

---

# VRTherm

## Manual do Usuário

---



[www.vrtech.com.br](http://www.vrtech.com.br)

---

20 de dezembro de 2005

---

# Sumário

---

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Simulação	2
1.2	Modelagem Rigorosa	2
1.3	O que é o VRTherm	2
1.4	Aplicações	3
1.5	Banco de Dados	3
1.6	Instalação	4
1.6.1	Controle de Uso	4
1.6.2	Instalando VRTherm no Windows	5
1.6.3	Instalando o VRTherm no Linux	5
1.7	Resolução de Problemas de Instalação	7
<b>2</b>	<b>Modelos Termodinâmicos</b>	<b>9</b>
2.1	Gás Ideal	10
2.2	van der Waals	10
2.3	Equações de Estado Cúbicas	10
2.3.1	Equação de Redlich-Kwong	11
2.3.2	Equação de Soave Redlich-Kwong	11
2.3.3	Equação de Peng-Robinson	11
2.3.4	Equação de Peng-Robinson e Soave Redlich-Kwong Assimétricas	12
2.4	Coefficiente de Atividade de Líquidos	13
2.4.1	Líquido Ideal	13
2.4.2	UNIFAC	13
2.5	Regras de Mistura	14
2.5.1	Regra de Mistura Clássica	14

2.6	Regras de combinação . . . . .	14
2.6.1	Regra de Combinação Clássica (Lorentz Berthelot) . . . . .	14
2.6.2	Regra de Combinação Conformal . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Propriedades dos Fluidos</b>	<b>16</b>
3.1	Propriedades de Componentes Puros . . . . .	17
3.2	Propriedades de Misturas Líquidas e Gasosas . . . . .	17
3.3	Cálculos de Equilíbrio de Fases . . . . .	17
<b>4</b>	<b>Interface Gráfica</b>	<b>19</b>
4.1	Introdução . . . . .	20
<b>5</b>	<b>Excel Addin</b>	<b>22</b>
5.1	Instalação . . . . .	23
5.1.1	Desinstalação . . . . .	23
5.2	Utilização . . . . .	24
5.2.1	Funções de Configuração . . . . .	24
5.2.2	Cálculos de Propriedades de uma Fase . . . . .	25
5.2.3	Propriedades de Substâncias Puras . . . . .	26
5.2.4	Cálculos de <i>flash</i> e Ponto de Bolha . . . . .	27
5.3	Exemplos . . . . .	27
<b>6</b>	<b>MatLab Toolbox</b>	<b>31</b>
6.1	Introdução . . . . .	32
6.1.1	Instalação . . . . .	32
6.1.2	Desinstalação . . . . .	33
6.2	Utilização . . . . .	33
6.2.1	Funções de Configuração . . . . .	34
6.2.2	Propriedades de Substâncias Puras . . . . .	35
6.2.3	Cálculos de Propriedades de uma Fase . . . . .	35
6.2.4	Ajuda no MatLab . . . . .	36
6.2.5	Exemplos . . . . .	36

<b>7 EMSO Plug-In</b>	<b>37</b>
7.1 Usando o VRTherm . . . . .	38
7.1.1 Modelos . . . . .	40
7.1.2 Propriedades . . . . .	40
<b>8 Cálculos de Propriedades Termodinâmicas</b>	<b>43</b>
8.1 Ponto de Referência . . . . .	44
8.2 Entalpia . . . . .	44
8.3 Entropia . . . . .	44
8.4 Calor Específico $C_p$ . . . . .	44

---

## Direitos Autorais

---

Os direitos autorais deste programa/rotina de computador e documentos associados são propriedade da VRTech Tecnologias Industriais Ltda e são fornecidos mediante um termo de licença que contém restrições de uso.

É proibida a duplicação, distribuição, cópia ou reprodução deste programa/rotina de computador e documentos associados, no todo ou em parte, sob quaisquer formas ou por quaisquer meios (eletrônico, gravação, fotocópia, distribuição na Web e outros), sem permissão expressa da VRTech Tecnologias Industriais Ltda.

(C) 2004-2005 VRTech Tecnologias Industriais Ltda.  
Todos os direitos reservados.

---

VRTherm é uma marca registrada da VRTech Tecnologias Industriais Ltda. Quaisquer outras marcas, registradas ou não, mencionadas nesta documentação são de propriedade dos seus respectivos titulares. Todos direitos reservados.

---

## Suporte e Contato

---

Para a obtenção de suporte entre em contato com a VRTech:

- Na internet [www.vrtech.com.br](http://www.vrtech.com.br)
- Através de correio eletrônico [suporte@vrtech.com.br](mailto:suporte@vrtech.com.br)

---

## Símbolos e Convenções

---

Neste documento a seguinte notação é considerada:

**Trecho de código:** um trecho de código ou mensagens de saída:

```
1 FlowSheet Separation  
2   PARAMETERS  
3   PP as CalcObject(File = "vrtherm");  
4 end
```

---

**Comandos ou códigos:** comandos, nomes de arquivos ou códigos inseridos no texto são enfatizados como comando, arquivo e códigos.



**Nota:** uma nota, por exemplo: o VRTherm pode utilizar modelos diferentes para a fase líquida e vapor.

---



**Atenção:** uma mensagem de advertência, por exemplo: o modelo IdealGas não pode ser utilizado para descrever uma fase líquida.

---



**Dica:** uma dica para o usuário, por exemplo: para misturas com gases dissolvidos utilize modelos assimétricos.

---



**Linux:** uma nota específica para plataformas POSIX (Linux e Unix), por exemplo: o VRTherm está disponível para Linux e pode estar disponível para outras plataformas Unix se desejado.

---



**Windows:** uma nota específica para plataformas Win32 (Windows 95 e superiores, Windows NT 4 e superiores), por exemplo: o windows não diferencia letras maiúsculas de minúsculas nos nomes dos arquivos.

---

---

## Atualizações do VRTherm

---

- **12 maio 2005 - versão 1.0.0**
- **23 maio 2005 - versão 1.0.2**
  - correção de cálculos de  $C_p$
- **15 junho 2005 - versão 1.0.3**
  - correção de incompatibilidades do VRTherm com algumas versões de Windows
- **23 junho 2005 versão 1.0.4**
  - inclusão de cálculos de flash de correntes e fração vaporizada de misturas
- **27 julho 2005 versão 1.0.5**
  - ampliação do banco de dados (cálculo de equilíbrio para +1000 componentes)
  - cálculo de *flash* e propriedades no próprio compviewer
  - correção no sistema de controle para alguns tipos de rede
- **31 outubro 2005 versão 1.2.0**
  - sistema para gravar e carregar misturas na interface gráfica do VRTherm
  - Adição do modelo UNIFAC para líquidos
  - integração com o Excel: VRTherm Add-in
  - integração com o MatLab: VRTherm Toolbox
  - chave eletrônica ideal para computadores portáteis (chave azul)
- **20 dezembro 2005 versão 1.2.2**
  - adição de unidades de medida para a temperatura e pressão do *flash*
  - correção na instalação dos drivers da chave azul
  - correção nos cálculos de densidade
  - correção da mensagem de erro quando não há dados suficientes no banco

---

# 1 Introdução

---

Neste capítulo o VRTherm e suas principais características são apresentadas. No final do capítulo podem ser encontradas as instruções para a instalação do VRTherm.

## Sumário

---

<b>1.1 Simulação</b> . . . . .	<b>2</b>
<b>1.2 Modelagem Rigorosa</b> . . . . .	<b>2</b>
<b>1.3 O que é o VRTherm</b> . . . . .	<b>2</b>
<b>1.4 Aplicações</b> . . . . .	<b>3</b>
<b>1.5 Banco de Dados</b> . . . . .	<b>3</b>
<b>1.6 Instalação</b> . . . . .	<b>4</b>
1.6.1 Controle de Uso . . . . .	4
1.6.2 Instalando VRTherm no Windows . . . . .	5
1.6.3 Instalando o VRTherm no Linux . . . . .	5
<b>1.7 Resolução de Problemas de Instalação</b> . . . . .	<b>7</b>

---

## 1.1 Simulação

A simulação de processos é uma ferramenta estratégica para o desenvolvimento, pois possibilita desde a validação de projetos, sua operabilidade prática e treinamento de operadores até aumentos de produção, redução de custos ou da geração de resíduos. Sendo assim, a simulação de processos é de suma importância tanto para o setor industrial quanto para o desenvolvimento de estudos no setor acadêmico.

## 1.2 Modelagem Rigorosa

A modelagem rigorosa consiste na construção de modelos com base nas equações que regem os fenômenos físicos e químicos dos processos. Tal modelagem é muito importante pois consegue atingir resultados mais realistas e melhores extrapolações. Mas, para que tais resultados sejam alcançados é necessário o conhecimento de propriedades termodinâmicas e propriedades físicas das substâncias envolvidas e de suas misturas. Estes dados, na maioria das vezes, são de difícil obtenção e este processo de coleta de dados é extremamente propenso a erros.

