

Engenharia Química

ThermoSin – Um ambiente de planilha eletrônica para cálculos de propriedades e geração de diagramas termodinâmicos de substâncias puras

João Marcos Menegazzo de Lima - 10º módulo de Engenharia Química, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq.

Nathan Sombra Evangelista - Orientador EENG, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

O conhecimento de propriedades termodinâmicas – a exemplo do volume molar, fugacidade, densidade, pressão de saturação, propriedades residuais e propriedades energéticas - de substâncias puras é fundamental e de grande interesse para a resolução de problemas de Engenharia Química. Sabe-se que suas aplicações são diversas e muito importantes. Por exemplo, a nível industrial, estas propriedades são requeridas para o dimensionamento de reatores, de sistemas de refrigeração, de equipamentos de separação entre outros. Considerando que a medição experimental das propriedades supracitadas em diversas condições de pressão e temperatura é impraticável do ponto de vista técnico-econômico-temporal, é necessário recorrer a modelos termodinâmicos capazes de estimá-las, por exemplo, as equações de estado cúbicas. Com base no exposto, esse projeto tem como objetivo desenvolver um software de código aberto que permita ao usuário calcular propriedades termodinâmicas de compostos puros de interesse acadêmico e industrial por diferentes equações de estado cúbicas. O programa foi desenvolvido de forma a permitir ao usuário comparar rapidamente os resultados obtidos por diferentes equações de estado cúbicas, além do cálculo das propriedades, também é possível construir diagramas termodinâmicos das substâncias. A implementação computacional foi realizada na linguagem de programação VBA (do inglês Visual Basic for Applications), que está disponível em todos os softwares do pacote Office®, no aplicativo Excel, e é largamente utilizada no mercado de trabalho. Para validar os resultados produzidos pelo software, foram realizadas comparações com dados experimentais e com outros programas consolidados, como o Sindri e a biblioteca Thermodynamics and Phase Equilibrium component of Chemical Engineering Design Library (ChEDL) do python. Os resultados apontam que o software é confiável na estimativa das propriedades termodinâmicas, o que o torna uma ferramenta útil para estudos com equações de estado. O presente trabalho foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – Brasil, CNPq, através do edital PRP N°02/2022, de 19 de maio de 2022.

Palavras-Chave: Termodinâmica Química, Equação de Estado Cúbicas, VBA.

Instituição de Fomento: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – Brasil, CNPq

Link do pitch: <https://www.youtube.com/watch?v=2ArySBxcBw8>