

Manual de uso Calculadora de Calor Específico

Desenvolvedores:

Carolina de Souza Soares
Julia Linhares Thees
Larissa Comuni Coelho
Pedro Antonio Rodrigues Garcez
Vinicius Afonso Piunti
Ryan Robert Lins Gomes

Docente:

Luiz Tadeu Fernandes Eleno

Disciplina:

LOM 3260 - Computação Científica em Python

1.0 Introdução

O presente programa foi desenvolvido com o intuito de calcular o calor específico de cada material em um intervalo de temperatura informado pelo usuário através da Função de Debye e, a partir desses valores, plotar um gráfico do calor específico pela temperatura.

A temperatura de Debye é uma característica importante do material que indica a temperatura em que os fônons tem maior frequência, a partir desta, os fônons não conseguem acessar mais modos de vibração sem alterar a sua estrutura.

2.0 Metodologia

2.1 O Calor Específico

O calor específico é a quantidade de calor fornecida ou perdida pela variação da temperatura, tal que se trata de uma propriedade intensiva intrínseca ao material.

Debye propôs um modelo simples para a descrição da capacidade calorífica (que é o calor específico em relação a massa de um sólido) dos sólidos. Considerando os átomos da rede cristalina formados por sistemas massa-mola acoplados entre si, devido às vibrações dos átomos. E, também, o meio isotrópico, contínuo, elástico e de volume V. As vibrações consideradas por ele são aquelas de baixa frequência e denominadas de fônons. Que por sua vez são graus de liberdade que são excitados termicamente.

Com isso, foi formulado a seguinte função de Debye:

$$D(x) = \frac{9}{x^3} \int_0^x \frac{u^4 e^u}{(e^u - 1)^2} du$$

Onde x é dado pela relação entre a temperatura de Debye (Θ_D) para cada material e a temperatura (T) em que o material é submetido, relação tal qual é dada pela divisão de Θ_D por T. Assim, o calor específico de acordo com o modelo de Debye foi escrito como:

$$C_v(T) = RD \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)$$

Onde R é a constante universal dos gases.

2.2 Base de dados

A calculadora de Calor Específico funciona através de uma base de dados, aliado a um código que calcula a função de Debye no intervalo de temperatura desejado e finalmente um programa que faz a interface gráfica para o material.

Na base de dados ficam todas as informações necessárias para o cálculo, o material e a sua temperatura de Debye, esse arquivo Excel é posteriormente importado para o arquivo principal através da função Pandas e transformado em um dicionário, como mostra a figura 1.

Figura 1: dicionário de temperaturas e materiais.

```
# -- Criando um dicionário com os valores das tabelas
df = pd.read_csv('debye - Pagina1.csv')
lista_material = df['material'].tolist()
lista_temperatura = df['temperatura de debye [K]'].tolist()
dicionario = dict(zip(lista_material, lista_temperatura))
# --
```

Fonte: Autores.

2.3 Função Debye

A função de Debye é dada pela equação abaixo, onde x é dado pela divisão da temperatura de Debye pela temperatura (Θ_D/T) e u é apenas uma variável de integração.

$$D(x) = \frac{9}{x^3} \int_0^x \frac{u^4 e^u}{(e^u - 1)^2} du$$

No código, essa função foi implementada como mostrado na Figura 2. É definido primeiramente a função I_D que retorna o integrando, e depois, na função *integral*, que usando o módulo do scipy quad, que retorna o valor da integral e seu respectivo erro. Como o erro não é relevante para o cálculo da função, o resultado da integral é separado e a função definida retorna apenas o valor da integral.

Figura 2: Integral de Debye.

```
def I_D(self, u):
    expu = numpy.exp(u)
    return u ** 4 * expu / (expu - 1) ** 2

def integral(self, x):
    # integral using scipy.optimize method quad()
    I, err = scipy.integrate.quad(self.I_D, 0, x)
    # I = scipy.integrate.quad(self.I_D, 0, x)
    return I
```

Fonte: Autores.

A Figura 3 mostra a função de Debye completa, já implementada a segunda parte da função fora da integral.

Figura 3: Função de Debye completa.

```
def D(self, x):
    # numpy.vectorize() allows the use of non-scalar arguments, such as arrays
    I_vec = numpy.vectorize(self.integral)
    I = I_vec(x)
    return 9 / x ** 3 * I
```

Fonte: Autores.

