a temperatura, p a pressão e h a entalpia.

Assim, se um fluido a uma pressão p_1 e temperatura T_1 flui para uma região à menor pressão p_2 por uma válvula, este experimenta uma temperatura T_2 . Durante este processo, a entalpia permanece inalterada e o processo é irreversível. A passagem do fluido por meio de uma restrição (Figura 1) provoca a diminuição da pressão e o aumento de velocidade do fluido. Porém, ao contrário da pressão, a velocidade do fluido assume o mesmo valor da entrada ao sair da restrição. E se o processo de estrangulamento ocorre ao longo de uma curva à entalpia constante, no sentido de diminuição da pressão, então o mesmo sucede da esquerda para a direita em um diagrama T_i , como ilustrado na Figura 2.

Conforme se avança ao longo de uma curva de entalpia constante, a temperatura aumenta até se ter a temperatura de inversão. Quando as pressões de saída são menores que a de inversão, a temperatura diminui e o fluido se resfria. A curva de inversão apresentada na Figura 2 é a representação geométrica dos pontos de inversão para diferentes condições do estrangulamento.

Para o cálculo da variação de temperatura em um ambiente fechado contendo uma restrição e devido ao efeito Joule-Thomson, deve ser empregado um sistema de equações que consiste na da continuidade, da quantidade de movimento e a equação da energia. Esta última obtida a partir de um balanço de energia, dado por:

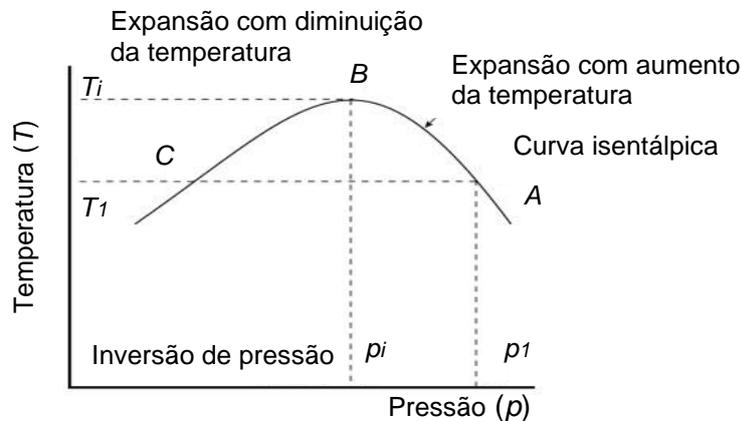
$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial x_j} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{k_{eff}}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha} \rho \left(D_{eff} - \frac{k_{eff}}{c_p} \right) \frac{\partial C_{\alpha}}{\partial x_j} \right\} + S_h + S_{JT}, \quad (2)$$

onde h e h_{α} são a entalpia da mistura e a entalpia da espécie α respectivamente [J/kg], C_{α} é a concentração da espécie α [kmol/m³]. S_h é o termo fonte devido ao calor de mistura e S_{JT} é o termo fonte devido ao efeito de compressão Joule-Thomson (Baldyga, 2010) dado por:

$$S_{JT} = \mu_{JT} c_v u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}. \quad (3)$$

Quando o valor de μ_{JT} (Eq. (1)) for positivo, o fluido sofrerá um resfriamento. Logo, quando o valor de μ_{JT} for negativo, o fluido sofrerá um aquecimento ao passar por um estrangulamento. E, quando o valor do coeficiente Joule-Thomson for nulo, obtém-se a chamada curva de inversão, apresentada pela Figura 2.

Figura 2 - Curva isentálpica em diagrama Tp



Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

O coeficiente de Joule-Thomson, μ_{JT} , pode ser calculado a partir da equação de estado de Peng-Robinson da forma descrita a seguir.

$$\mu_{JT} = \frac{1}{c_p} \left[\frac{RT^2}{p} \left(\frac{\partial Z}{\partial T} \right)_p \right], \quad (4)$$

onde c_p é o calor específico isobárico real, Z é o fator de compressibilidade e R , a constante universal dos gases.

