

Introdução a psicrometria e à biblioteca libpsychro

Paulo José Saiz Jabardo

São Paulo, 27 de janeiro de 2004

Resumo

Este relatório mostra o equacionamento utilizado na implementação da biblioteca `libpsychro` para cálculo de propriedades termodinâmicas do ar úmido. A biblioteca foi escrita em C++ de modo a facilitar extensões e modificações futuras.

Sumário

1	Introdução	2
2	Psicrometria	2
2.1	Composição do ar	2
2.2	Equação de estado do ar úmido	3
2.3	Parâmetros para a definição da umidade	3
2.4	Fração molar de vapor	4
2.5	Teor de umidade ou umidade absoluta	4
2.6	Umidade relativa	4
2.7	Temperatura de ponto de orvalho	4
2.8	Temperatura de saturação adiabática e temperatura de bulbo úmido	5
3	Documentação da biblioteca libpsychro	5
4	Manual da interface excel da biblioteca libpsychro	6
4.0.1	<code>density(ch, T, umidade, P)</code>	6
4.0.2	<code>volume(ch, T, umidade, P)</code>	7
4.0.3	<code>enthalpy(ch, T, umidade, P)</code>	7
4.0.4	<code>relhum(ch, T, umidade, P)</code>	7
4.0.5	<code>dewpoint(ch, T, umidade, P)</code>	7
4.0.6	<code>wetbulb(ch, T, umidade, P)</code>	7
4.0.7	<code>Z(ch, T, umidade, P)</code>	7
4.0.8	<code>efactor(T, P)</code>	7
4.0.9	<code>Psv(T)</code>	7
4.0.10	<code>Tsv(P)</code>	7
4.1	Uso da interface	7
5	Limitações e melhorias futuras	8

1 Introdução

Uma necessidade constante no centro de metrologia de fluidos é o cálculo da densidade (ou massa específica) do ar úmido, principalmente nos laboratórios de gás e anemometria. Uma formulação simplificada utilizando um modelo de gás perfeito para o ar e o vapor é, na maioria das aplicações, razoável. No entanto, em aplicações metrológicas como a calibração de anemômetros ou medidores de vazão de gás, os pequenos erros resultantes deste modelo simples podem não ser aceitáveis. Principalmente quando as incertezas são extremamente baixas (da ordem de 0,2%).

Tradicionalmente o laboratório utilizou as correlações dadas em [2]. Estas correlações são simples (sempre funções simples e explícitas) e são utilizadas em diversos centros metrológicos ao redor do mundo (como por exemplo o PTB na Alemanha).

Existem duas dificuldades com a metodologia de [2]. A primeira é a faixa limitada. Estas correlações estão limitadas para pressões entre 60 kPa e 110 kPa , o que é baixo se for utilizado ar na pressão. As correlações também estão limitadas para temperaturas entre 15°C e 27°C. A temperatura no laboratório de anemometria do Centro de Metrologia de Fluidos (CMF) do IPT pode facilmente ultrapassar esta faixa em um dia um pouco mais quente.

A segunda dificuldade com a formulação de Giacomo[2] é a limitação das formas de entrada da umidade: a umidade pode ser especificada utilizando a umidade relativa ou a temperatura de ponto de orvalho. É muito comum no CMF a medição da temperatura de bulbo úmido (uma estimativa da temperatura de saturação adiabática). Esta medida não pode ser utilizada na formulação de Giacomo. Além disto, existe o fato de que no Laboratório de Higrometria do CMF é necessária a determinação de parâmetros outros que a densidade. A biblioteca libpsychro utiliza o equacionamento da ASHRAE[1, 4, 3] para o cálculo de propriedades termodinâmicas do ar úmido.

O objetivo deste trabalho é sanar estas dificuldades e testar uma nova estrutura computacional utilizando conceitos de orientação a objeto para a implementação de propriedades termodinâmicas de fluidos.

2 Psicrometria

A psicrometria estuda a mistura de vapor de água e ar. Este tipo de mistura é muito importante em diversas áreas como refrigeração e ar-condicionado, conforto térmico, metrologia, etc. A abordagem mais comum é tratar esta mistura como uma mistura de gases perfeitos. Esta abordagem geralmente fornece resultados excelentes e é de fácil implementação. Qualquer livro de termodinâmica como [6] ou [5] possui uma excelente introdução ao tema. A publicação da ASHRAE[1] mostra o equacionamento para a determinação de propriedades termodinâmicas do ar úmido.

