

Termodinâmica computacional em Python

Dia 2: Misturas binárias

Ministrante: Prof. Rogério Navarro Correia de Siqueira - rnavarro@puc-rio.br.

Metas

- Compreender as abordagens $f_i - f_i$ e $\gamma - f_i$ para a modelagem do ELV.
- Compreender como coeficientes de fugacidade em misturas podem ser calculados a partir da equação de Peng – Robinson.
- Compreender como coeficientes de fugacidade podem ser calculados a partir do modelo UNIQUAC.
- Compreender como algoritmos para o cálculo ELV via pressão de bolha podem ser construídos.

Atividades

1. Apresentar e discutir as equações fundamentais para o cálculo do ELV nas abordagens $f_i - f_i$ e $\gamma - f_i$. A partir da equação para a abordagem $\gamma - f_i$, discutir como a lei de Raoult pode ser formulada.
2. Discutir como coeficientes de fugacidade em misturas podem ser calculados a partir do modelo de Peng – Robinson.
3. Discutir o código e rodar os exemplos disponíveis no notebook do Jupyter tendo em vista a modelagem do ELV para os sistemas dietil-éter – acetona e dietil – éter – metanol na abordagem $f_i - f_i$.
4. Discutir como coeficientes de atividade podem ser calculados a partir de modelos de G^{ex} . Em seguida, discutir as equações para coeficientes de fugacidades oriundas do modelo UNIQUAC.
5. Discutir o código e rodar o exemplo do notebook do Jupyter associado à modelagem ELV para o sistema benzeno – etanol. Em seguida, variar a temperatura no intervalo entre 318.15 K e 326.15 K e discutir o efeito, ou não, no tocante ao deslocamento do ponto azeotrópico da mistura. Finalmente, inverter os sinais dos parâmetros energéticos do modelo UNIQUAC e discutir o efeito quanto ao ponto azeotrópico calculado a 318.15 K.