## 1.3 O que é o VRTherm

O VRTherm é um software capaz de prever propriedades termodinâmicas e propriedades físicas de misturas complexas permitindo a simulação de equipamentos de forma muito mais rápida e elegante.

O VRTherm não é um simulador de processos, mas sim uma biblioteca para ser utilizada em *softwares* comerciais ou desenvolvidos para aplicações específicas. Os seguintes *softwares* constituem o VRTherm:

- **VRTherm**: interface gráfica para procura de componentes e cálculos de propriedades ([Capítulo 4](#))
- **VRTherm Add-in**: Add-in que torna o VRTherm disponível dentro do Microsoft Excel ([Capítulo 5](#))
- **VRTherm Toolbox**: Toolbox que torna o VRTherm disponível dentro do MatLab ([Capítulo 6](#))
- **EMSO plug-in**: complemento que torna o VRTherm disponível dentro do simulador de processos EMSO ([Capítulo 7](#))

## 1.4 Aplicações

Com as ferramentas constituintes do VRTherm, apresentadas na seção anterior, pode-se modelar com sucesso os mais variados tipos de sistemas:

- Sistemas de separação de misturas complexas
- Colunas de destilação
- CSTR, PFR e outros reatores não ideais
- Sistemas de troca térmica como trocadores de calor
- e muitos outros sistemas presentes em plantas industriais

O VRTherm contempla todas as propriedades necessárias para a simulação:

- Equilíbrio de fases
- Balanços de energia
- Calores de reação
- Volume ou Massa específica de líquidos
- Viscosidade e condutividade térmica de materiais e outros.

A lista completa das propriedades incluídas no VRTherm e como usá-las é apresentada no [Capítulo 3](#).

## 1.5 Banco de Dados

Para cálculos de equilíbrio estão disponíveis mais de 1000 componentes

Para a predição das propriedades de misturas o VRTherm conta com um banco de dados com mais de 1900 componentes puros que contempla as principais substâncias envolvidas em processos químicos e petroquímicos. Os componentes disponíveis podem ser visualizados utilizando a interface gráfica do VRTherm, mais detalhes no [Capítulo 4](#).

O cálculo das propriedades é baseado em modelos associados de equações de estado e correlações empíricas. As equações de estado e equações para cálculos de coeficientes de atividade disponíveis são:

- Gás ideal
- Líquido ideal
- van der Waals
- Redlich-Kwong
- Soave-Redlich-Kwong

- Peng-Robinson
- Assymetric-PR
- Assymetric-RK
- UNIFAC(Dortmund)

Além de outros modelos que estão em fase de implementação. Um maior detalhamento dos modelos contidos no VRTherm é encontrado no [Capítulo 2](#).

## 1.6 Instalação

VRTherm está disponível tanto para a plataformas Windows (Windows 95 e superiores, Windows NT, 2000, 2003 e XP) quanto POSIX (Linux e Unix). As instruções para instalação nestas plataformas podem encontradas na [Subseção 1.6.2](#) e [Subseção 1.6.3](#), respectivamente.



**Nota:** Instruções específicas para a instalação do VRTherm para Excel e Matlab são apresentadas no [Capítulo 5](#) e no [Capítulo 6](#), respectivamente

### 1.6.1 Controle de Uso

USB é a sigla para Universal Serial Bus.

Os produtos da VRTech são distribuídos com um sistema de controle de uso via chave eletrônica USB. Estão disponíveis dois tipos de chave:

- **vermelha:** para instalações em ambientes de rede
- **azul:** para computadores pessoais (ideal para portáteis)

Para o uso em rede é necessária apenas **uma** chave vermelha conectada a um computador da rede, esta máquina será o **servidor** de licenças.



**Atenção:** Antes de desconectar a chave vermelha da máquina servidor de licenças o serviço deve ser parado. Caso contrário os dados gravados na chave eletrônica podem ser corrompidos inutilizando a chave.

O servidor permitirá o uso concorrente do software, através da rede, para outras máquinas - os **clientes**.



**Nota:** O sistema de controle de uso em rede funciona em redes heterogêneas, ou seja, o servidor pode estar rodando Linux e os clientes Windows e vice-versa.

### 1.6.2 Instalando VRTherm no Windows

O VRTherm é compatível com Windows 95, 98, Me e XP, além de NT 4, 2000 e 2003. Para instalar o VRTherm no Windows basta executar o programa de instalação

```
vrtherm-win32-<VERSION>.exe
```

e seguir os passos na tela.



**Atenção:** Na máquina onde será conectada a chave vermelha selecione a opção **Instalação para Servidor de Licenças**, para as demais máquinas da rede ou para a utilização da chave azul selecione a opção padrão.

Outra opção de instalação é instalar o software em um diretório comum à rede o qual poderá ser acessado diretamente por todas as outras máquinas sem a necessidade da instalação nas máquinas clientes.



**Nota:** Instruções específicas para a instalação do VRTherm para Excel e Matlab são apresentadas no [Capítulo 5](#) e no [Capítulo 6](#), respectivamente

O programa de instalação detectará automaticamente o diretório onde está instalado o EMSO e fará automaticamente a adição do seu *plugin* no diretório *interface* do EMSO. Mais detalhes sobre a utilização do VRTherm no EMSO podem ser encontrados em [Capítulo 7](#).

Se por algum motivo o EMSO não for detectado, para utilizar o VRTherm dentro do EMSO, basta adicionar o diretório onde foi instalado o VRTherm à lista de diretórios DLL's do EMSO. Isto pode ser feito através do seguinte menu do EMSO:

```
Tools→Options
```

Outra opção para a utilização do VRTherm no EMSO é copiar diretamente os arquivos `vrpp.dll`, `NrClient.dll`, `RY32DLL.dll` e `vrtherm.db` instalados no diretório do VRTherm para a pasta *interface* do EMSO.

### 1.6.3 Instalando o VRTherm no Linux

POSIX é a sigla para os padrões desenvolvidos pelo IEEE, que especificam o Portable Operating System interface. O *IX* vem da base histórica do Unix.

O VRTherm é compatível com uma grande variedade de sistemas POSIX.

Para instalar o VRTherm é necessário descompactar o pacote

```
vrtherm-<PLATFORM>-<VERSION>.tar.gz
```

para o diretório `/usr/local/vrtherm`. Isto pode ser feito com os seguintes comandos:

---

```
$ su
# mkdir /usr/local/vrtherm
# cd /usr/local/vrtherm
# tar -xzvf vrtherm-<PLATFORM>-<VERSION>.tar.gz
# ln -sf /usr/local/vrtherm/vrtherm /usr/local/bin/
```

---

Se o EMSO está instalado no seu ponto de instalação padrão, os seguintes comandos podem ser utilizados para adicionar o VRTherm ao EMSO:

---

```
$ su
# ln -sf /usr/local/vrtherm/libvrpp.so /usr/local/emso/interface/
```

---



**Nota:** Pacotes de instalação do VRTherm podem ser produzidos para outras plataformas Unix se desejado.

Nas seções abaixo seguem os passos **adicionais** específicos para a instalação como cliente e servidor de licenças.

### Instalação em Máquinas Clientes

Para as máquinas clientes é apenas necessário copiar o arquivo `CliCfg.ini` que se encontra no diretório de instalação do VRTherm para o diretório `/etc/rynet`. Isto pode ser feito com os seguintes comandos:

---

```
$ su
# mkdir /etc/rynet
# cp /usr/local/vrtherm/CliCfg.ini /etc/rynet
```

---

### Instalação no Servidor

O servidor de licenças irá fornecer acesso ao software através da rede, isto é feito por um serviço que deve ser instalado na máquina servidor. Se o VRTherm foi instalado em seu local padrão, a instalação é feita com os seguintes comandos:

---

```
$ su
# cd /usr/local/vrtherm/server
# make
# make install
# modprobe rockey
```

---

Os comandos acima instalarão o serviço e drivers necessários no servidor.



**Atenção:** Para a instalação dos drivers da chave USB no servidor é necessária a presença do fonte do Linux kernel.

---

## 1.7 Resolução de Problemas de Instalação

Nesta seção serão apresentados algumas dicas para solucionar possíveis problemas de instalação do VRTherm relativos à chave de controle em ambientes de rede. Caso algum problema persista entre em contato com a VRTech pelo mail [suporte@vrtech.com.br](mailto:suporte@vrtech.com.br).

Siga as seguintes instruções na ordem que são apresentadas:

- Assegure-se que de a rede onde o VRTherm será instalado está ok
- Verifique se o programa NrSrv está rodando na máquina servidor e o seguinte ícone pode ser visualizado na mesma



Figura 1.1: Ícone NrSrv.