Se o objetivo é determinar a pressão de saída de tal forma que se tenha uma temperatura de estrangulamento almejada, então tem-se a necessidade de um problema de otimização. Com base nas considerações acima descritas para o coeficiente de Joule-Thomson descreve-se:

$$\min_{p_2} (T_2 - T_{ref})^2, \quad (1)$$

com

$$T_2 = f(T_1, p_1, T_2, p_2, \bar{x}),$$

onde T_1 e p_1 representam as condições de entrada, T_2 e p_2 as de saída, T_{ref} é a temperatura desejada e \bar{x} representa o vetor de parâmetros da equação de Peng-Robinson. Da Equação (1), T_2 pode ser definido:

$$\Delta T = T_2 - T_1 = \int_{p_1}^{p_2} \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_h dp. \quad (2)$$

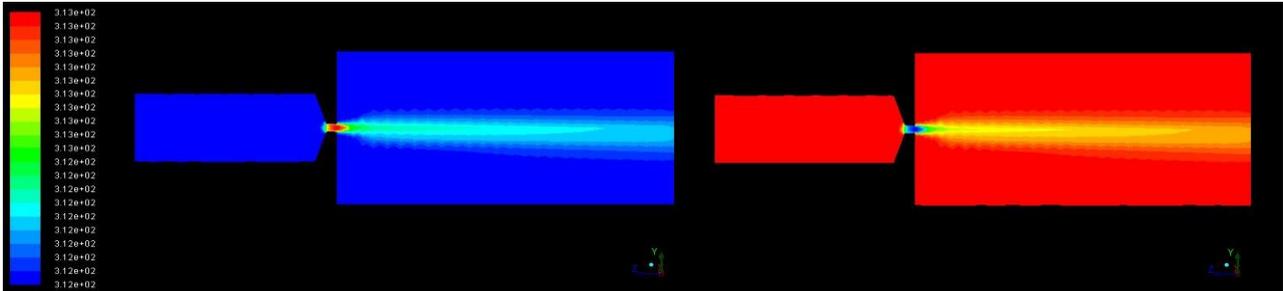
RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com a pretensão de validar o modelo, inicialmente realizou-se simulações no programa ANSYS FLUENT com o sinal do termo fonte na equação de energia.

Para as simulações empregou-se o gás CO_2 puro. Criou-se uma sub-rotina com o termo fonte S_{JT} , dado pela Equação (3), considerando c_v constante e μ_{JT} , dado pela Equação (4). A pressão de operação empregada foi $p = 50$ bar; a temperatura $T = 312,0$ K; a velocidade de entrada $v = 0,0025$ m/s; e a capacidade calorífica, a volume constante, $c_v = 32,01$ J/mol.K. Substituindo a Eq. (4) na Eq. (3) obtém-se a variação de temperatura (a) da Figura 3. Adicionando-se um sinal negativo à Eq. (3), na sub-rotina da Figura 4, obtém-se

a variação de temperatura (b) da Figura 3. Pode-se observar que na região da restrição, quando S_{JT} tem sinal positivo, há aumento de temperatura e quando o sinal é negativo, há queda de temperatura.

Figura 3 - Simulação computacional da válvula



Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

Para o cálculo de μ_{JT} na Eq. (4) considerou-se a equação de estado de Peng-Robinson:

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v(v+b)+b(v-b)}, \quad (7)$$

onde:

$$a(T) = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha, \quad b = 0.07780 \frac{RT_c}{P_c}, \quad \alpha = \left(1 + \kappa \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right)^2 \quad (8)$$

e $\kappa = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$, na qual ω é o fator acêntrico.