Esta mesma publicação [1] também apresenta o equacionamento para gás real, que é baseado no trabalho de Hyland e Wexler [4, 3]. Este equacionamento será apresentado neste trabalho.

2.1 Composição do ar

O ar atmosférico é uma mistura de diversos gases sendo o nitrogênio e o oxigênio os componentes mais importantes. A composição do ar pode variar de ambiente a ambiente e com a altitude mas de uma maneira geral, próximo ao nível do ar e em um ambiente ventilado, a composição do ar seco (sem nenhum vapor de água) é relativamente constante. A esta mistura de gases pode-se associar uma substância equivalente (com mesmas propriedades termodinâmicas) para se facilitar

a formulação do problema. A composição do ar padrão pode ser encontrada em [2]. Este “ar equivalente” padrão tem uma massa molecular de

$$M_a = 28,9635 \frac{kg}{kmol} \quad (1)$$

A partir deste momento o ar seco será tratado como uma substância pura e deve-se tomar cuidado para que o equacionamento a seguir seja empregado em um gás com composição muito distinta.

2.2 Equação de estado do ar úmido

O ar úmido é uma mistura ar seco + vapor de água. A equação de estado da ASHRAE para o ar úmido é uma equação virial [1]:

$$Z = \frac{p\bar{v}}{RT} = 1 + \frac{B_m}{\bar{v}} + \frac{C_m}{\bar{v}^2} \quad (2)$$

Nesta equação Z é o fator de compressibilidade, p é a pressão, \bar{v} é o volume molar, $R = 8314,41 \text{ J/(kmol} \cdot \text{K)}$ é a constante universal dos gases, T é a temperatura absoluta, B_m é o segundo coeficiente virial e C_m é o terceiro coeficiente virial.

O primeiro aspecto a se notar é que esta equação é implícita (veja \bar{v} nos dois lados da equação) mas de fácil solução:

$$\frac{p\bar{v}^{n+1}}{RT} = 1 + \frac{B_m}{\bar{v}^n} + \frac{C_m}{(\bar{v}^n)^2} \quad (3)$$

Repete-se esta operação até que $|\bar{v}^{n+1} - \bar{v}^n| < \varepsilon$, onde ε é o erro admissível. Este procedimento geralmente converge em poucas iterações (~ 5) se a estimativa inicial for boa, o que geralmente é se $\bar{v}^0 = RT/P$ (volume molar do gás perfeito).

O problema agora é determinar os coeficientes viriais B_m e C_m . Estes coeficientes dependem da temperatura e composição e são dados pelas seguintes equações:

$$B_m = x_a^2 B_{aa} + 2x_a x_v B_{av} + x_v^2 B_{vv} \quad (4)$$

e

$$C_m = x_a^3 C_{aaa} + 3x_a^2 x_v C_{aav} + 3x_a x_v^2 C_{avv} + x_v^3 C_{vvv} \quad (5)$$

Nestas equações $x_a = 1 - x_v$ é a fração molar do ar, x_v é a fração molar do vapor e B_{ii} e C_{iii} são os coeficientes viriais. Expressões estes coeficientes podem ser encontrados nas referências [1, 3] e são apenas função da temperatura.

2.3 Parâmetros para a definição da umidade

Para se especificar o estado da mistura ar-vapor são necessários três parâmetros. Geralmente são empregados a temperatura, a pressão e a composição. É raro medir-se diretamente a composição do ar úmido, medindo-se ao invés algum outro parâmetro como a temperatura do ponto de orvalho ou a temperatura de bulbo úmido. São comuns, ainda, outros parâmetros para a definição da umidade do ar como por exemplo o teor de umidade (ou umidade absoluta) e umidade relativa. Adiante estes parâmetros serão brevemente descritos.

