VIII ERMAC 8 º Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional

20-22 de Novembro de 2008
Universidade Federal do Rio Grande do Norte – Natal/RN

APLICAÇÃO DE SOFTWARE INTERATIVO PARA CÁLCULOS DAS PROPRIEDADES DE SISTEMAS QUÍMICOS BINÁRIOS NO EQUILÍBRIO LÍQUIDO/VAPOR – TPX – ELV 1.0

[1]Silva, J. N.; [2]Moura, J.P.; [3] Monteiro, G. S..; [4]Fidéles, T. B.; [5]França, K. B.

[1,2,3,5]Unidade Acadêmica de Engenharia Química – Programa de Pós Graduação em Eng. Química, Universidade Federal de Campina Grande – UFCG, Campus I – CEP: 58109-907 – Campina Grande – PB – Brasil
[4]Unidade Acadêmica de Engenharia de Materiais – Programa de Pós Graduação em Eng. De Materiais , Universidade Federal de Campina Grande – UFCG, Campus I – CEP: 58109-907 – Campina Grande – PB – Brasil
E-mail: jsolar07@gmail.com

RESUMO – O objetivo desse trabalho é desenvolver um *software* em Object Pascal, utilizando a ferramenta Delphi 6 Enterprise da Borland, com implementação de bancos de dados externos e procedimentos iterativos, para construção de diagramas de equilíbrio líquido/vapor para sistemas binários, bem como possibilitar a inserção dos tipos de espécies químicas e suas respectivas propriedades físicas para bases de cálculos. Os bancos de dados desenvolvidos nessa tecnologia podem ser empregados no desenvolvimento de outros aplicativos, constituindo uma grande vantagem. Os diagramas gerados possibilitaram a visualização das curvas de saturação de líquido e de vapor.

PALAVRAS-CHAVE: diagramas de equilíbrio líquido/vapor, lei de Raoult, lei de Henry

ABSTRACT – The objective of this work is to develop a software in Pascal Object, using the tool Delphi 6 Enterprise of the Borland, with implementation of external iterative procedure and data bases, for construction of diagrams of liquid balance vapor for binary systems, as well as making possible the insertion of the types of chemical species and its respective physical properties for taxable incomes. The data bases developed in this technology can be used in the development of other applicatory ones, constituting a great advantage. The generated diagrams make possible the visualization of the curves of vapor and liquid saturation.

KEYWORDS: diagrams of liquid balance vapor, law of Raoult, law of Henry.

1. INTRODUÇÃO

Equilíbrio é uma condição estática na qual não ocorrem variações das propriedades macroscópicas de um sistema com o tempo. Na prática industrial, as fases coexistentes mais comuns são o líquido e o vapor, embora sistemas líquido/liquido, vapor/sólido e liquido/sólido também sejam encontrados. Um sistema químico isolado, constituído de fases líquida e vapor em contado direto, após certo tempo, atinge um estado final no qual não há tendência para ocorrerem mudanças em seu interior. Assim é dito que o sistema esta em equilíbrio quando a temperatura, pressão e composição das fases atingem valores finais que permanecem fixos.

Estudos termodinâmicos são aplicados para o equilíbrio líquido/vapor (ELV), no intuito de encontrar, através de cálculo, as temperaturas, as pressões e as composições de fases em equilíbrio. Os dois modelos mais simples utilizados para descrever o comportamento de sistemas em equilíbrio líquido/vapor são as Leis de Raoult e a Lei de Henry (SMITH et al, 2000). Os mesmos são úteis para mostrar cálculos do ELV em sua forma mais simples, e também serve como um padrão para sistemas mais complexos.

A linguagem de programação Object Pascal, utilizando a ferramenta Delphi 6 Enterprise da Borland, com Bancos de dados externos, acessado dos serviços Borland Database Engenie (BDE), fornecem meios de desenvolvimento de software com finalidades científicas (SONNINO, 2001).

O presente trabalho tem por finalidade apresentar um programa computacional capaz de gerar diagramas de ELV, constituído de um banco de dados contendo as propriedades das substâncias e constantes para estimativas da pressão de vapor, utilizando a equação de Antoine e condições estabelecidas por correlações das leis de Raoult, Raoult Modificada e lei de Henry.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

O programa foi desenvolvido na linguagem de programação Object Pascal utilizando a ferramenta Delphi 6 Enterprise da Borland. A estrutura do banco de dados externo foi desenvolvida via acesso interno e aberto a modificações de dos parâmetros a serem utilizados nas aplicações de cálculos.

O procedimento de criação de banco de dados e interface do programa está descritos em bases teóricas na literatura (BORLAND SOFTWARE CORPORATION, 2002).

Utilizou-se um Diagrama de Entidade-Relacionamento (DER), criando as relações entre os dados de entrada e de saída. Foram inicialmente utilizados para tabelas construídas na base de dados Paradox, do Database Desktop, locais de memória possibilitando inserção das variáveis: nome da espécie química, fórmula química, massa molar, fator acêntrico, temperatura crítica, pressão crítica, volume critico molar, as constantes da equação de Antoine nas respectivas faixas de temperatura e o ponto normal de ebulição.

Na interface, foram introduzidas as entradas de dados para temperatura, pressão e as substâncias para o sistema desejado e a geração do diagrama de líquido/vapor. Na interface do diagrama, foram introduzidas entradas da composição da espécie desejada e as saídas das informações como ponto de bolha e orvalho à temperatura e pressão considerada.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A interface base e as janelas de entradas de dados para inserção de substâncias, com seus respectivos dados de entrada e de saída foram criadas com a finalidade de facilitar a interação entre interface e usuário. As janelas apresentam informações básicas como unidade de medida para cada grandeza e também opção de escolha do sistema de unidades. A Figura 01 mostra a interface de visualização dos resultados obtidos para o sistema etileno-água.

Os mesmos diagramas possibilitaram também estimar a composição das espécies na mistura.

O teste com o sistema acetonitrila(1)/nitrometano(2) a uma temperatura de 75 ºC e 70 kPa, permitiram a obtenção dos gráficos P vs. X_1 e T vs. X_1, respectivamente e a composição dos componentes definindo uma composição de um dos componentes, assim como descrito pelo Teorema de Duhem para sistemas sem reações de acordo com a literatura (SMITH et al, 2007).

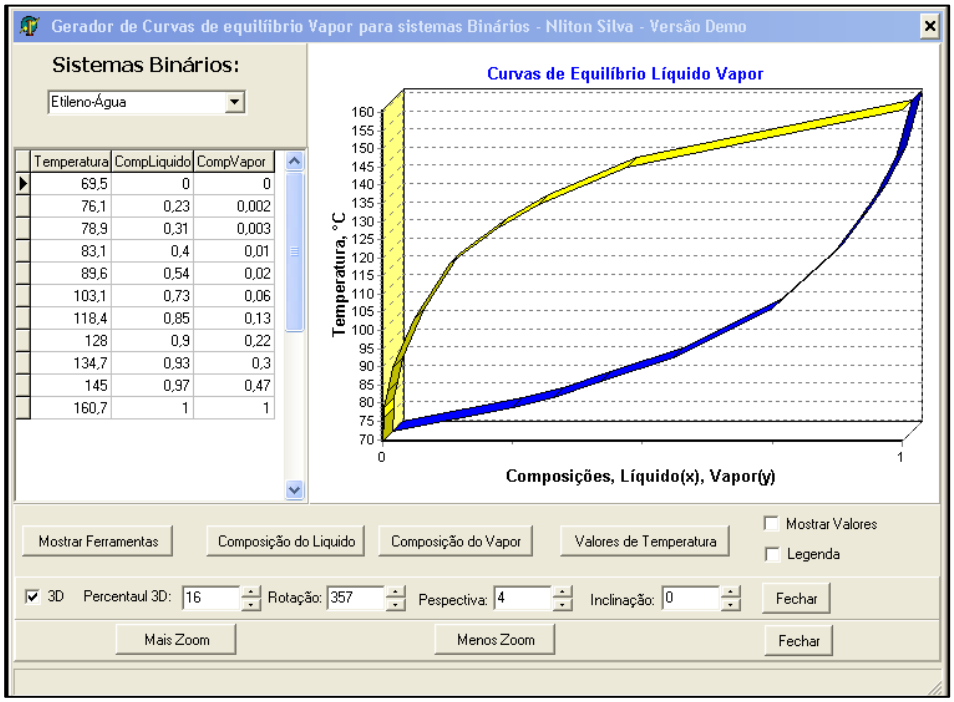

Figura 01 – Janela de resultados do diagrama ELV para o sistema etileno-água

Os diagramas Pressão (P) e Temperatura (T) versus composição (x/y) dos componentes obtidos, utilizando os sistemas químicos binários simulados e o modelo adequado ao tipo de sistema, possibilitaram a visualização do equilíbrio e os respectivos desvios da idealidade. Os valores para a composição das espécies de cada componente no sistema ELV foram obtidos de forma iterativa com convergência com média de 500 iterações.

4. CONCLUSÃO

O Software TPX – ELV 1.0 apresentou agilidade nos cálculos requeridos, não sendo observados problemas no processamento. Para utilizá-lo em outros computadores, foi necessário instalar o pacote utilitário BDE Administrador.

Os valores obtidos para as substâncias testadas foram de ótima aproximação comparando com os valores experimentais disponíveis na literatura.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

SONNINO, Bruno. *Desenvolvendo Aplicações com Delphi 6.* São Paulo: Makron Books, 2001. 565p.

SMITH, J. M., VAN NESS, H. C., ABBOTT, M. M., **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química /** Tradução: Eduardo M. Queiroz, Fernando L. P. Pessoa, 7ª edição, LTC editora, 2007.

BORLAND SOFTWARE CORPORATION. **Borland Delphi 6**. Scotts Valley, CA, 1994-2002. Ferramenta de desenvolvimento.