Por fim, resta calcular o calor específico. A equação abaixo a representação do calor específico e a Figura 4 a sua implementação em Python.

$$C_v(T) = RD \left(\frac{\theta_D}{T} \right)$$

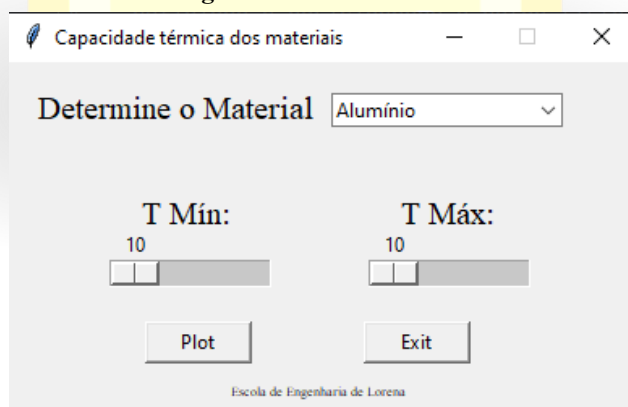
Figura 4: calor específico no Python.

```
def SpecificHeat(self, T):
    x = self.TD / T
    return R * self.D(x)
```

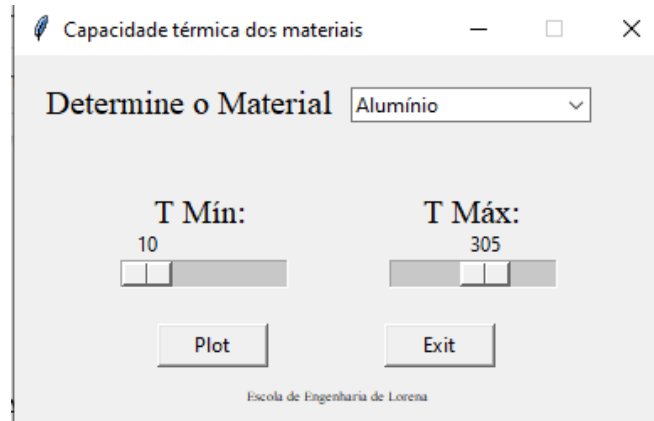
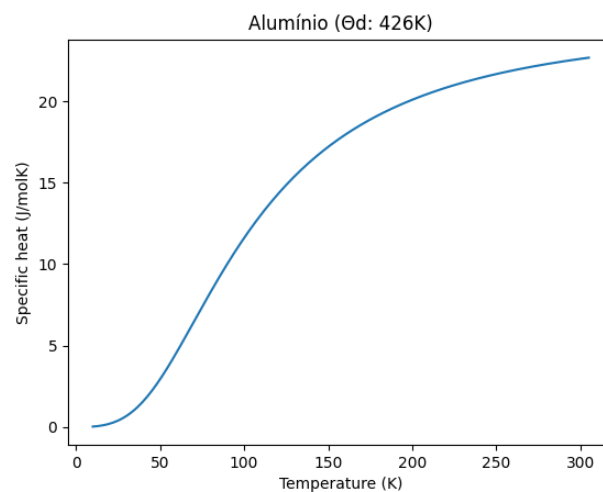
Fonte: Autores.

2.4 Interface Gráfica

Ao rodar o programa, o usuário é apresentado à uma janela (indicada na Figura 5) onde é solicitado que seja selecionado o material, dentro das opções correspondentes no banco de dados e as temperaturas máximas e mínimas. Preenchidos os seguintes requisitos, o usuário pode clicar no botão Plot e uma nova janela será aberta com o gráfico do calor específico pela temperatura.

Figura 5: Janela interativa.**Fonte:** Autores.

A Figura 6 mostra o exemplo do Alumínio com o intervalo de temperatura entre 20 e 300 K, e a Figura 7 o gráfico gerado através das informações fornecidas.

Figura 6: Exemplo do alumínio.**Fonte:** Autores.**Figura 7:** gráfico calor específico pela temperatura.**Fonte:** Autores.

2.5 Debug

A fim de evitar erros nas informações fornecidas pelo usuário, foram tomadas algumas medidas, tais quais:

1. Uso da caixa com os materiais disponíveis, ao invés de apenas um input pedindo o nome do material;
2. Uso do slider para selecionar a temperatura máxima e mínima;
3. Caixa de erro: caso o usuário selecione uma temperatura mínima maior que a máxima, uma caixa de erro aparece na tela informando que não é possível formar o gráfico dessa maneira e solicitando que o usuário mude a temperatura;
4. Caso o material desejado não esteja na base de dados, o usuário pode fechar a janela clicando no botão exit e no terminal onde está sendo executado o programa aparecerá uma série de inputs, perguntando o nome do material, a temperatura de Debye e por fim a temperatura mínima e máxima desejada. Dessa forma, mesmo que o material

não esteja incluído na base de dados, ainda é possível calcular o calor específico e fazer o gráfico.

3.0 Bibliotecas utilizadas

- Biblioteca Numpy - Para realização dos cálculos;
- Biblioteca Scipy - Para implementação da função no python;
- Biblioteca Pandas - Para importar o arquivo do excel com a base de dados;
- Biblioteca TKinter - Para criação da interface gráfica;
- Biblioteca Matplotlib - Para plotar o gráfico.

4.0 Referências Bibliográficas

SOUZA, Lázaro Luis de Lima. **Efeito de substituição atômica no calor específico de L-Arginina fosfatada monohidratada**. 2009. 94 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2009.

W3SCHOOLS. **Pandas Tutorial**. Disponível em:
<https://www.w3schools.com/python/pandas/default.asp>. Acesso em: 15 dez. 2022.

DESCONHECIDO. **Scipy.integrate.quad**. Disponível em:
<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.quad.html>.
Acesso em: 15 dez. 2022.