



## 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 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 diversas 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. Nesse 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 suas derivadas. Na primeira etapa desse trabalho havia sido programado em MATLAB o modelo destas equações de estado e as diversas relações termodinâmicas entre a energia livre de Helmholtz e as outras propriedades termodinâmicas. Continuando o trabalho feito no primeiro ano, foram programadas as derivadas tanto da energia livre de Helmholtz, como das propriedades termodinâmicas, além de serem desenvolvidas interfaces gráficas nas linguagens de programação MATLAB e C++, de forma a facilitar a utilização das equações. O programa está funcionando para: água, dióxido de carbono, nitrogênio, metano, etano, n-butano e isobutano.

Palavras-chave: Termodinâmica, Equação de estado.

Instituição de fomento: CNPq.