- Verifique se a chave de controle pode ser acessada da própria máquina servidor. Isto pode ser feito rodando a interface gráfica do VRTherm
- Certifique-se de que o servidor de licenças pode ser visto pelas máquinas clientes rodando o comando *ping*. Para maiores dúvidas consulte seu gerente de rede.
- Tente rodar o programa NrMon (que acompanha o VRTherm) a partir da máquina cliente e veja se o servidor aparece conforme a [Figura 1.2](#)
- Verifique se há algum firewall habilitado. Certifique-se de que a porta 3152 está liberada.
- Verifique com o responsável pela rede se a máquina cliente e servidor fazem parte da mesma sub-rede (uma vez que o cliente faz um *broadcast* para encontrar o servidor). Se as máquinas não fazem parte da mesma sub-rede, é necessário alterar o arquivo `cliCfg.ini` na máquina **cliente**:
  - Altere a linha `SearchFlag=0` para `SearchFlag=1`
  - Altere a linha `SearchList=10.10.10.1` indicando o IP da máquina servidor

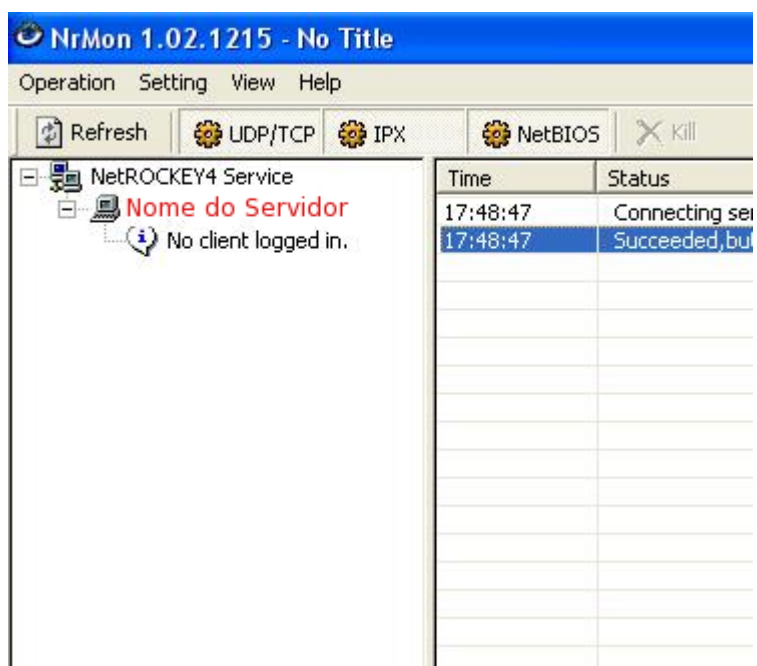


Figura 1.2: Programa NrMon.

Se o *plug-in* para o EMSO foi instalado, é necessário alterar da mesma forma o arquivo `Clicfg.ini` que é instalado na pasta `interface` do EMSO.

---

## 2 Modelos Termodinâmicos

---

Neste capítulo são apresentados os modelos utilizados para predição do comportamento de gases e líquidos puros e de suas misturas.

### Sumário

---

<b>2.1 Gás Ideal</b> . . . . .	<b>10</b>
<b>2.2 van der Waals</b> . . . . .	<b>10</b>
<b>2.3 Equações de Estado Cúbicas</b> . . . . .	<b>10</b>
2.3.1 Equação de Redlich-Kwong . . . . .	11
2.3.2 Equação de Soave Redlich-Kwong . . . . .	11
2.3.3 Equação de Peng-Robinson . . . . .	11
2.3.4 Equação de Peng-Robinson e Soave Redlich-Kwong Assimétricas . . . . .	12
<b>2.4 Coeficiente de Atividade de Líquidos</b> . . . . .	<b>13</b>
2.4.1 Líquido Ideal . . . . .	13
2.4.2 UNIFAC . . . . .	13
<b>2.5 Regras de Mistura</b> . . . . .	<b>14</b>
2.5.1 Regra de Mistura Clássica . . . . .	14
<b>2.6 Regras de combinação</b> . . . . .	<b>14</b>
2.6.1 Regra de Combinação Clássica (Lorentz Berthelot) . . . . .	14
2.6.2 Regra de Combinação Conformal . . . . .	15

---

## 2.1 Gás Ideal

A equação de Gás Ideal é o modelo mais simples para a predição do comportamento da fase gasosa em baixas pressões. Considera que:

$$P = \frac{RT}{v} \quad (2.1)$$

este modelo apresentará bons resultados apenas para condições de baixas pressões.

## 2.2 van der Waals

A equação de estado de van der Waals tem a seguinte forma:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2} \quad (2.2)$$

onde

$$a = \frac{27R^2T_c^2}{64P_c} \quad (2.3)$$

$$b = \frac{RT_c}{8P_c} \quad (2.4)$$

## 2.3 Equações de Estado Cúbicas

As equações cúbicas de estado são equações capazes de prever o comportamento tanto de gases quanto de líquidos. As equações de estado cúbicas são expressas pela seguinte forma genérica:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2 + ubv + wb^2} \quad (2.5)$$

com uma forma equivalente expressa em termos do fator de compressibilidade  $Z$ :

$$Z^3 - (1 + B - uB)Z^2 + (A + wB^2 - uB - uB^2)Z - AB - wB^2 - wB^3 = 0 \quad (2.6)$$

onde

$$A = \frac{aP}{R^2T^2} \quad (2.7)$$

e

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (2.8)$$

As equações de estado cúbicas mais conhecidas são Peng-Robinson, Redlich-Kwong e Soave Redlich-Kwong. Cada uma dessas equações tem diferentes valores para os parâmetros  $u$  e  $w$  assim como a diferentes definições de  $a$  e  $b$ .

### 2.3.1 Equação de Redlich-Kwong

A equação de Redlich-Kwong tem a seguinte forma:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{T^{1/2}v(v+b)} \quad (2.9)$$

onde

$$a = \frac{0,42748R^2T_c^{2,5}}{P_c} \quad (2.10)$$

e

$$b = \frac{0,08664RT_c}{P_c} \quad (2.11)$$

### 2.3.2 Equação de Soave Redlich-Kwong

A equação de Soave Redlich-Kwong é expressa da seguinte maneira:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)} \quad (2.12)$$

onde

$$a = \frac{0,42748R^2T_c^2}{P_c} [1 + m(1 - \sqrt{T_r})]^2 \quad (2.13)$$

$$m = 0,48 + 1,574w - 0,176w^2 \quad (2.14)$$

e

$$b = \frac{0,08664RT_c}{P_c} \quad (2.15)$$

ou em função de Z:

$$Z^3 - Z^2 + Z(A - B^2 - B) - AB = 0 \quad (2.16)$$

com

$$A = \frac{aP}{R^2T^2} \quad (2.17)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (2.18)$$

### 2.3.3 Equação de Peng-Robinson

A equação de Peng-Robinson tem o seguinte formato:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b) + b(v-b)} \quad (2.19)$$

onde

$$a = \frac{0,45724R^2T_c^2}{P_c} [1 + m(1 - \sqrt{T_r})]^2 \quad (2.20)$$

$$m = 0,37464 + 1,54226w - 0,26992w^2 \quad (2.21)$$

$$b = \frac{0,0778RT_c}{P_c} \quad (2.22)$$

e pode ser escrita em termos de Z:

$$Z^3 + Z^2(B-1) + Z(A-3B^2-2B) + B^3 + B^2 - AB = 0 \quad (2.23)$$

$$A = \frac{aP}{R^2T^2} \quad (2.24)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (2.25)$$

### 2.3.4 Equação de Peng-Robinson e Soave Redlich-Kwong Assimétricas

Misturas assimétricas são misturas onde alguns componentes se encontram em uma temperatura maior que sua temperatura crítica, ou seja, estes componentes estão apenas dissolvidos na fase líquida

As equações de estado apresentadas anteriormente tendem a apresentar resultados pouco satisfatórios para misturas envolvendo gases leves. A equação de Peng-Robinson Assimétrica, assim como a equação de Soave Redlich-Kwong Assimétrica, é a mesma que a PR, e a SRK respectivamente, porém com a inclusão de parâmetros de interação para misturas assimétricas. Estão disponíveis parâmetros de interação específicos para misturas que contenham:

- $H_2$
- $O_2$
- $CO$
- $CH_2$
- $CH_4$
- $C_2H_6$

Na [Subseção 2.6.2](#) é apresentada a regra de combinação utilizada para o cálculo dos coeficientes especiais de interação destas equações.



**Atenção:** Embora os modelos apresentados nesta seção sejam específicos para misturas assimétricas, estes podem apresentar problemas quando aplicados a sistemas onde a pressão seja maior que 60 atm.

