

**UFRJ/EQ, Agosto de 2018 – Dezembro de 2018.**

## **Proposta de trabalho computacional como critério de avaliação na disciplina de termodinâmica.**

Parte II. Atualizado em 07/11/2018.

Frederico W. Tavares<sup>1</sup>; Iuri S. V. Segtovich.

<sup>1</sup>Professor responsável

### **Modificação na fórmula para cálculo da média:**

$$M_1 = \frac{(P_1 + P_2 + T_C)}{3}$$

$$M_2 = \frac{(M_1 + P_f)}{2}$$

A nota da  $P_S$  substitui a nota da  $P_1$  ou  $P_2$ , não substitui a nota do trabalho computacional  $T_C$ .

### **Critérios para avaliação do trabalho**

#### 1. Documento.

- O trabalho deverá ser entregue no formato jupyter-notebook (trabalho.ipynb), incluindo introdução (objetivos e descrição do sistema de interesse), metodologia (descrição das etapas necessárias para atingir os objetivos), resultados (código desenvolvido e gráficos) e discussão (interpretação dos resultados), e conclusão; e será avaliado quanto a:
  - Apresentação do embasamento da metodologia utilizada,
  - Organização do código (#comentários explicando o objetivo de blocos de código)
  - Se o programa roda e gera resultados corretos para o sistema proposto,
  - Discussão dos resultados (descrever e interpretar os gráficos obtidos),
  - Conclusão.

#### 2. Arguição.

- Será conduzida individualmente uma arguição de até 10 minutos, durante a qual iremos rodar os códigos do trabalho, sobre:
  - Significância de instruções e blocos de código do trabalho,
  - Descrição e interpretação dos resultados.

#### 3. Data de entrega do trabalho

- O arquivo *i-python-notebook* da segunda parte do trabalho descrita nos Objetivos deverá ser entregue por email até o dia 27/11;
- A arguição referente a ambas as partes do trabalho será agendada entre os dias 27/11 e 5/12.

# Objetivos

## Entrega 2 – Mistura (binário)

Selecionar dois componentes

1. Programação da forma  $P(T,V,x)$  para misturas usando a equação de Peng e Robinson.

(Reid, Prausnitz & Poling, 1987 - pp 42, 43)

1. Programar a regra de combinação e mistura clássica  $a_{\text{mix}}(a, x)$  e  $b_{\text{mix}}(b, x)$ .

(Reid, Prausnitz & Poling, 1987 - pp 82)

1. Usar coeficientes de interação binária  $k_{ij} = 0$

2. Cálculo em sequência de  $P$  versus sequência de  $V$  para algumas  $T$  dadas (como na parte I) para para mistura com uma composição rica no componente mais pesado.

1. Desenhar isothermas no plano  $P$  versus  $V$  para essa composição

3. Repetir cálculos para mistura com uma composição rica no componente mais leve.

1. Desenhar isothermas no plano  $P$  versus  $V$  para essa composição

2. Programação da forma  $V(T,P,x)$

1. Adaptar a função de cálculo de volume da parte I para trabalhar com a equação de estado para mistura.

1. Definir coeficientes da forma cúbica da equação de estado e resolver usando método de solução de raiz de polinômios (numpy.roots)

2. Implementar lógica de classificação de raízes de volume (líquido, vapor, intermediária e não física)

2. Comparar calculos pontuais com as isothermas no gráfico  $P$  versus  $V$  (como na parte I)

3. Programação de coeficientes de fugacidade ( $\hat{\phi}_i$ ) na mistura

(Reid, Prausnitz & Poling, 1987, pp 144, 145)

1. Testar no caso limite:

1. verificar se coeficientes de fugacidade para raiz de volume de gás a baixa pressão são próximos à 1 - comportamento de gás ideal.

2. verificar se coeficientes de fugacidade quando a composição for  $[1,0]$  ou  $[0,1]$  dá igual a  $\exp\left(\frac{G^{\text{RES}}}{RT}\right)$  da primeira parte do trabalho para cada componente puro.

4. Programação de resolução da pressão de ponto de bolha

1. Implementar algoritmo de pressão de ponto de bolha  $(P, y) \leftarrow (T, x)$

(ver anexo: Sandler, 2017, pp 561, 562)

2. Testar se para composição próximo a puro (  $[1,0]$  e  $[0,1]$  o valor de ponto de bolha dá próximo a pressão de saturação de cada puro calculada da forma da parte I )
3. Cálculo em sequência de pressão de bolha ( $P^{\text{bolha}}$ ) e composição da fase vapor ( $y$ ) versus uma sequência de  $x$  para dada  $T$
5. Desenho do envelope de fases para uma mistura binária no plano  $P$  versus  $x_1$

(Smith, van Ness & Abbott, 2007, pp 260)

1. Desenhar  $P$  versus  $x_1$  para dado  $T$ : curva de ponto de bolha
2. Desenhar  $P$  versus  $y_1$  para dado  $T$ : curva de ponto de orvalho

## Referências recomendadas

1. [ANEXOS NA VERSÃO ONLINE]:  
([https://github.com/iurisegtovich/EQE359\\_Termodinamica\\_I](https://github.com/iurisegtovich/EQE359_Termodinamica_I))  
todas a páginas contendo equações e parâmetros importantes das referências indicadas.
2. Reid, R. C., Prausnitz, J. M. and Poling, B. E., 1987. The Properties of Gases and Liquids. 4th ed., McGraw-Hill. [ISBN: 0070517991, 9780070517998]  
(<https://books.google.com.br/books?id=AcRTAAAAMAAJ>)
3. Smith, J. M., van Ness, H. C. and Abbott, M. M., 2007. Introdução a termodinâmica da engenharia química. 7a ed., LTC. [ISBN: 8521615531, 9788521615538]  
(<https://books.google.com.br/books?id=TzeQPgAACAAJ>)
4. Topliss, R J., Dimitrelis D., and Prausnitz, J. M., 1988, “Computational Aspects of a Non-Cubic Equation of State for Phase-Equilibrium Calculations. Effect of Density-Dependent Mixing Rules.” Computers & Chemical Engineering 12 (5): 483–89. [doi:10.1016/0098-1354(88)85067-1]([http://dx.doi.org/10.1016/0098-1354\(88\)85067-1](http://dx.doi.org/10.1016/0098-1354(88)85067-1))
5. [numpy.roots ](<https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.roots.html>)
6. [scipy.optimize.bisect]  
(<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.optimize.bisect.html>)
7. Sandler S., 2006, Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics, 4th ed. John Wiley & Sons [ISSN: 0471661740, 9780471661740](<https://books.google.com.br/books?id=4MXDAgAAQBAJ>)

## Dúvidas

Laboratório ATOMS no endereço I-224,  
iurisegtovich@gmail.com

## Anexos

(Ver arquivo anexos.pdf)