

Unidade I – 2º Trabalho

Data da Limite de Entrega: **17/06/25**

Valor: 10 pontos (70% da Nota 1)

Proposta: Implementar programa computacional para cálculos termodinâmicos: massa específica de substâncias puras.

O programa deve atender **TODOS** os requisitos abaixo.

Atividade **INDIVIDUAL**.

Requisitos:

- O programa deve estar devidamente comentado.
- O resultado (Saída) deve ser exibido em planilha ou outra base de dados (.txt ou .doc ou .pdf, etc.)
- Caso qualquer dos cálculos ultrapasse mais de **100 iterações**, o programa deve exibir a mensagem “Não houve convergência na fase líquida” ou “Não houve convergência na fase vapor” e interromper.
- O estudante pode propor modificações que tornem o programa ainda mais genérico, como a implementação de base de dados com diferentes compostos.

Forma de Apresentação/Entrega:

- Enviar **programa computacional e base de dados** (caso haja)
- Informar software recomendado para rodar o programa.
- Enviar via **AVA/Moodle**

Enunciado: O volume molar é uma importante propriedade termodinâmica e por isso mesmo dezenas de modelos termodinâmicos vem sendo desenvolvidos desde 1873, quando o primeiro modelo foi proposto por J. D. van der Waal. A partir deste modelo, diversos outros modelos cúbicos foram desenvolvidos, como os modelos de Peng-Robinson, Soave, Redlich-Kwong, etc. Por se tratarem de modelos cúbicos, matematicamente eles podem gerar até 3 raízes reais, sendo que destes apenas duas delas tem significado físico. Expressa na sua forma iterativa, como apresentado na Eq. 1, a raiz menor representa o volume molar da fase líquida e a raiz maior representa o volume molar da fase vapor.

Eq. 1
$$V_{i+1} = \frac{RT}{P} + b - \frac{a(V_i - b)}{T^{1/2}PV_i(V_i + b)}$$

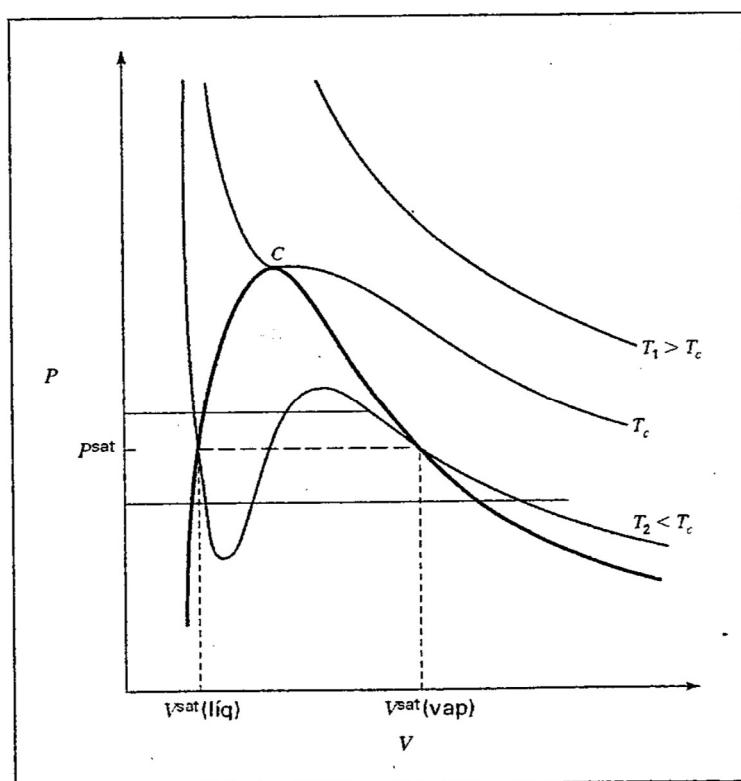


Figura 1. Isothermas geradas por uma equação de estado cúbica.