## 2.4 Coeficiente de Atividade de Líquidos

### 2.4.1 Líquido Ideal

O coeficiente de fugacidade de um líquido é calculado por:

$$\phi_i = \frac{P^{sat_i}}{P} \quad (2.26)$$

### 2.4.2 UNIFAC

O VRTherm apresenta uma implementação de UNIFAC modificado (Dortmund). O coeficiente de atividade do líquido é calculado como uma soma de uma parcela combinatorial e outra residual:

$$\ln\gamma_i = \ln\gamma_i^C + \ln\gamma_i^R \quad (2.27)$$

O termo combinatorial é descrito pela seguinte equação:

$$\ln\gamma_i^C = 1 - V_i' + \ln V_i' - 5q_i \left( 1 - \frac{V_i}{F_i} + \ln \frac{V_i}{F_i} \right) \quad (2.28)$$

Os parâmetro  $V_i'$ ,  $V_i$  e  $F_i$  são calculado utilizando-se:

$$V_i' = \frac{r_i^{3/4}}{\sum_j x_j r_j^{3/4}} \quad (2.29)$$

$$V_i = \frac{r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (2.30)$$

$$r_i = \sum \nu_k^{(i)} R_k \quad (2.31)$$

$$F_i = \frac{q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad (2.32)$$

$$q_i = \sum \nu_k^{(i)} Q_k \quad (2.33)$$

A parte residual é obtida utilizando as seguintes relações:

$$\ln\gamma_i^R = \sum_k \nu_k^{(i)} (\ln\Gamma_k - \ln\Gamma_k^{(i)}) \quad (2.34)$$

$$\ln\Gamma_k = Q_k \left( 1 - \ln \left( \sum_m \theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \frac{\theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \theta_n \Psi_{nm}} \right) \quad (2.35)$$

Por sua vez, a fração superficial  $\theta_m$  e molar  $X_m$  são dadas por:

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n} \quad (2.36)$$

$$X_m = \frac{\sum_j \nu_m^{(j)} x_j}{\sum_j \sum_n \nu_n^{(j)} x_j} \quad (2.37)$$

## 2.5 Regras de Mistura

Para estender as equações de estado de componentes puros para misturas, as mesmas precisam sofrer pequenas modificações de modo a incluir uma variável adicional: a composição do sistema. As equações que realizam essa inclusão são as chamadas regras de misturas.

### 2.5.1 Regra de Mistura Clássica

Pela regra de mistura clássica o parâmetro que considera a atração entre as moléculas da mistura é calculado da seguinte forma:

$$a_{mix} = \sum_i \sum_j z_i z_j a_{ij} \quad (2.38)$$

e o parâmetro que considera o volume residual da mistura leva em conta as contribuições individuais dos componentes puros:

$$b_{mix} = \sum_i \sum_j z_i z_j b_{ij} \quad (2.39)$$

## 2.6 Regras de combinação

Pela regra de mistura clássica calculamos os parâmetros  $a$  e  $b$  das equações de estado. Pelas regras de combinação estimamos o valor dos coeficientes cruzados  $a_{ij}$  e  $b_{ij}$ .

### 2.6.1 Regra de Combinação Clássica (Lorentz Berthelot)

Os coeficientes  $a_{ij}$  e  $b_{ij}$  têm as seguintes expressões:

$$a_{ij} = (1 - k_{ij}) \sqrt{a_i a_j} \quad (2.40)$$

$$b_{ij} = 0,5(1 + k_{ij})(b_i + b_j) \quad (2.41)$$

O parâmetro de interação binária  $k_{ij}$  é zero quando  $i$  é igual a  $j$  e diferente de zero quando as moléculas forem diferentes.

Associando esta regra de combinação à regra de mistura clássica os parâmetros de interação  $a_{mix}$  e  $b_{mix}$  assumem as formas:

$$a_{mix} = \sum_i \sum_j z_i z_j (1 - k_{ij}) \sqrt{a_i a_j} \quad (2.42)$$

$$b_{mix} = \sum_i z_i b_i \quad (2.43)$$

### 2.6.2 Regra de Combinação Conformal

Esta regra de combinação é utilizada nas equações de Peng-Robinson e Soave Redlich-Kwong Assimétricas. Segundo a combinação conformal:

$$a_{ij} = \left[ \frac{a_i^{N_{ij}} + a_j^{N_{ij}}}{2} \right]^{1/N_{ij}} \quad (2.44)$$

$$b_{ij} = \left[ \frac{b_i^{M_{ij}} + b_j^{M_{ij}}}{2} \right]^{1/M_{ij}} \quad (2.45)$$

onde os parâmetros  $N_{ij}$  e  $M_{ij}$  estão correlacionados com características das substâncias puras, como por exemplo, o fator acêntrico.

---

## 3 Propriedades dos Fluidos

---

Neste capítulo são apresentadas as propriedades calculadas pelo VRTherm. No **Capítulo 7** é mostrado como estas propriedades podem ser utilizadas para a realização de simulações.

### Sumário

---

<b>3.1 Propriedades de Componentes Puros</b> . . . . .	<b>17</b>
<b>3.2 Propriedades de Misturas Líquidas e Gasosas</b> . . . . .	<b>17</b>
<b>3.3 Cálculos de Equilíbrio de Fases</b> . . . . .	<b>17</b>

---

### 3.1 Propriedades de Componentes Puros

- Massa Molar: retorna um vetor de massas molares de cada substância da mistura em  $g/mol$
- Pressão de Vapor: pressão de vapor de cada componente  $Pa$
- Temperatura de Ebulição: temperatura de ebulição do componente em  $K$
- Temperatura de Congelamento: temperatura de congelamento do componente em  $K$
- Temperatura Crítica: temperatura crítica da substância em  $K$
- Pressão Crítica: pressão crítica da substância em  $Pa$
- Volume Crítico: volume crítico da substância em  $m^3$

### 3.2 Propriedades de Misturas Líquidas e Gasosas

- Volume Molar: volume molar de misturas em  $m^3/mol$
- $C_p/C_v$ : retorna o valor adimensional da razão  $C_p/C_v$  da mistura
- Fator de Compressibilidade: fornece o valor do fator de compressibilidade de misturas (adimensional)
- Coeficiente de Fugacidade: fornece o coeficiente de fugacidade de fase (adimensional)
- Entalpia: entalpia em  $J/mol$
- Entropia: entropia de misturas em  $J/molK$
- Energia Livre de Gibbs: em  $J/K$
- $C_p$ : calor específico de misturas calculada em  $J/molK$
- Densidade: em  $g/m^3$
- Condutividade térmica: condutividade em  $W/mK$  de misturas de líquidos e gases
- Viscosidade: viscosidade calculada em  $cP$

### 3.3 Cálculos de Equilíbrio de Fases

- Fração vaporizada: retorna a fração de vapor de uma corrente dadas suas condições de temperatura, pressão e composição global

- Cálculo de Flash: retorna fração de vaporização, a composição da fase líquida e a composição da fase vapor dada a composição global da corrente de entrada e as condições de temperatura e pressão do equilíbrio.

---

## 4 Interface Gráfica

---

O VRTherm compreende um conjunto de ferramentas que o tornam acessível em diversos *softwares* comerciais ou desenvolvidos para aplicações específicas. Neste capítulo a interface gráfica do VRTherm é apresentada.

### Sumário

---

<b>4.1 Introdução</b> . . . . .	<b>20</b>
---------------------------------	-----------

---

## 4.1 Introdução

A interface gráfica do VRTherm pode ser utilizada para a visualização e procura de componentes disponíveis no banco de dados. Além disto, esta ferramenta pode ser utilizada para cálculos de *flash* e de propriedades de misturas.



**Windows:** No Windows a interface gráfica pode ser aberta utilizando o atalho que é instalado no menu iniciar.



**Linux:** No Linux a interface gráfica pode ser aberta utilizando o comando `vrtherm` a partir de um terminal.

A interface permite configurar, salvar e abrir misturas previamente configuradas. A procura e seleção de componentes pode ser vista na [Figura 4.1](#). Para procurar por um novo componente deve-se

