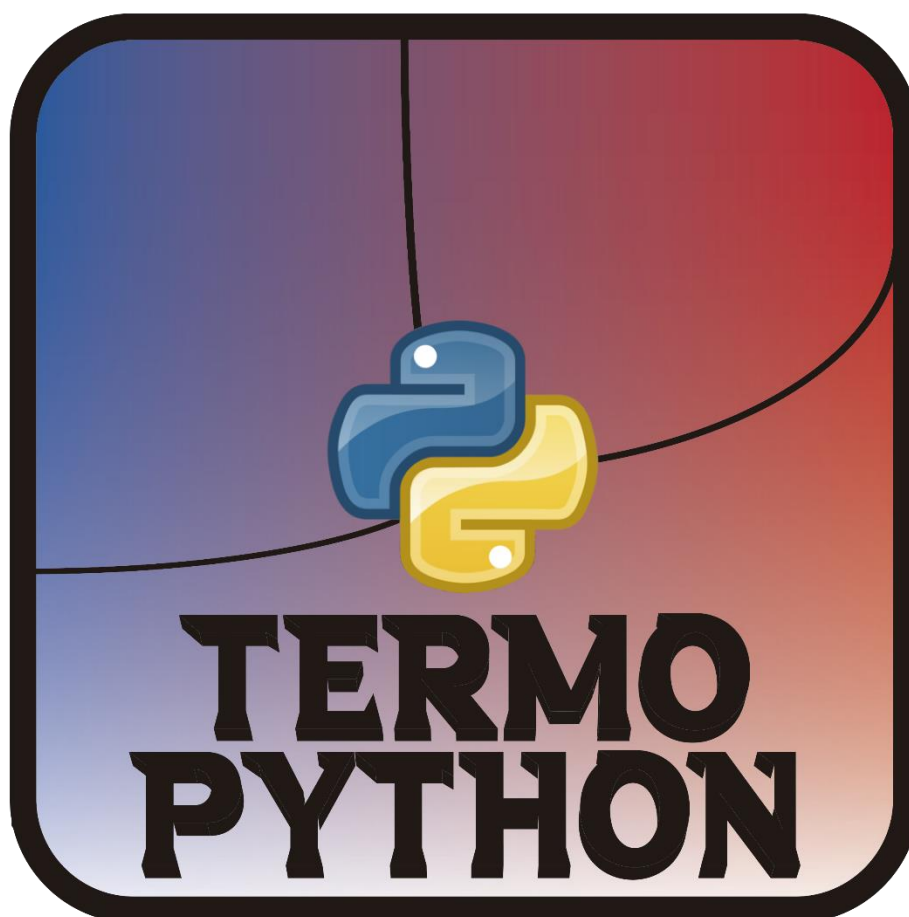


Tutorial – TermoPython



Desenvolvido por:

Ana Luisa Carvalho Mendonça

Danton de Godoy Antonio

Leonardo Izaias Rodrigues

Maria Carolina Barbosa Silveira

Raissa Alves Morganti Paula

Nº USP: 10872180

Nº USP: 11801348

Nº USP: 11801373

Nº USP: 10781971

Nº USP: 11801400

ana.lucarmendo@usp.br

dan74@usp.br

leoizaias@usp.br

mcarolbs@usp.br

raissa.amp@usp.br

Disciplina:

Computação Científica em Python (LOM3260)

Docente:

Luiz Tadeu Fernandes Eleno

Tutorial - TermoPython

O programa TermoPython é uma ferramenta para o estudo de Termodinâmica Química Aplicada com foco em Equilíbrio de Fases Líquido-Vapor (ELV). O código implementado tem como objetivo prever, a partir da entrada de pontos experimentais pelo usuário, os valores de pressão de equilíbrio de fases à altas pressões utilizando o método de Peng-Robinson para substâncias puras e o método de Peng-Robinson em conjunto com Regras de Mistura de van der Waals para predição dos valores de pressão e fração molar de vapor do ELV de misturas binárias.