A determinação do volume molar se dará a partir de cálculo iterativo Eq. 1, dado uma estimativa inicial para o volume molar V_i de modo que o erro $|V_{i+1} - V_i|$ seja menor que 0,001. Sendo os parâmetros a e b representações das contrições de atração e repulsão intermolecular, respectivamente. Abaixo estão apresentados tais parâmetros para os modelos van der Waals, Redlich-Kwong e Peng-Robinson.

Equação de van der Waals (vdW)

$$\text{Eq. 2} \quad a = \frac{27R^2T_c^2}{64P_c}$$

$$\text{Eq. 3} \quad b = \frac{RT_c}{8P_c}$$

Equação de Redlich-Kwong (RK)

$$\text{Eq. 4} \quad a = \frac{0,42748R^2T_c^{2,5}}{P_c}$$

$$\text{Eq. 5} \quad b = \frac{0,08664RT_c}{P_c}$$

Equação de Peng-Robinson (PR)

$$\text{Eq. 6} \quad a = \frac{0,45724R^2T_c^2}{P_c}$$

$$\text{Eq. 7} \quad b = \frac{0,07780RT_c}{P_c}$$

Como estimativa inicial para os cálculos deve se considerar que $V_i = b$ (líquido) e o

$V_i = RT/P$ (vapor).

Organização do Programa:

O programa deve ser organizado conforme a Figura 2.

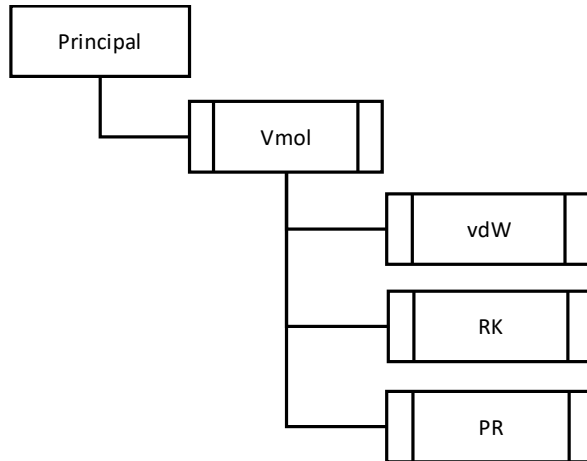


Figura 2. Estrutura do programa.

Programa Principal:

- Informar modelo termodinâmico [texto], Fase [texto], Temperatura Crítica T_c [K], Pressão Crítica P_c [bar], Temperatura T [K], Pressão P [bar].
- Calcular e exibir o volume molar [cm^3/mol] de ambas as fases.
- Calcular e exibir a massa específica [g/cm^3] de ambas as fases.

Função:

Vmol (Modelo, Fase, CRT, COND)

Onde,

Modelo – Nome da modelo termodinâmico: **vdW**, **RK** ou **PR**

Fase – (entrada) indicação da fase **L** (líquido) ou **V** (vapor)

CRT – (entrada) vetor com as propriedades críticas T_c [K] e P_c [bar]

COND – (entrada) vetor com as propriedades críticas T [K] e P [bar]

Vmol – (saída) volume molar (saída) [cm^3/mol]

Sub-rotinas:

NOME (EstIni, CRT, PARAM)

Onde,

NOME – Nome da subrotina: **vdW**, **RK** e **PR**

EstIni – (entrada) estimativa inicial do volume molar

CRT – (entrada) vetor com as propriedades críticas T_c [K] e P_c [bar]

PARAM – (saída) vetor com os parâmetros a e b

Dados para testar o programa:

Composto	Massa molar [g/mol]	T_c [K]	P_c [bar]
Cloreto de Metila	50,488	416,3	66,80

$R = 83,14 \text{ cm}^3 \cdot \text{bar}/(\text{mol} \cdot \text{K})$

Considere a temperatura de $T = 60^\circ\text{C}$ e pressão $P = 13,76 \text{ bar}$.