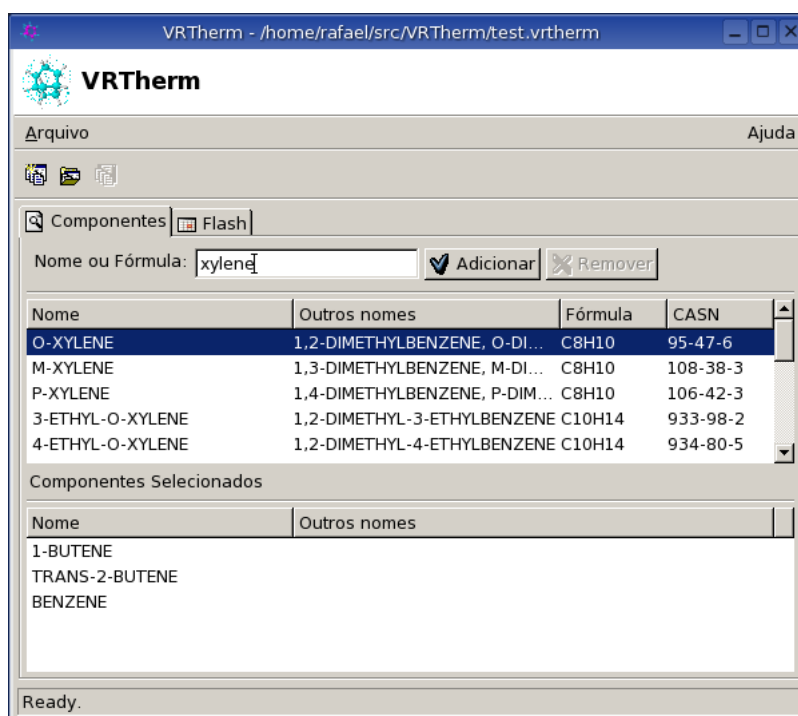
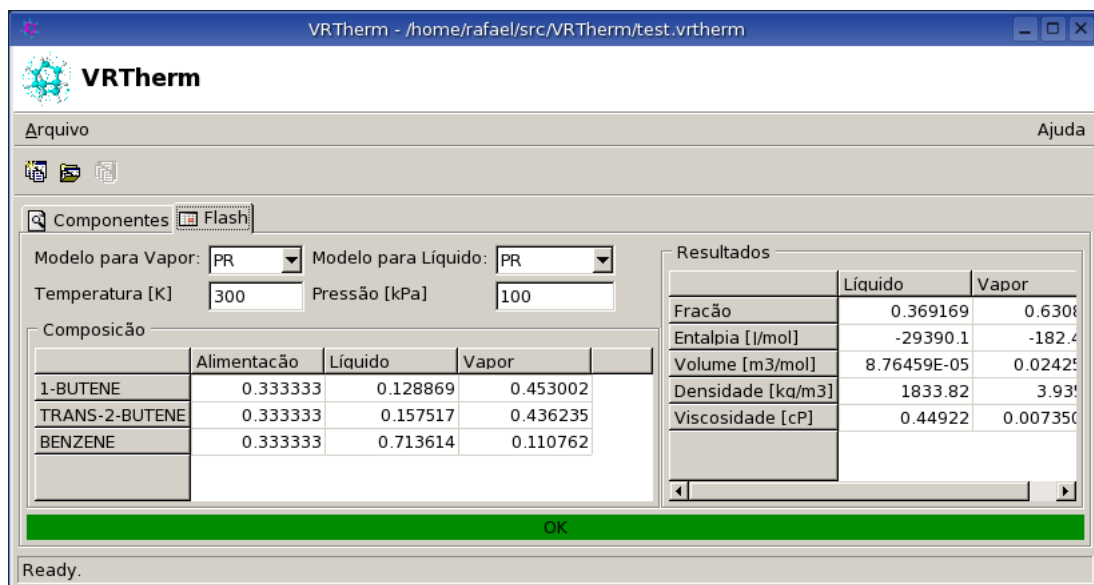


Figura 4.1: Procura de componentes na interface gráfica.

preencher o campo **Nome** ou **Fórmula** com parte do nome ou fórmula do componente desejado. Automaticamente as opções que mais se aproximam do componente desejado aparecem listadas na parte inferior da janela.

Uma vez selecionados os componentes da mistura, a interface apresenta cálculos de *flash* e propriedades na aba **Flash**, como pode ser visto na [Figura 4.2](#).

Figura 4.2: Cálculos de *flash* e propriedades.

---

## 5 Excel Addin

---

O VRTherm também está disponível na forma de um *Add-In* para o Microsoft Excel. Desta forma é possível obter todas as propriedades termodinâmicas e propriedades físicas que o VRTherm provê diretamente em planilhas do Excel. As funções disponíveis no VRTherm Add-in, assim como a forma de utilização, são apresentadas neste Capítulo.

### Sumário

---

<b>5.1</b>	<b>Instalação</b>	<b>23</b>
5.1.1	Desinstalação	23
<b>5.2</b>	<b>Utilização</b>	<b>24</b>
5.2.1	Funções de Configuração	24
5.2.2	Cálculos de Propriedades de uma Fase	25
5.2.3	Propriedades de Substâncias Puras	26
5.2.4	Cálculos de <i>flash</i> e Ponto de Bolha	27
<b>5.3</b>	<b>Exemplos</b>	<b>27</b>

---

## 5.1 Instalação

O VRTherm Add-in pode ser utilizado no Microsoft Excel 97 e superiores.

Antes de instalar o VRTherm Add-in é necessário ter o VRTherm instalado no sistema conforme descrito na [Seção 1.6](#).

Para adicionar o VRTherm Add-in ao Excel:

- Abra o diálogo de adição de suplementos através do menu Ferramentas→Suplementos do Excel.
- Utilizando o botão Procurar . . . da caixa de diálogo, selecione o arquivo vrtherm.xll que se encontra na pasta onde foi instalado o VRTherm.
- Após a seleção do suplemento assegure-se de que este está selecionado, como na apresentado na [Figura 5.1](#)

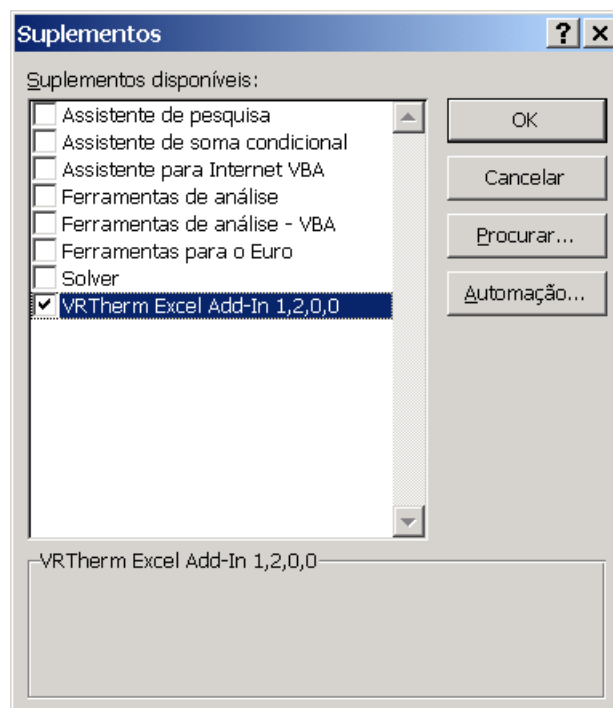


Figura 5.1: VRTherm Add-in selecionado.



**Atenção:** Se for questionado se o VRTherm Add-in deve ser copiado ao diretório de suplementos do usuário a opção selecionada deverá ser **não**.

### 5.1.1 Desinstalação

Para remover o VRTherm Add-in é apenas necessário remover o suplemento através do menu Ferramentas→Suplementos.

## 5.2 Utilização

O VRTherm Add-in é baseado nos conceitos de mistura e fase:

- **mistura**: uma seleção de componentes, é utilizada para criar uma fase e obter propriedades dos componentes puros. Exemplo: propriedades críticas
- **fase**: para uma dada mistura, utiliza uma equação de estado associada a diversas correlações para calcular propriedades de uma fase como um todo. Exemplos: entalpia e volume específico de um líquido ou vapor.

Para manipular as misturas e fases, o VRTherm Add-in possui quatro classes de funções:

- Funções de configuração de misturas e fases
- Acesso à propriedades de componentes puros utilizando misturas
- Cálculo de propriedades utilizando fases
- Função para conversão de unidades de medida

A forma mais conveniente de utilização do VRTherm Add-in é através do *Function Wizard*. Esta ferramenta é iniciada pelo botão:

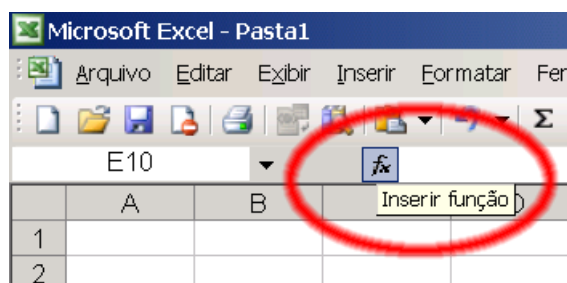


Figura 5.2: Botão para acessar o *Function Wizard*.

Uma vez iniciado o *Function Wizard*, as categorias de funções do VRTherm Add-in são apresentadas, como pode ser visto na [Figura 5.3](#).

### 5.2.1 Funções de Configuração

No VRTherm Add-in uma mistura representa um conjunto de componentes. Misturas são armazenadas em *containers*, identificados por um número inteiro positivo. Não existem limites quanto ao número de misturas que podem ser configuradas simultaneamente. Para configurar uma mistura, basta indicar quais são os componentes da mesma com a função `VRTSetComps`.