Figura 4 - Sub-rotina com o termo fonte e sinal positivo

```
#include "udf.h"
#include "mem.h"

/* Termo Fonte Devido à queda de pressão J-T*/

DEFINE_SOURCE(energy_source, c, th, dS, eqn)
{
    real mi_JT;
    real p = C_P(c,th)+5000000.0 ; /* Coeficiente de Joule-Thomson [k/Pa]*/
    real t = C_T(c,th); /*13000000.0 [Pa] pressão de operação*/
    real velociy_U = C_U(c,th); /*temperatura [K]*/
    real velociy_V = C_V(c,th); /*Componente u da velocidade [m/s]*/
    real velociy_W = C_W(c,th); /*Componente v da velocidade [m/s]*/
    real Gradpx = C_P_G(c,th)[0]; /*Componente w da velocidade [m/s]*/
    real Gradpy = C_P_G(c,th)[1]; /*Componente x do vetor gradiente de pressão [Pa/m]*/
    real Gradpz = C_P_G(c,th)[2]; /*Componente y do vetor gradiente de pressão [Pa/m]*/
    real Cv; /*Componente z do vetor gradiente de pressão [Pa/m]*/
    real source; /*Cap. calorífica vol. cte [J/mol.K]*/
    /* local variable*/

    mi_JT = (-0.000002369*pow(p,2.0)-0.004256*p+1.0225)/pow(t,2.0);
    Cv = 32.01;

    dS[eqn] = -2.0*(-0.000002369*pow(p,2)-0.004256*p+1.0225)/pow(t,3.0);
    source = mi_JT*Cv*(velociy_U*Gradpx+velociy_V*Gradpy +velociy_W*Gradpz);
    return source;
}
```

Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

Fazendo-se todas as derivações e substituições referentes à Eq. (4) tem-se o coeficiente Joule-Thomson, μ_{JT} , calculado pela EDE Peng-Robinson, cuja função primordial é prever a temperatura de estrangulamento:



$$\mu_{JT} = \frac{1}{c_p} \frac{RT^2}{P} \left[\frac{\left(\frac{0.45724 \frac{RT_c^2}{P_c} v \left(T \kappa \sqrt{\frac{\alpha}{TT_c}} + \alpha \right)}{T^2 [v(v+b) + b(v-b)]} + \frac{ZR}{p} \left(-\frac{b}{(v-b)^2} + \frac{a(T)(v^2 + b^2)}{RT(v(v+b) + b(v-b))} \right) \right)}{\left(1 - \frac{\left(\frac{0.45724 \frac{RT_c^2}{P_c} v \left(T \kappa \sqrt{\frac{\alpha}{TT_c}} + \alpha \right)}{T^2 [v(v+b) + b(v-b)]} \right) \frac{RT}{p}}{p} \right)} \right] \quad (9)$$

CONCLUSÃO

Conclui-se que as análises aqui apresentadas podem ser realizadas antes de prosseguir com uma fase experimental, uma vez que a posse deste modelo matemático resulta em simulações de menor demanda computacional, tempo e menor custos, produzindo resultados de qualidade, dada a busca de condições que promovam valores de temperatura, pressão e coeficiente de Joule-Thomson. Conclui-se também que a temperatura final de estrangulamento foi muito bem representada pela equação de estado Peng-Robinson e a curva de inversão foi melhor descrita pela equação de estado Huang. Porém, a equação de Peng-Robinson também apresentou resultados satisfatórios da curva de inversão, que consiste em um teste rigoroso para equação de estado.

Agradecimentos

Agradeço ao Cnpq e à minha orientadora pela oportunidade.

Conflito de interesse

Não há conflito de interesse.

REFERÊNCIAS

CARDOSO, F.A.R.; ALMEIDA, R.; REZENDE, R.V.P.; NORILER, D.; MEIER, H.F.; CARDOZO FILHO, L.; CABRAL, V.F. Influence of pressure and temperature on the velocity of a turbulent jet flow 3D. **Journal of Chemistry and Chemical Engineering**, v. 8, p.408-416, 2014

MARCANO, C.F.; FUENTES, O.C.G.; COLINA, C.M. Joule-Thomson inversion curves and third virial coefficients for pure fluids from molecular-based models. **Industrial & Engineering Chemistry and Research**, v.47, p.8894-8905, 2008.

TAFAZZOL, A. H., Nasrifar, K. Thermophysical properties of associating fluids in natural gas industry using pc-saft equation of state. **Chemical Engineering Communications**, v.198, p.1244-1262, 2011.