

Cálculo de propriedades termodinâmicas de substâncias puras

Thômas Augusto Stempkowski Menegazzo, Adolfo Puime Pires

Equações de estado empíricas desenvolvidas a partir da energia livre de Helmholtz são uma das formas mais precisas de correlacionar as propriedades termodinâmicas de uma substância pura quando se dispõe de dados experimentais em quantidade e qualidade suficientes. Esses modelos possuem um formato independente da substância, variando apenas a quantidade e valores dos coeficientes da equação, tornando simples a criação de apenas um programa que realize o cálculo para diferentes substâncias com desvios muito pequenos em relação aos dados experimentais. Na simulação de reservatórios de petróleo, muitas vezes uma das fases do sistema é composta de uma substância pura, podendo neste caso, no lugar de uma equação de estado com um custo computacional elevado, serem usadas equações experimentais para o cálculo de propriedades físicas e suas derivadas, com as últimas sendo usadas em métodos de otimização. Neste trabalho foi programado em MATLAB o modelo destas equações de estado, e as diversas relações termodinâmicas entre a energia livre de Helmholtz, as outras propriedades termodinâmicas, e as suas derivadas. Até o presente momento foi codificada a equação experimental e as equações para cálculo das propriedades, restando as equações para as derivadas das propriedades. O programa está disponível para: água, dióxido de carbono, nitrogênio, metano, etano e butano.

Palavras-chave: Termodinâmica, Propriedades Termodinâmicas, Equações de Estado.

Instituição de fomento: CNPq