Água pode existir em uma ou mais fases em equilíbrio (vapor-líquido por exemplo). Adicionando ou retirando energia, moléculas podem mudar de fase. No equilíbrio o que ocorre realmente

é um equilíbrio dinâmico onde o número de moléculas indo para uma das fases é igual ao número de moléculas indo para a outra fase. Quando se tem um equilíbrio de fases com temperatura e pressão uniforme de uma substância pura, se diz que o sistema está saturado e o potencial químico de ambas as fases é o mesmo. O mesmo pode acontecer com uma mistura ar-vapor. Neste caso, no entanto o problema é mais complexo e outros fatores como a compressibilidade da fase líquida ou sólida e a solubilidade desta fase não gasosa pode influir na saturação do ar úmido. Para um gás perfeito, a saturação do ar úmido ocorre quando a pressão parcial do vapor corresponde à pressão de saturação do vapor saturado puro. Assim,

$$x_{v,\text{saturação}} = x_{vs} = \frac{P_{sv}(T)}{P}$$

Onde T é a temperatura da mistura e P é a sua pressão. Esta aproximação é bastante razoável para a maioria das aplicações. No caso real esta equação deve ser corrigida. Esta correção vai depender da solubilidade e compressibilidade da fase não gasosa assim como os coeficientes viriais do ar úmido. Desta maneira, segundo [1, 3] a fração molar na saturação vale:

$$x_{vs} = f(T, P) \cdot \frac{P_{sv}(T)}{P} \quad (6)$$

Nesta equação, f é o *enhancement factor* e depende da temperatura e pressão na saturação.

2.4 Fração molar de vapor

A fração molar de vapor é muito utilizada em diversos cálculos na psicrometria mas é raramente utilizado para caracterizar a umidade. A fração molar de vapor, geralmente denotada por x_v vale:

$$x_v = \frac{n_v}{n_a + n_v} \quad (7)$$

Nesta equação, n_v é o número de moles de vapor e n_a é o número de moles do ar.

2.5 Teor de umidade ou umidade absoluta

A umidade absoluta é a quantidade de vapor de água por unidade de massa de ar seco, geralmente representado pela letra grega ω . Esta grandeza é muito utilizada nos cálculos psicrométricos.

$$\omega = \frac{m_v}{m_a} = \frac{M_v}{M_a} \frac{x_v}{1 - x_v} \quad (8)$$

2.6 Umidade relativa

A umidade relativa é definida como a relação entre a fração molar de vapor e a fração molar de vapor na saturação na temperatura da mistura:

$$\phi = \left. \frac{x_v}{x_{vs}} \right|_{P,T} \quad (9)$$

2.7 Temperatura de ponto de orvalho

Quando o ar úmido é resfriado a pressão constante, chegará um momento quando vapor atingirá a saturação e começará a condensar. A temperatura na qual o vapor chega à condição de saturação é a temperatura a ponto de orvalho T_d . No caso de um gás real, esta temperatura vale:

$$x_v = x_{vs}(T_d, P) = f(T_d, P) \cdot \frac{P_{sv}(T_d)}{P} \quad (10)$$

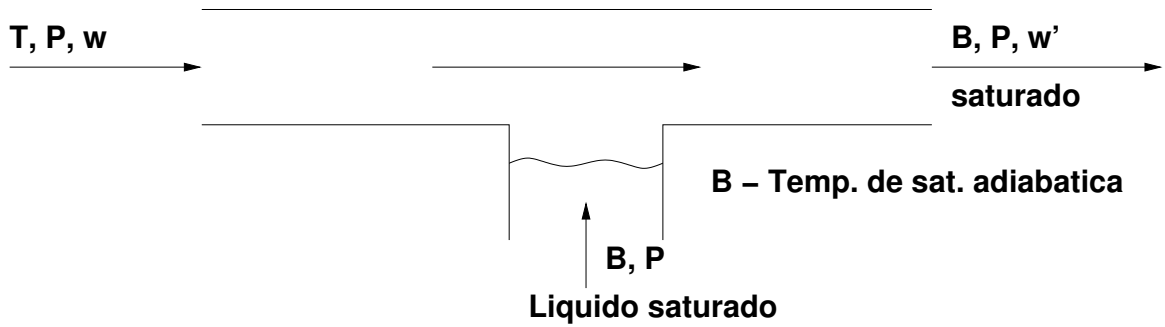


Figura 1: Diagrama esquemático de um Saturador adiabático. O ar na saída deve estar saturado à temperatura B que é a temperatura de saturação adiabática. w é o teor de umidade na entrada e w' é o teor de umidade de saturação na saída

Quando utilizando a temperatura de ponto de orvalho, é importante tomar cuidado se a fração molar de vapor for nula pois neste caso, pode-se abaixar a temperatura do ar sem que nunca se chegue a uma condição de saturação do vapor (que não existe).