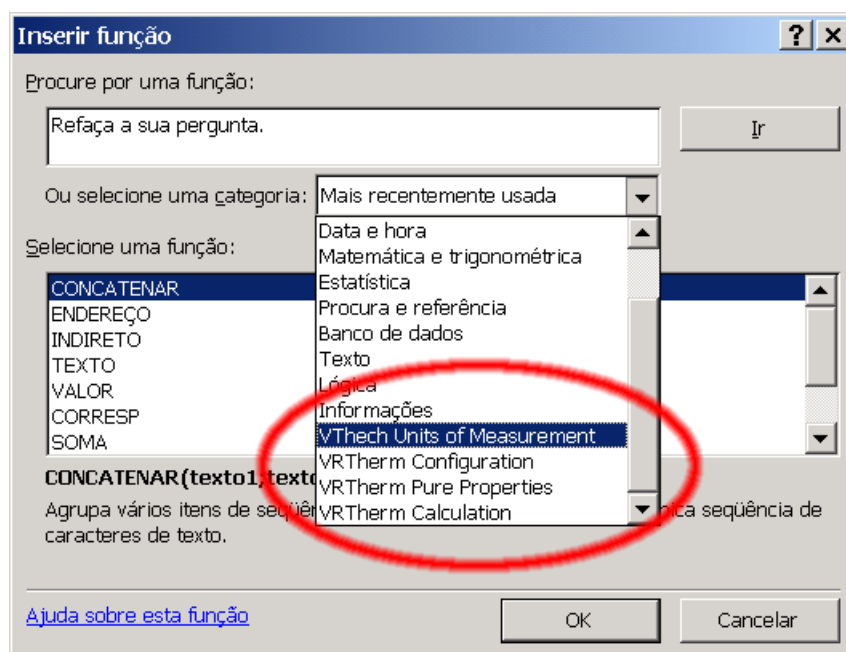


Figura 5.3: Categorias de funções do VRTherm Add-in.

A [Figura 5.4](#) exemplifica a configuração de uma mistura com os componentes n-butano e isobutano.

De forma semelhante à configuração de misturas, uma fase também é armazenada em um *container* ao qual está associado um número identificador inteiro e positivo. Para configurar uma fase, o usuário deverá ter uma mistura previamente configurada.

Utilizando como base uma mistura, é possível configurar uma fase com a função `VRTCf $\phi$ Phase`, como apresentado na [Figura 5.5](#).

No exemplo acima foi configurada uma fase líquida utilizando os componentes da mistura `mix` e baseado na equação de estado "PR" (Peng-Robinson). As equações de estado disponíveis são apresentadas na [Tabela 5.1](#).

### 5.2.2 Cálculos de Propriedades de uma Fase

Para calcular propriedades de uma fase como um todo é apenas necessário fornecer o identificador da fase previamente configurada com a função `VRTCf $\phi$ Phase`.

Por exemplo, a função `VRTEnthalpy` retorna a entalpia da fase, esta é calculada utilizando o modelo fornecido na configuração.

A listagem de todos os cálculos disponíveis no VRTherm Add-in pode ser vista na categoria `VRTherm Calculation` do *Function Wizard*, como na [Figura 5.6](#).

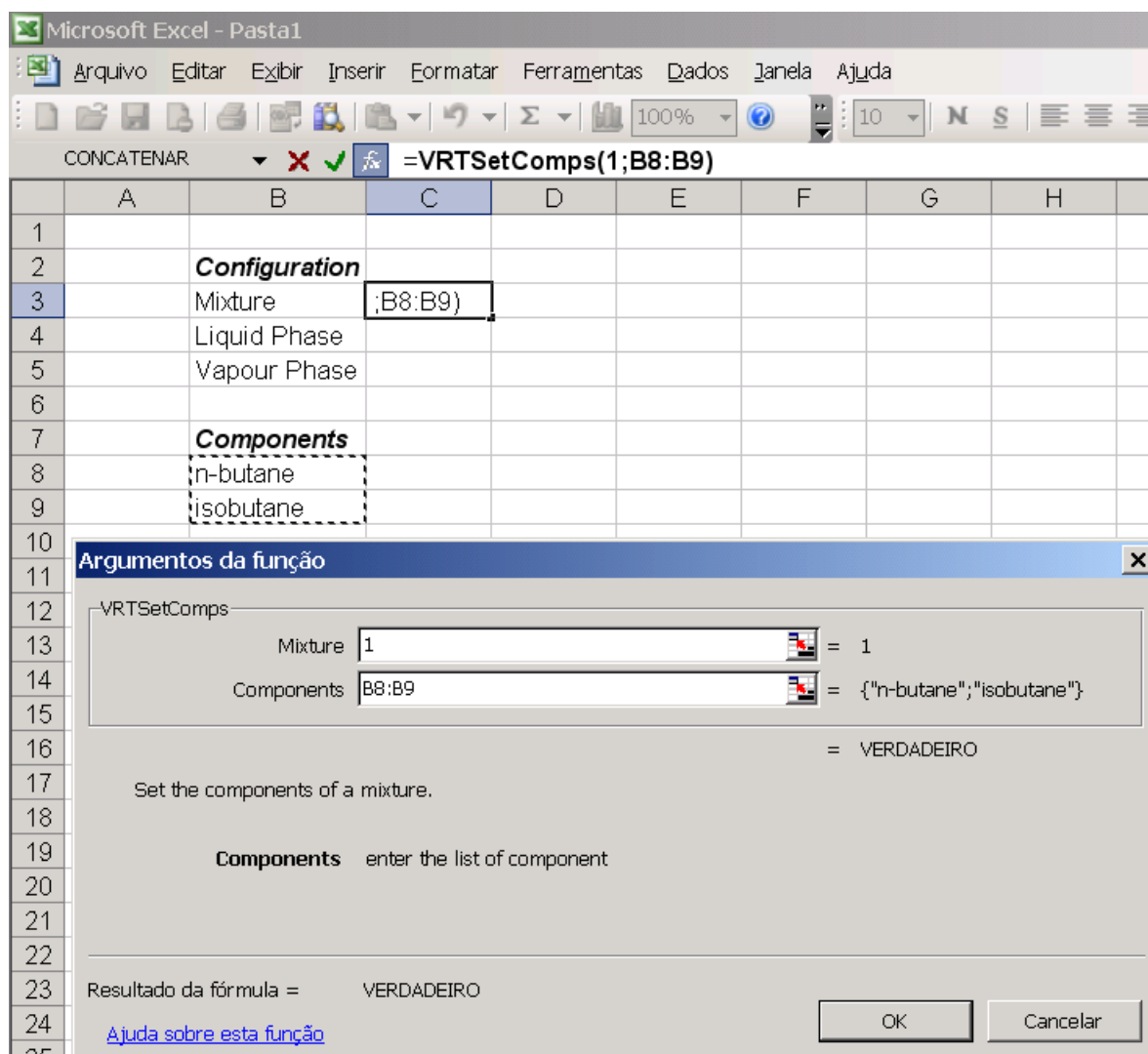


Figura 5.4: Seleção de componentes de uma mistura.

### 5.2.3 Propriedades de Substâncias Puras

Para acessar propriedades de substâncias puras é necessário apenas fornecer o identificador de uma mistura previamente configurada. Por exemplo, a função `VRTTc` retorna um vetor com o a temperatura crítica de cada componente da mistura.

A listagem de todas as propriedades de substâncias puras disponíveis no `VRTherm Add-in` pode ser vista na categoria `VRTherm Pure Properties` do *Function Wizard*, como apresentado na [Figura 5.7](#).

Tabela 5.1: Equações de estado disponíveis no VRTherm Add-in

Sigla da equação de estado	Descrição
Ideal	Gás Ideal
IdealLiquid	Líquido Ideal
RK	Redlich Kwong
SRK	Soave Redlich-Kwong
PR	Peng-Robinson
APR	Peng-Robinson Assimétrico
ASRK	Soave Redlich-Kwong Assimétrico
UNIFAC	UNIFAC(Dortmund)

Tabela 5.2: Cálculos de equilíbrio do VRTherm Add-in.

Função	Argumentos	Saída da função
VRTFlashTP	$T, P, z$	$v_{frac}, l_{frac}, x, y$
VRTBubbleT	$P, x$	$T, y$
VRTBubbleP	$T, x$	$P, y$

#### 5.2.4 Cálculos de *flash* e Ponto de Bolha

As funções que fazem cálculos de equilíbrio se diferenciam das demais por calcularem mais de um resultado. Na [Tabela 5.2](#) são apresentadas as funções de cálculo de equilíbrio juntamente com seus argumentos de saídas geradas.

Porém, no Excel se o usuário utilizar uma das funções acima apenas o primeiro resultado calculado é mostrado na planilha. Por exemplo, um cálculo de temperatura de ponto de bolha determina a temperatura e a composição da fase vapor mas apenas a temperatura aparecerá na planilha.

Para que todos os resultados apareçam na planilha é necessário criar uma fórmula matriz. Mais detalhes podem ser encontrados no tópico *Criar uma fórmula de matriz* disponível da ajuda do Microsoft Excel. Utilizando esta técnica foram construídas diversas planilhas de exemplo, como tratado na [Seção 5.3](#).