1. Após o download do arquivo '*TermoPython.zip*' e sua descompactação, abra o arquivo '*MainTermoPython.py*'

Ao rodar o código, será exibida a seguinte mensagem:

```
Bem vindo ao TermoPython.

--> Esse software foi feito para otimizar
valores experimentais de pressão em sistemas de
equilíbrios de fase líquido - vapor.
--> Para consultar detalhes de uso do software
acesse o tutorial e para detalhes de
funcionamento acesse o manual.

Escolha o tipo de sistema que será usado (-
substância pura/sp- ou -mistura binária/mb-):
```

2. Escolha o sistema com o qual queira trabalhar.

- ❖ Caso queira trabalhar com uma substância pura digite “substância pura” ou “sp” e aperte enter.
- ❖ Caso queira trabalhar com uma mistura binária digite “mistura binária” ou “mb” e aperte enter.

3. Após escolher o sistema, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Deseja inserir os dados da substância manualmente?(sim/s ou não/n): |
```

- ❖ Caso queira inserir manualmente os dados da substância digite “sim” ou “s”.
- ❖ Caso queira utilizar os dados para uma substância pura listada no arquivo “Dados_Subst_Puras.xlsx”, digite “não” ou “n” e aperte enter.
- ❖ Caso queira utilizar os dados mistura binária listada em “Dados_Misturas.xlsx” digite “não” ou “n” e aperte enter

Trabalhando Com Substância Pura

Inserção Manual de Dados

4. Caso tenha escolhido inserir os dados da substância pura, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Temperatura de ponto triplo(K): |
```

Digite a temperatura, em kelvin, de ponto triplo da substância com a qual está trabalhando e aperte enter.

5. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Temperatura crítica(K): |
```

Digite a temperatura, em kelvin, do ponto crítico da substância com a qual está trabalhando e aperte enter.

6. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Pressão crítica(MPa):
```

Digite a pressão, em megapascal (MPa), do ponto crítico da substância com a qual está trabalhando e aperte enter.

7. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Fator acêntrico:
```

Digite o fator acêntrico específico da substância com a qual está trabalhando e aperte enter.

8. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Constante universal dos gases(J/mol.K): |
```

Digite a constante universal dos gases perfeitos em J/(mol.K) e aperte enter.

9. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Tolerância para a pressão otimizada:
```

Digite a tolerância de aproximação para otimização da pressão e aperte enter.

10. Seguida da mensagem:

```
O software será usado para o cálculo um único ponto de pressão, ou de uma curva de  
equilíbrio(-ponto/p- ou -curva/c-):
```

- ❖ Caso deseje calcular a pressão de equilíbrio em um ponto digite “ponto” ou “p” e aperte enter.
- ❖ Caso deseje calcular uma curva de equilíbrio para a substância trabalhada digite “curva” ou “c” e pressione enter.

Ponto:

11. Caso tenha selecionado a opção para calcular a pressão de equilíbrio em um ponto, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Temperatura(K):
```

Digite a temperatura em kelvin do ponto no qual deseja calcular a pressão de equilíbrio e pressione enter.

12. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Pressão experimental(Mpa):
```

Digite a pressão em MPa do ponto no qual deseja calcular a pressão de equilíbrio e pressione enter.

13. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
A pressão de equilíbrio para essa temperatura é
```

A mensagem exibirá a pressão de equilíbrio no ponto selecionado.

14. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Escolha o nome do arquivo de resultados: |
```

Digite o nome do arquivo no qual deseja salvar os dados apurados e pressione enter.

15. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Um arquivo com o nome escolhido foi gerado no  
diretório em que se encontra o TermoPython
```

Esta mensagem indica que foi gerado e salvo um arquivo .txt com o nome escolhido no mesmo diretório em que o TermoPython está localizado no computador.

Curva:

11. Caso tenha selecionado a opção para calcular a curva de equilíbrio em uma sequência de pontos, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a temperatura(T1,T2,...,Tn): |
```

Digite uma sequência de valores de temperatura, em kelvin, separados por vírgula e pressione enter.

12. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a pressão experimental(P1,P2,...,Pn):
```

Digite uma sequência de valores experimentais de pressão, em MPa, separados por vírgula e pressione enter.

OBS: O número de pontos (valores) de temperatura e pressão inseridos devem ser equivalentes para que seja gerado o gráfico.

13. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Distância do ponto triplo de temperatura:
```

Digite a distância do ponto triplo de temperatura, para o limite inferior e pressione enter.

14. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Distância do ponto crítico de temperatura: |
```

Digite a distância do ponto triplo de temperatura, para o limite superior e pressione enter.

OBS: Em pontos muito próximos aos extremos podem não haver convergência no gráfico, portanto são solicitadas as distâncias de ponto triplo e crítico. Recomenda-se valores para uma distância mínima de 20 a 50 K, dependendo da substância. Para mais detalhes, consulte o manual.

15. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
O gráfico foi baixado em formato .png no diretório em que se encontra o  
TermoPython.
```

Esta mensagem indica que foi gerado um gráfico da curva de equilíbrio e que este foi salvo no mesmo diretório no qual está localizado o TermoPython em seu computador.

Inserção Automática de Dados

4. Caso tenha escolhido não inserir os dados da substância pura, aparecerá uma lista enumerada com as substâncias listadas no programa e a seguinte mensagem:

```
Escolha uma substância de acordo com a lista acima (número): |
```

Digite o número da substância pura com a qual queira trabalhar e aperte enter.

5. Prontamente, aparecerá a seguinte mensagem mostrando os dados da substância selecionada:

```
Escolha uma substância de acordo com a lista acima (número): 41
Substância                      Sulfato de Hidrogênio
Pressão Ponto Triplo (MPa)      0.0232
Temperatura Ponto Triplo (K)    187.68
Pressão Ponto Crítico (MPa)    8.9629
Temperatura Ponto Crítico (K)  373.53
Fator acêntrico                 0.09417
Name: 41, dtype: object
```

6. Seguida da mensagem:

```
O software será usado para o cálculo um único ponto de pressão, ou de uma curva de
equilíbrio(-ponto/p- ou -curva/c-):
```

❖ Caso deseje calcular a pressão de equilíbrio em um ponto digite “ponto” ou “p” e aperte enter.

❖ Caso deseje calcular uma curva de equilíbrio para a substância trabalhada digite “curva” ou “c” e pressione enter.

Ponto:

7. Caso tenha selecionado a opção para calcular a pressão de equilíbrio em um ponto, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Temperatura(K):
```

Digite a temperatura em kelvin do ponto no qual deseja calcular a pressão de equilíbrio e pressione enter.

8. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Pressão experimental(Mpa):
```

Digite a pressão em MPa do ponto no qual deseja calcular a pressão de equilíbrio e pressione enter.

9. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
A pressão de equilíbrio para essa temperatura é
```

A mensagem exibirá a pressão de equilíbrio no ponto selecionado.

10. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Escolha o nome do arquivo de resultados: |
```

Digite o nome do arquivo no qual deseja salvar os dados apurados e pressione enter.

11. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Um arquivo com o nome escolhido foi gerado no  
diretório em que se encontra o TermoPython
```

Esta mensagem indica que foi gerado e salvo um arquivo .txt com o nome escolhido no mesmo diretório em que o TermoPython está localizado no computador.

Curva:

8. Caso tenha selecionado a opção para calcular a curva de equilíbrio em uma sequência de pontos, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a temperatura(T1,T2,...,Tn): |
```

Digite uma sequência de valores de temperatura, em kelvin, separados por vírgula e pressione enter.

9. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a pressão experimental(P1,P2,...,Pn):
```

Digite uma sequência de valores experimentais de pressão, em MPa, separados por vírgula e pressione enter.

OBS: O número de pontos (valores) de temperatura e pressão inseridos devem ser equivalentes para que seja gerado o gráfico.

10. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Distância do ponto triplo de temperatura:
```

Digite a distância do ponto triplo de temperatura, para o limite inferior e pressione enter.

11. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Distância do ponto crítico de temperatura: |
```

Digite a distância do ponto triplo de temperatura, para o limite superior e pressione enter.

OBS: Em pontos muito próximos aos extremos podem não haver convergência no gráfico, portanto são solicitadas as distâncias de ponto triplo e crítico. Recomenda-se valores para uma distância mínima de 20 a 50 K, dependendo da substância. Para mais detalhes, consulte o manual.