2.8 Temperatura de saturação adiabática e temperatura de bulbo úmido

A temperatura de bulbo úmido é a maneira mais comum de se estimar a quantidade de vapor no ar úmido. Isso porque é o psicrômetro mais fácil de se construir. Na realidade, a temperatura de bulbo úmido é uma estimativa da temperatura de saturação adiabática. A figura 1 mostra um diagrama esquemático de um saturador adiabático.

A Para resolver o problema da saturação adiabática deve-se recorrer a um balanço de energia:

$$(1 + \omega)h(T, P, \omega) + (\omega' - \omega)h_l(B, P) = (1 + \omega')h(B, P, \omega') \quad (11)$$

Nesta equação, h é a entalpia do ar úmido e h_l é a entalpia do líquido saturado ou gelo saturado. No caso de gás perfeito, $H = H_a + H_v$, desta maneira, equação pode ser simplificada:

$$h_a(T) + \omega h_v(T) + (\omega' - \omega)h_l(B) = h_a(B) + \omega' h_v(B) \quad (12)$$

No caso da equação 12, conhecido B , pode-se facilmente calcular ω . Caso seja conhecido ω para se determinar B é necessário iterar. No caso de gás real (equação 11) é necessário iterar nas duas situações.

3 Documentação da biblioteca libpsychro

Nesta seção a biblioteca `libpsychro` é detalhada. Esta biblioteca foi desenvolvida em C++ para permitir que fosse expandida facilmente. A biblioteca é construída em cima da classe `Psychro`. Esta classe não implementa nada mas fornece as interfaces que qualquer classe que faça parte desta biblioteca deve ter.

Para se usar a biblioteca é necessário que um modelo tenha sido implementado. Até o momento, foram implementados um modelo utilizando gás perfeito e relações lineares para as entalpias, um modelo de gás real utilizando as equações de [1](neste trabalho denominado ASHRAE e o modelo segundo as equações [2] que é baseado no modelo da ASHRAE pois o modelo é incompleto (modelo denominado, neste trabalho, Giacomo).

A seguir são explicadas as interfaces da biblioteca:

- set** Função básica para entrada de dados. Nesta primeira versão, apenas uma interface para a especificação da mistura ar-vapor foi implementada. É necessário, sempre, entrar com a temperatura, a pressão e um parâmetro que caracteriza a umidade. Este parâmetro pode ser: a umidade relativa ('R'), o teor de umidade ('W'), a fração molar de vapor ('X'), a temperatura de ponto de orvalho ('D') ou a temperatura de bulbo úmido ('B').
- VOLUME** Cálculo do volume específico em m^3/kg de ar seco. Depende da temperatura e pressão.
- DENSITY** Cálculo da massa específica em kg/m^3 . Depende da temperatura e pressão.
- ENTHALPY** Calcula a entalpia do ar úmido em J/kg de ar seco. Depende da temperatura e pressão.
- RELHUM** Calcula a umidade relativa da mistura. Depende da temperatura e pressão
- DEWPOINT** Calcula a temperatura de ponto de orvalho em K . Depende da temperatura e pressão.
- WETBULB** Calcula a temperatura de bulbo úmido em K . Depende da temperatura e pressão.
- HUMRAT** Calcula o teor de umidade.
- MOLFRAC** Calcula a fração molar de vapor.

Utilizando a ferramenta Doxygen pode-se construir a documentação da biblioteca em html. Falta ainda alguns exemplos de aplicação da biblioteca . . .

4 Manual da interface excel da biblioteca libpsychro

Foi desenvolvida um interface excel para a biblioteca libpsychro. Esta interface permite, numa planilha excel calcular as propriedades do ar úmido utilizando a metodologia da ASHRAE e de Giacomo. Os nomes das funções são idênticos exceto que nas funções que utilizam o método de Giacomo, existe uma extensão `_iso`. Por exemplo para calcular a densidade:

- ASHRAE: `density(...)`
- Giacomo: `density_iso(...)`

Observe que por conveniência, as unidades utilizadas são mais próximas das usuais: Temperatura $^{\circ}C$, Pressão kPa , energia kJ . A seguir as funções serão brevemente descritas. Para caracterizar qual o parâmetro de umidade utilizado é utilizado um caracter. No excel o caracter deve estar entre aspas duplas ("B" por exemplo).

W Teor de umidade.

X Fração molar.

R Umidade relativa.

D Temperatura de ponto de orvalho.

B Temperatura de bulbo úmido

Estes caracteres são utilizados para especificar como a umidade é entrada.

4.0.1 `density(ch, T, umidade, P)`

Esta função calcula a massa específica do ar úmido em kg/m^3 . `ch` pode ser um dos caracteres já mostrados, `T` é a temperatura em $^{\circ}C$, `umidade` depende de `ch`. Se for B, `umidade` é a temperatura de ponto de orvalho em $^{\circ}C$. Se for D é o ponto de orvalho em $^{\circ}C$ se for W o teor de umidade, se for X a fração molar de vapor e se for R é a umidade relativa.

4.0.2 volume(ch, T, umidade, P)

Esta função calcula o volume específico em m^3/kg de ar seco.

4.0.3 enthalpy(ch, T, umidade, P)

Esta função calcula a entalpia em kJ/kg de ar seco.

4.0.4 relhum(ch, T, umidade, P)

Esta função calcula a umidade relativa.

4.0.5 dewpoint(ch, T, umidade, P)

Esta função calcula a temperatura de ponto de orvalho em $^{\circ}C$.

4.0.6 wetbulb(ch, T, umidade, P)

Esta função calcula a temperatura de bulbo úmido em $^{\circ}C$.

4.0.7 Z(ch, T, umidade, P)

Esta função calcula a compressibilidade do ar úmido.

4.0.8 efactor(T, P)

Esta função calcula o *enhancement factor*.

4.0.9 Psv(T)

Esta função calcula a pressão de saturação de vapor em kPa .

4.0.10 Tsv(P)

Esta função calcula a temperatura de saturação de vapor em $^{\circ}C$

Observar que todas as funções, se estiverem com o sufixo `_iso` serão calculadas utilizando o método de Giacomo[2]. Os valores são muito próximos. Na densidade as diferenças são inferiores a $2 \times 10^{-5} kg/m^3$.

Faixas de aplicação:

Giacomo 15 a $27^{\circ}C$ e 60 a $110 kPa$

ASHRAE -100 a $200^{\circ}C$ e 0 a $5000 kPa$

4.1 Uso da interface

A interface é muito simples de utilizar. Muito cuidado deve ser tomado ao abrir a planilha para que a biblioteca seja encontrada (uma DLL). *Não clicar diretamente no arquivo excel. Utilizar os menus do excel.*

Exemplo: calcular a massa específica do ar a $20^{\circ}C$, pressão de $93 kPa$ e temperatura de ponto de orvalho de $15^{\circ}C$:

digitar na célula da planilha: `=density("R"; 20; 15; 93)`. Neste caso, é possível utilizar o método de Giacomo; basta mudar `densidade` para `densidade_iso`.

5 Limitações e melhorias futuras

A `libpsychro` ainda está em versão beta. Não foi testada o suficiente e outras melhorias são possíveis. Faltam ainda propriedades termodinâmicas como a entropia por exemplo. Não foram implementadas propriedades de transporte e este documento deve ser melhorado. Um pequeno tutorial de como compilar, instalar e utilizar a biblioteca é importante.

A interface em R ainda precisa ser terminada (falta implementar o NAMESPACE e a documentação). Talvez fosse interessante interfaces em outras linguagens como python, fortran, octave ou scilab. A possibilidade de entrar com os dados de maneira mais flexível também pode ajudar bastante em algumas aplicações.

Quaisquer críticas ou comentários são bem vindos.

Referências

- [1] ASHRAE, editor. *Psychrometrics: Theory and practice*. ASHRAE, 1996.
- [2] P. Giacomo. Equation for the determination of the density of moist air (1981). *Metrologia*, 18:33–40, 1982.
- [3] R. W. Hyland and A. Wexler. Formulations for the thermodynamic properties of dry air from 173k to 473k and of saturated moist air from 173.15k to 372.15k at pressures to mpa. *ASHRAE Transactions*, 89(2A):520–535, 1983.
- [4] R. W. Hyland and A. Wexler. Formulations for the thermodynamic properties of the saturated phases of h_2o from 173k to 473k. *ASHRAE Transactions*, 89(2A):500–519, 1983.
- [5] Michael J. Moran and Howard N. Shapiro. *Princípios de termodinâmica para Engenharia*. LTC, 4th edition, 2000.
- [6] Gordon Van Wylen, Richard Sonntag, and Claus Borgnakke. *Fundamentos da termodinâmica clássica*. Edgard Blücher, 1995.