## 5.3 Exemplos

Na pasta `samples` do diretório de instalação do VRTherm Add-in estão disponíveis algumas planilhas que demonstram as funcionalidades do suplemento:

- `Apolar.xls`: planilha com cálculo de um separador *flash* e

cálculo de diversas propriedades para uma mistura apolar

- Polar.xls: planilha com cálculo de um separador *flash* e cálculo de diversas propriedades para uma mistura polar
- EnvelopeEthanolWater.xls: planilha com a determinação do envelope de fases para uma mistura de etanol e água e comparação com valor experimental
- EnvelopeMethaneBenzene.xls: planilha com a determinação do envelope de fases para uma mistura de metano e benzeno e comparação com valor experimental

The image shows a Microsoft Excel spreadsheet with the following data:

	A	B	C	D	E	F	G	H
1								
2		<b>Configuration</b>						
3		Mixture	1					
4		Liquid Phase	1;"PR")					
5		Vapour Phase						
6								
7		<b>Components</b>						
8		n-butane						
9		isobutane						

The dialog box 'Argumentos da função' displays the following configuration for the VRTCfgPhase function:

- Phase: 1 = 1
- Mixture: C3 = 1
- Phase type: "liquid" = "liquid"
- EOS: "PR" = "PR"

Result: = VERDADEIRO

Configure a phase slot for the given mixture, phase type and EOS.

**Mixture** mixture slot number.

Resultado da fórmula = VERDADEIRO

[Ajuda sobre esta função](#) OK Cancelar

Figura 5.5: Configuração de uma fase.

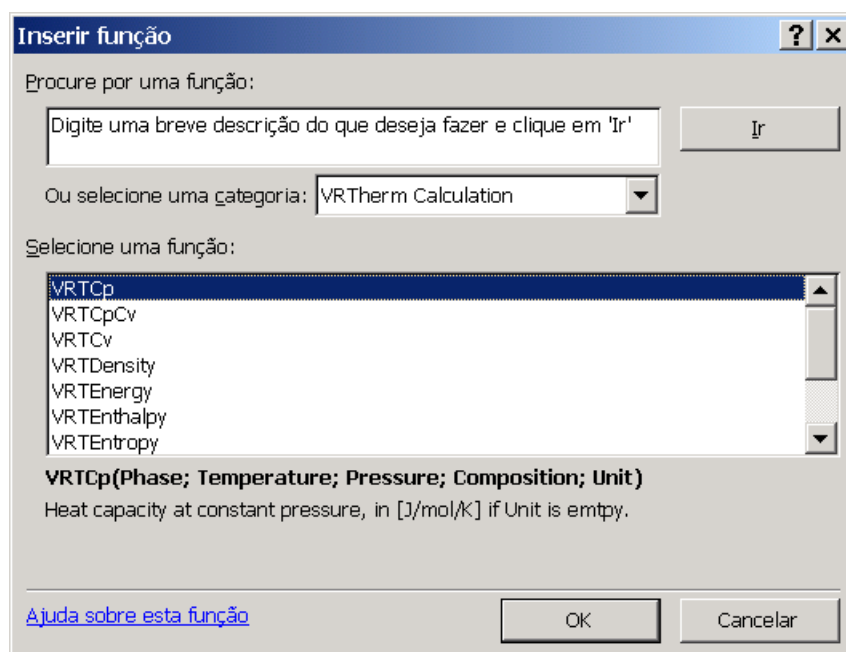


Figura 5.6: Cálculos disponíveis no VRTherm Add-in.

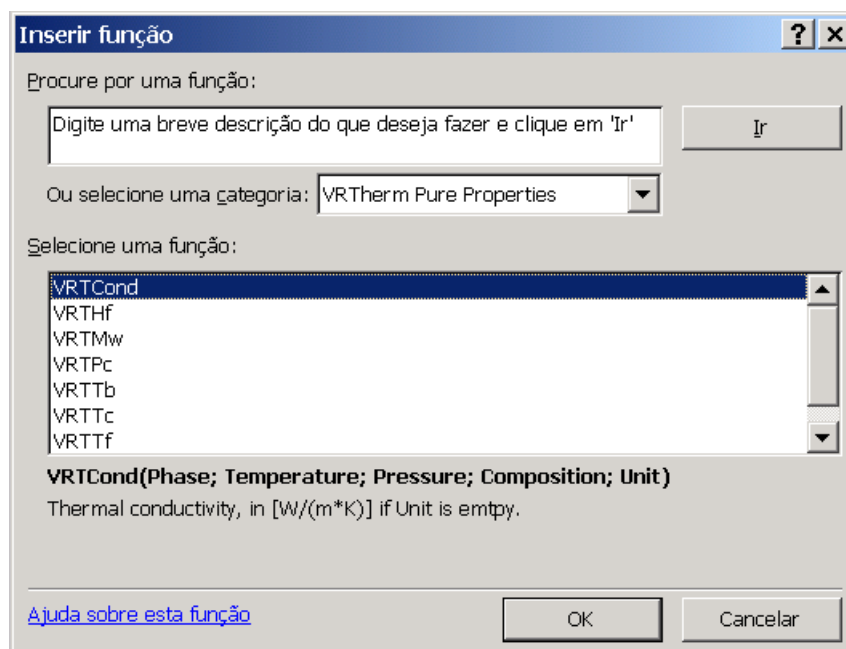


Figura 5.7: Propriedades de substâncias puras disponíveis no VRTherm Add-in.

---

## 6 MatLab Toolbox

---

O VRTherm também está disponível na forma de um *Toolbox* para o MatLab. Desta forma é possível obter todas as propriedades termodinâmicas e propriedades físicas que o VRTherm provê diretamente no MatLab. As funções disponíveis no VRTherm Toolbox, assim como a forma de utilização, são apresentadas neste Capítulo.

### Sumário

---

<b>6.1</b>	<b>Introdução</b>	<b>32</b>
6.1.1	Instalação	32
6.1.2	Desinstalação	33
<b>6.2</b>	<b>Utilização</b>	<b>33</b>
6.2.1	Funções de Configuração	34
6.2.2	Propriedades de Substâncias Puras	35
6.2.3	Cálculos de Propriedades de uma Fase	35
6.2.4	Ajuda no MatLab	36
6.2.5	Exemplos	36

---

## 6.1 Introdução

Para mais detalhes sobre o Matlab visite [www.mathworks.com](http://www.mathworks.com)

O VRTherm Toolbox pode ser utilizado no Matlab versão 5 e superiores. MatLab representa uma família de produtos que provê uma linguagem de programação de alto nível e um ambiente para computação técnica, e funções para:

- Desenvolvimento de algoritmos
- Análise e visualização de dados
- Computação numérica

### 6.1.1 Instalação

Antes de instalar o VRTherm Toolbox é necessário instalar o VRTherm como descrito na [Seção 1.6](#).

Existem duas alternativas para a instalação do VRTherm Toolbox:

- Instalação permanente (requer direitos de administrador)
- Instalação temporária (válida somente na seção corrente)

A instalação permanente ocorre quando o *script* de instalação é executado com direitos de administrador do sistema. Caso contrário, a instalação é válida somente para a seção corrente, sendo necessário repetir a instalação toda a vez que o MatLab é aberto. Para executar a instalação do VRTherm Toolbox, digite os seguintes comandos no prompt do Matlab:

---

```
>> cd 'VRTDIR'  
>> vrtinstall
```

---

onde 'VRTIDIR' é o caminho completo da pasta onde o VRTherm foi instalado.

Se uma instalação permanente acontecer, a seguinte mensagem será apresentada no Matlab:

---

```
VRTherm sucessfully added to Matlab permanent path
```

---

Para o caso de uma instalação temporária a seguinte mensagem será apresentada:

---

```
Warning you have no rights to permanently change Matlab path  
You will need to run VRTINSTALL again next time Matlab is started
```

---

Para mais detalhes execute `help vrtinstall` no prompt do MatLab.

### 6.1.2 Desinstalação

A desinstalação do VRTherm Toolbox só é necessária quando uma instalação permanente foi executada. Para desinstalar o VRTherm Toolbox, execute os seguintes comandos no prompt do Matlab:

---

```
>> cd 'VRTDIR'  
>> vrtuninstall
```

---

onde 'VRTDIR' é o caminho completo da pasta onde o VRTherm foi instalado.

Se a desinstalação tiver sucesso, a seguinte mensagem será apresentada no Matlab:

---

```
VRTherm sucessfully removed from Matlab permanent path
```

---

caso contrário, será apresentada a seguinte mensagem:

---

```
Warning you have no rights to change Matlab permanent path
```

---

Para mais detalhes execute `help vrtuninstall` no prompt do MatLab.

## 6.2 Utilização

O VRTherm Toolbox é baseado nos conceitos de mistura e fase.

- **mistura:** uma seleção de componentes, é utilizada para obter propriedades dos componentes puros. Exemplo: propriedades críticas
- **fase:** utiliza uma equação de estado associada a diversas correlações para calcular propriedades de uma fase como um todo. Exemplos: entalpia e volume específico de um líquido ou vapor.

Para manipular as misturas e fases, o VRTherm Toolbox possui algumas classes de funções:

- Funções de configuração de misturas e fases
- Acesso a propriedades de componentes puros utilizando misturas
- Cálculos de propriedades de uma fase e de equilíbrio termodinâmico

### 6.2.1 Funções de Configuração

No VRTherm Toolbox uma mistura representa um conjunto de substâncias puras. Misturas são armazenadas em *containers*, identificados por um número inteiro positivo. Não existem limites quanto ao número de misturas que podem ser configuradas simultaneamente. Para configurar uma mistura, basta adicionar um componente com a função `vrtaddcomp` e a mesma é criada automaticamente. Para mais detalhes sobre esta função utilize o comando `help vrtaddcomp`.