12. Finalmente, aparecerá a mensagem:

```
O gráfico foi baixado em formato .png no diretório em que se encontra o  
TermoPython.
```

Esta mensagem indica que foi gerado um gráfico da curva de equilíbrio e que este foi salvo no mesmo diretório no qual está localizado o TermoPython em seu computador.

Trabalhando Com Mistura Binária

Inserção Manual de Dados

4. Caso tenha escolhido inserir os dados da mistura binária, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Temperatura do sistema(K):
```

Digite a temperatura, em kelvin, de ponto triplo da mistura binária com a qual está trabalhando e aperte enter.

5. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Temperatura crítica do 1º componente(K):
```

Digite a temperatura, em kelvin, do ponto crítico da substância que é o primeiro componente da mistura binária com a qual está trabalhando e pressione enter.

6. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Temperatura crítica do 2º componente(K):
```

Digite a temperatura, em kelvin, do ponto crítico da substância que é o segundo componente da mistura binária com a qual está trabalhando e pressione enter.

7. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Pressão crítica do 1º componente(atm):
```

Digite a pressão, em atmosfera padrão (atm), do ponto crítico da substância que é o primeiro componente da mistura binária com a qual está trabalhando e pressione enter.

8. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Pressão crítica do 2º componente(atm):
```

Digite a pressão, em atmosfera padrão (atm), do ponto crítico da substância que é o segundo componente da mistura binária com a qual está trabalhando e pressione enter.

9. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
fator acêntrico do 1º componente: |
```

Digite o fator acêntrico do primeiro componente da mistura binária e pressione enter.

10. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
fator acêntrico do 2º componente:
```

Digite o fator acêntrico do segundo componente da mistura binária e pressione enter.

11. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
O software será usado para o cálculo um único ponto de pressão, ou de uma curva de  
equilíbrio(-ponto/p- ou -curva/c-):  
|
```

❖ Caso deseje calcular a pressão de equilíbrio em um ponto digite “ponto” ou “p” e aperte enter.

❖ Caso deseje calcular uma curva de equilíbrio para a mistura binária trabalhada digite “curva” ou “c” e pressione enter.

Ponto

12. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Pressão experimental(atm):
```

Digite a pressão experimental em atmosfera padrão (atm) do ponto no qual deseja calcular a pressão de equilíbrio e pressione enter.

13. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Fração molar da fase líquida:
```

Digite a fração molar da fase líquida da mistura binária e pressione enter.

14. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Fração molar da fase vapor:
```

Digite a fração molar da fase vapor da mistura binária e pressione enter.

15. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
A pressão de equilíbrio para essa temperatura é:
```

A mensagem exibirá a pressão de equilíbrio no ponto selecionado.

16. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Escolha o nome do arquivo de resultados: |
```

Digite o nome do arquivo no qual deseja salvar os dados apurados e pressione enter.

17. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Um arquivo com o nome escolhido foi gerado no  
diretório em que se encontra o TermoPython
```

Esta mensagem indica que foi gerado e salvo um arquivo .txt com o nome escolhido no mesmo diretório em que o TermoPython está localizado no computador.

Curva

12. Caso tenha selecionado a opção para calcular a curva de equilíbrio em uma sequência de pontos, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a pressão experimental(P1,P2,...,Pn): |
```

Digite uma sequência de valores experimentais de pressão, em atm, separados por vírgula e pressione enter.

13. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a fração molar da fase  
líquida(X1,X2,...,Xn):
```

Digite uma sequência de valores para a fração molar da fase líquida, adimensional, separados por vírgula e pressione enter.

14. Em seguida, aparecerá a mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a fração molar da fase  
vapor(Y1,Y2,...,Yn):
```

Digite uma sequência de valores para a fração molar da fase vapor, adimensional, separados por vírgula e pressione enter.

OBS: A quantidade de pontos (valores) de pressão experimental fração molar da fase líquida e fração molar da fase vapor inseridos devem ser equivalentes para que seja gerado o gráfico.

15. Finalmente, será exibida a mensagem:

```
Um arquivo com o nome escolhido foi gerado no  
diretório em que se encontra o TermoPython
```

Esta mensagem indica que foi gerado um gráfico da curva de equilíbrio e que este foi salvo no mesmo diretório no qual está localizado o TermoPython em seu computador.

Inserção Automática de Dados

4. Caso tenha escolhido não inserir os dados da substância pura, aparecerá uma lista enumerada com as misturas binárias no programa e a seguinte mensagem:

```
Selecione uma mistura binária de acordo com a lista acima (número):
```

Digite o número da mistura binária com a qual deseja trabalhar e pressione enter.

5. Em seguida, aparecerá a seguinte mensagem mostrando os dados da mistura binária selecionada:

```
Selecione uma mistura binária de acordo com a lista acima (número): 02
Sistema                               CO2 (1) - Pentano (2)
Pressão Crítica do Componente 1 (atm)      72.8
Pressão Crítica do Componente 2 (atm)      33.26
Temperatura Crítica do Componente 1 (K)    304.2
Temperatura Crítica do Componente 2 (K)    469.7
Fator Acêntrico do Componente 1           0.225
Fator Acêntrico do Componente 2           0.251
```

6. Em seguida, será exibida a mensagem:

```
Temperatura do sistema(K):
```

Digite a temperatura do sistema, em kelvin e pressione enter.

7. Seguida da mensagem:

```
O software será usado para o cálculo um único ponto de pressão, ou de uma curva de
equilíbrio(-ponto/p- ou -curva/c-):
```

❖ Caso deseje calcular a pressão de equilíbrio em um ponto digite “ponto” ou “p” e aperte enter.

❖ Caso deseje calcular uma curva de equilíbrio para a substância trabalhada digite “curva” ou “c” e pressione enter.

Ponto

8. Caso tenha selecionado a opção para calcular a pressão de equilíbrio em um ponto, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Pressão experimental(atm):
```

Digite a pressão experimental em atmosfera padrão (atm) do ponto no qual deseja calcular a pressão de equilíbrio e pressione enter.

9. Em seguida, será exibida a mensagem:

```
Fração molar da fase líquida:
```

Digite a fração molar da fase líquida da mistura binária e pressione enter.

10. Em seguida, será exibida a mensagem:

```
Fração molar da fase vapor:
```

Digite a fração molar da fase vapor da mistura binária e pressione enter.

11. Em seguida, será exibida a mensagem:

```
A pressão de equilíbrio para essa temperatura é:
```

A mensagem exibirá a pressão de equilíbrio no ponto selecionado

12. Em seguida, será exibida a mensagem:

```
Escolha o nome do arquivo de resultados: |
```

Digite o nome do arquivo no qual deseja salvar os dados apurados e pressione enter.

13. Em seguida, será exibida a mensagem:

```
Um arquivo com o nome escolhido foi gerado no  
diretório em que se encontra o TermoPython
```

Esta mensagem indica que foi gerado e salvo um arquivo .txt com o nome escolhido no mesmo diretório em que o TermoPython está localizado no computador.

Curva

8. Caso tenha selecionado a opção para calcular a curva de equilíbrio em uma sequência de pontos, aparecerá a seguinte mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a pressão experimental(P1,P2,...,Pn): |
```

Digite uma sequência de valores experimentais de pressão, em atm, separados por vírgula e pressione enter.

9. Em seguida, será exibida a mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a fração molar da fase  
líquida(X1,X2,...,Xn):
```

Digite uma sequência de valores para a fração molar da fase líquida, adimensional, separados por vírgula e pressione enter.

10. Em seguida, será exibida a mensagem:

```
Insira uma sequência de pontos para a fração molar da fase  
vapor(Y1,Y2,...,Yn):
```

Digite uma sequência de valores para a fração molar da fase vapor, adimensional, separados por vírgula e pressione enter.

OBS: A quantidade de pontos (valores) de pressão experimental fração molar da fase líquida e fração molar da fase vapor inseridos devem ser equivalentes para que seja gerado o gráfico.

11. Finalmente, será exibida a seguinte mensagem:

```
Um arquivo com o nome escolhido foi gerado no  
diretório em que se encontra o TermoPython
```

Esta mensagem indica que foi gerado um gráfico da curva de equilíbrio e que este foi salvo no mesmo diretório no qual está localizado o TermoPython em seu computador.