**Exercício de aplicação para o capítulo 8**

O Potencial de Helmholtz para o etanol, de acordo com o artigo *“A Fundamental Equation of State for Ethanol”* é obtido pela expressão

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

Em que é energia de Helmholtz, a energia de Helmholtz adimensional, a contribuição de gás ideal da energia adimensional de Helmholtz e a porção residual da energia. Onde

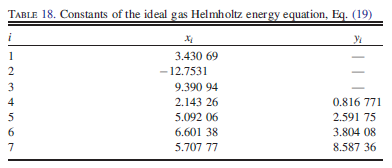
|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

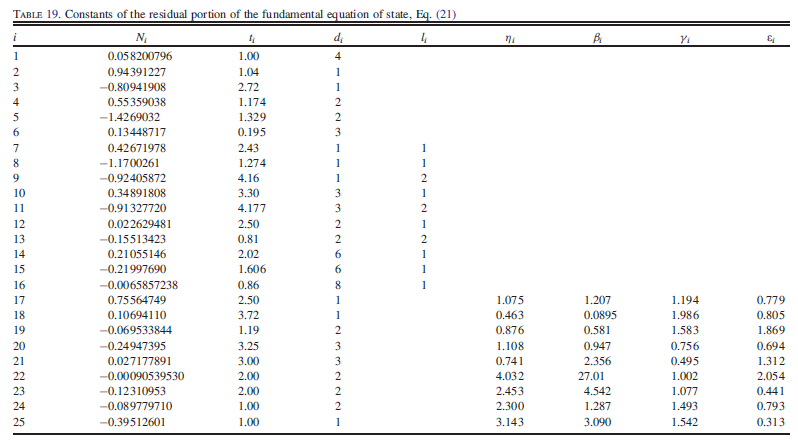
Sendo a densidade crítica e a temperatura crítica. Os termos e são escritos como

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |
|  | (5) |

As constantes e são dadas pela tabela 18.



E e pela tabela 19.



A condição de estabilidade para o potencial de Helmholtz é uma função côncava da temperatura de acordo com a equação

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

O desenvolvimento analítico foi realizado até a primeira derivada.

Utilizando a regra da cadeia

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (8) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10) |

Aplicando em e

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

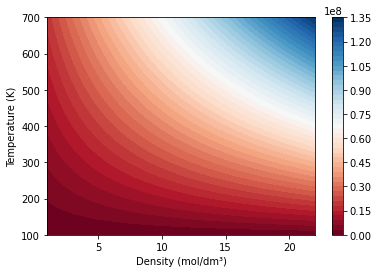
|  |  |
| --- | --- |
|  | (12) |

Substituindo na equação 12

|  |  |
| --- | --- |
|  | (13) |

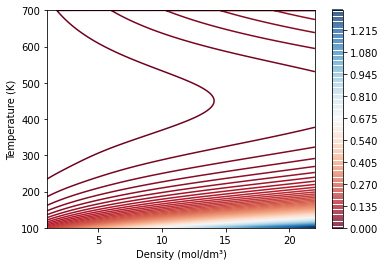
Devido à complexidade dos termos, a tentativa de estimação das regiões de estabilidade foi realizada por meio da utilização de ferramentas numéricas. Para o problema, fez-se o uso de um algoritmo em Python.

A função na formulação do potencial de Helmholtz dada pela equação 1 descreve a superfície abaixo, com unidade de .



A equação 6 determina a condição para que determinado sistema termodinâmico seja estável. Nas demais regiões, o sistema apresenta inomogeneidades internas, que são uma característica básica das transições de fase e identificam os estados de não equilíbrio.

A região limitada pela equação 4 obtida é demonstrada abaixo.



Os resultados foram obtidos numericamente utilizando uma discretização de 4000 elementos para cada variável independente. Nota-se que quanto maior o número de elementos utilizados, mais as curvas de nível se aproximam do ponto crítico nas coordenadas .

Código utilizado: