

# Termodinâmica computacional em Python

## *Dia 1: Substâncias puras*

**Ministrante:** Prof. Rogério Navarro Correia de Siqueira - [rnavarro@puc-rio.br](mailto:rnavarro@puc-rio.br).

### Metas

- Compreender o conceito de pressão de saturação de um fluido puro ( $P^{sat}$ ) e sua relevância do ponto de vista de engenharia.
  - *Compreender a essência por trás dos modelos de Antoine e Peng – Robinson.*
  - *Entender a natureza das isotermas associadas do modelo de Peng – Robinson.*
- *Compreender como o ponto crítico pode ser identificado a partir de isotermas de Peng – Robinson.*
- *Compreender o significado físico dos coeficientes de fugacidade e como estes podem ser calculados a partir do modelo de Peng – Robinson.*
- *Compreender como os modelos de Peng – Robinson e Antoine podem ser empregados na modelagem de  $P^{sat}$ .*

### Atividades

1. Demonstrar a partir da relação fundamental para a energia de Gibbs molar de uma substância (Eq. 1) que a pressão de equilíbrio quando líquido e vapor se encontram simultaneamente no equilíbrio deve ser função da temperatura. Em seguida, dazer o esboço da curva de ebulição de um fluido puro genérico, indicando seus pontos terminais. Finalmente, discutir como o conhecimento de tal curva poderia ser interessante do ponto de vista da engenharia de sistemas em processos.

$$dg = -sdT + pdv \quad (1)$$

2. Discutir a essência dos modelos de Antoine e Peng – Robinson (PR), com ênfase nos parâmetros envolvidos. No que diz respeito ao modelo de PR discutir a diferença entre a abordagem clássica, o modelo PSRV e a função  $\alpha$  de Almeida e Tellez para o cálculo do parâmetro atrativo.
3. Definir coeficiente de fugacidade de um fluido e demonstrar como este poderia ser útil no cálculo da pressão de saturação. Em seguida, discutir como tal parâmetro pode ser calculado a partir do modelo de Peng – Robinson.

4. Empregando os parâmetros de Antoine site do NIST, assim como os valores de  $T_c$ ,  $P_c$  e  $w$  do Handbook do Perry, realizar o cálculo da pressão de saturação da acetona, ciclo-hexano, benzeno, etanol, dietil-éter e metanol, com os modelos de Antoine e Peng – Robinson (formulação clássica).
5. Em seguida, repetir o cálculo considerando-se os modelos PSRV e a função alfa de Almeida e Tellez e realizar uma análise crítica dos resultados obtidos tendo em vista a uma maior proximidade das previsões do modelo com os dados experimentais.