

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

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

Parte I. 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 notebook da primeira parte do trabalho descrita nos Objetivos deverá ser entregue por email até o dia 02/11;
- A arguição referente a ambas as partes do trabalho será agendada entre os dias 27/11 e 5/12.

# Objetivos

## Entrega 1 - Substância pura

Selecionar uma substância pura

1. Programar a forma  $P(T,V)$  da equação de Peng e Robinson (Reid, Prausnitz & Poling, 1987 - pp 42, 43)
  1. Buscar parâmetros de componente puro (Smith, van Ness & Abbott, 2007, pp 507, 508, 509)
  2. Cálculo em sequência de  $P$  versus sequência de  $V$  para dados  $T$  igual, abaixo e acima da temperatura crítica.
  3. Desenhar isotermas no plano  $P$  versus  $V$
2. Programar a forma  $V(P,T)$  da equação de estado usando método de solução de raiz de polinômios (numpy.roots)
  1. Implementar lógica de classificação de raízes de volume (líquido, vapor, intermediária e não física)
  2. Comparar cálculos pontuais com as isotermas já desenhadas
3. Programação de pressão limite superior e inferior para faixa de busca do cálculo de pressão de saturação (baseado em Topliss, Dimitrelis & Prausnitz, 1988)
  1. Comparar cálculos pontuais com as isotermas
4. Programação de energia de Gibbs residual (Reid, Prausnitz & Poling, 1987, pp 102)
  1. Cálculo em sequência de  $G\{RES,L\}$  e sequência  $G\{RES,V\}$  versus sequência  $P$  para dado  $T$ .
  2. Desenhar  $G\{RES,L\}$  e  $G\{RES,V\}$  versus  $P$  para dado  $T$  e verificar existência de solução para o critério de equilíbrio de fases (igualdade de potencial químico para o componente entre fase líquida e vapor) na temperatura dada.
5. Programação de resolução da pressão de saturação usando método de bisseção (scipy.optimize.bisect)
  1. Cálculo em sequência de pressão de saturação ( $P\{SAT\}$ ) versus sequência de  $T$
  2. Desenhar  $P\{SAT\}$  versus  $T$  (Smith, van ness, Abbott, 2007, pp 48 – parte líquido-vapor)
  3. Programar correlação de Antoine e comparar, no gráfico, os resultados da correlação com os resultados da equação de estado (Smith, van ness, Abbott, 2007, pp 510)
6. Geração do envelope de fases no plano  $P$  versus  $V$  (Smith, van Ness & Abbott, 2007, pp 67)
  1. Cálculo em sequência de volumes de líquido e volumes de vapor para cada par  $(T,P)$  na curva de  $P\{SAT\}$

2. Desenhar envelope de fases no diagrama P versus V (curva P{SAT} vs V{L} e curva P{SAT} vs V{V}) (Smith van Ness Abbott, 2007, pp 67)
3. desenhar algumas isotermas no mesmo gráfico (curva P(T,V) vs V)
7. Geração dos envelope de fases nos planos P versus H (Smith, van Ness & Abbott, 2007, pp 168 – parte líquido-vapor)
  1. implementar expressão para entalpia residual
  2. implementar cálculo de  $\int C_p dT$  de gás ideal (Smith van ness abbott 2007, pp 119, 635)
  3. implementar cálculo de H de gás ideal em relação a uma temperatura de referência T0
  4. implementar cálculo de H de gás e líquido real em relação a essa temperatura de referência T0
  5. Desenhar envelope de fases no diagrama P versus H (curva P{SAT} vs Hreal{L} e curva P{SAT} vs Hreal{V})
    1. Cálculo em sequência de entalpia real de líquido e de vapor em relação a essa temperatura de referência T0 para cada par (T,P) ao longo da curva de P{SAT}
  6. Calcular e desenhar algumas isotermas no diagrama P versus H
    1. Usar a mesma sequência de volumes utilizada para isotermas no gráfico P vs V, para dada temperatura: para cada volume: calcular pressão, e daí calcular entalpia residual, de gas ideal e real.
    2. Desenhar curva resultados P versus resultados H
8. Geração dos envelope de fases nos planos T versus S (Smith, van Ness & Abbott, 2007, pp 168 – parte líquido-vapor)
  1. implementar expressão para entropia residual
  2. Implementar cálculo de  $\int \frac{C_p}{T} dT$  de gás ideal (Smith van ness abbott 2007, pp 119, 635)
  3. Calcular S de gás ideal em relação a uma temperatura de referência T0
  4. Calcular S de gás e líquido real em relação a essa temperatura de referência T0
  5. Desenhar envelope de fases no diagrama P versus S (curva P{SAT} vs Sreal{L} e curva P{SAT} vs Sreal{V})
    1. Cálculo em sequência de entropia real de líquido e de vapor em relação a essa temperatura de referência T0 para cada par (T,P) ao longo da curva de P{SAT}
  6. Calcular e desenhar algumas isóbaras
    1. Implementar cálculo de T dado P e V para van der waals (analítico)
    2. Implementar cálculo de T para dado P e V pela equação de estado: Implementar solução utilizando o método numérico (scipy.optimize.fsolve) e usando a solução de van der waals como estimativa inicial.

3. Usar a mesma sequência de volumes utilizada para isotermas no gráfico P vs V, para dada pressão: para cada volume: calcular temperatura, e daí calcular entropia residual, de gas ideal e real.
4. Desenhar curva resultados T versus resultados S

## 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. [scipy.optimize.fsolve]  
(<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.optimize.fsolve.html>)
8. 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](mailto:iurisegtovich@gmail.com)

## Anexos

(Ver arquivo anexos.pdf)