**Dica:** Toda vez que for configurar uma mistura é aconselhável *limpar* o *container* com o comando `vrtclmix` para assegurar que não haja conflitos com uma possível configuração anterior.

Por exemplo, para configurar uma mistura com os componentes n-butano e isobutano:

---

```
mymixture = 1;
vrtclmix(mymixture);
vrtaddcomp(mymixture, 'n-butane');
vrtaddcomp(mymixture, 'isobutane');
```

---

Como citado anteriormente o usuário pode configurar um número ilimitado de misturas simultaneamente:

---

```
mymixture = 1;
vrtclmix(mymixture);
vrtaddcomp(mymixture, 'n-butane');
vrtaddcomp(mymixture, 'isobutane');
mymixture2 = 2;
vrtclmix(mymixture2);
vrtaddcomp(mymixture2, 'benzene');
vrtaddcomp(mymixture2, 'p-xylene');
```

---

De forma semelhante à configuração de misturas, um fase também é armazenada em um *container* ao qual está associado um número identificador inteiro e positivo. Para configurar uma fase, o usuário deverá ter uma mistura previamente configurada. Utilizando como base uma mistura, é possível configurar uma fase com a função `vrtcfgphase`, por exemplo:

---

```
mix = 1;
phase = 1;
vrtclmix(mix);
vrtaddcomp(mix, 'n-butane');
vrtaddcomp(mix, 'isobutane');
vrtcfgphase(phase, mix, 'liquid', 'PR');
```

---

No exemplo acima foi configurada uma fase líquida utilizando os componentes da mistura `mix` e baseado na equação de estado PR (Peng-Robinson). Para mais detalhes utilize o comando `help vrtcfgphase`. As equações de estado disponíveis estão na [Tabela 6.1](#).

Tabela 6.1: Equações de estado disponíveis no VRTherm Toolbox

Sigla da equação de estado	Descrição
Ideal	Gás Ideal
IdealLiquid	Líquido Ideal
RK	Redlich Kwong
SRK	Soave Redlich-Kwong
PR	Peng-Robinson
APR	Peng-Robinson Assimétrico
ASRK	Soave Redlich-Kwong Assimétrico
UNIFAC	UNIFAC(Dortmund)

### 6.2.2 Propriedades de Substâncias Puras

Para acessar propriedades de substâncias puras é necessário apenas fornecer o identificador de uma mistura previamente configurada. Por exemplo, a função `vrttc` retorna um vetor com o a temperatura crítica de cada componente da mistura. Opcionalmente pode ser fornecida a unidade de medida para o resultado, por exemplo:

---

```
>> mix = 1;
>> vrtclmix(mix);
>> vrtaddcomp(mix, 'n-butane');
>> vrtaddcomp(mix, 'isobutane');
>> Tc = vrttc(mix)

Tc =

    425.1200    407.8000

>> Tc = vrttc(mix, 'degC')

Tc =

    151.9700    134.6500
```

---

Para mais detalhes utilize o comando `help vrttc` no prompt do MatLab.

Para listar todas as funções disponíveis utilize o comando `help vrtfun`.

### 6.2.3 Cálculos de Propriedades de uma Fase

Para calcular propriedades de uma fase como um todo é apenas necessário fornecer o identificador da fase previamente configurada com a função `vrtcfghphase` e o estado desejado. Por exemplo, a função `vrtenthalpy` retorna a entalpia da fase:

---

```
>> mix = 1;
>> vrtclmix(mix);
>> vrtaddcomp(mix, 'n-butane');
>> vrtaddcomp(mix, 'isobutane');
>> phase = 1;
>> vrtcfgphase(phase, mix, 'liquid', 'PR');
>> T = 25; Tunit = 'degC', P = 1; Punit = 'atm'; z = [0.5 0.5];
>> h = vrtenthalpy(phase, T, P, z, Tunit, Punit, 'cal/mol')
```

h =

8.6336e+003

---

Para mais detalhes utilize o comando `help vrtenthalpy`.

Para listar todas as funções disponíveis utilize o comando `help vrtfun`.

#### 6.2.4 Ajuda no MatLab

O VRTherm Toolbox está integrado ao sistema de ajuda do MatLab. Para listar todas as funções disponíveis utilize o comando `help vrtfun` no prompt do MatLab. Como já apresentado anteriormente, a ajuda também está disponível para cada uma das funções individuais, por exemplo: `help vrtaddcomp` ou `help vrtenthalpy`.

#### 6.2.5 Exemplos

No arquivo `vrtsample.m` é apresentada uma aplicação de todas as funções do VRTherm Toolbox. Este *script* pode ser executado através do comando `vrtsample`.

Para visualizar o conteúdo do arquivo execute `edit vrtsample` no prompt do MatLab. Para obter outros exemplos e aplicações do VRTherm Toolbox, acesse [www.vrtech.com.br](http://www.vrtech.com.br).

Na pasta `samples` do diretório de instalação do VRTherm pode ser encontrado o *script* `EnvelopeEthanolWater.m`. Este *script* exemplifica a construção de um envelope de fases para uma mistura de etanol e água e compara os resultados com dados experimentais.

---

## 7 EMSO Plug-In

---

Se o VRTherm foi devidamente instalado como descrito na [Seção 1.6](#) ele pode ser usado diretamente dentro do EMSO como uma elegante fonte de dados de propriedades termodinâmicas. Os cálculos disponíveis serão apresentados nesse capítulo.

### Sumário

---

<b>7.1 Usando o VRTherm</b> . . . . .	<b>38</b>
7.1.1 Modelos . . . . .	40
7.1.2 Propriedades . . . . .	40

---

## 7.1 Usando o VRTherm

Nesta seção é apresentada a forma de uso do VRTherm dentro do EMSO.

Basicamente é apenas necessário indicar o VRTherm como a fonte de cálculos termodinâmicos no FlowSheet, através da declaração de um CalcObject. Após isto, basta selecionar os componentes da mistura desejada e os modelos termodinâmicos a serem utilizados nos cálculos. Um exemplo típico de utilização segue:

---

```

1 using "separators";
2 FlowSheet FlashSample
3     PARAMETERS
4     PP as CalcObject(Brief="Physical Properties",File="vrpp");
5     NoComps as Integer;

7     SET
8     PP.Components = ["1,3-butadiene", "isobutene", "n-pentane", "
9         1-pentene",
10        "1-hexene", "benzene"];
11    PP.LiquidModel = "PR";
12    PP.VapourModel = "PR";
13    NoComps = PP.NumberOfComponents;

14    DEVICES
15    s1 as stream_therm;
16    fl as flash;

18    CONNECTIONS
19    s1 to fl.Feed;

```

---

Embora a biblioteca VRTherm seja acessada através do arquivo vrpp, o EMSO irá automaticamente procurar por vrpp.dll no Windows e libvrpp.so no Linux.

Na linha 4 do código acima o VRTherm é declarado como um CalcObject onde é apontado o arquivo vrpp, sendo a sigla para VRTherm Physical Properties.

Na seção SET, linha 7, são configurados os parâmetros para a utilização do VRTherm. A interpretação destes parâmetros é a seguinte:

- PP.Components: lista de componentes da mistura desejada
- PP.LiquidModel: modelo para calcular as propriedades da fase líquida
- PP.VapourModel: modelo para cálculo das propriedades da fase vapor

A lista de modelos disponíveis pode ser encontrada na [Seção 1.5](#) ou na [Tabela 7.1](#)



**Dica:** Utilize a interface gráfica do VRTherm para verificar os componentes disponíveis no banco de dados, mais detalhes no [Capítulo 4](#).



**Nota:** No exemplo acima um mesmo modelo foi selecionado para ambas as fases, porém no VRTherm pode-se utilizar modelos diferentes para a fase líquida e vapor, permitindo uma maior flexibilidade.

---

O modelo de separador utilizado no exemplo acima faz parte da biblioteca de modelos do EMSO - EML. Apenas para ilustração o modelo separador considerado é apresentado:

---

```

1 Model flash
2   PARAMETERS
3   ext PP as CalcObject;
4   ext NoComps as Integer;
5     Vf as volume(Brief="Total Volume of the flash");
6     Mw(NoComps) as molweight;
7     Q as power (Brief="Rate of heat supply");
8     Across as area (Brief="Flash Cross section area");

10  SET
11  Mw=PP.MolecularWeight();

13  VARIABLES
14  in Feed as stream;
15  out OutletL as stream_therm;
16  out OutletV as stream_therm;

```

---

Este modelo de separador, por sua vez, considera o seguinte modelo para básico para as correntes:

---

```

1 Model stream
2   PARAMETERS
3   ext NoComps as Integer (Brief = "Number of chemical
      components", Lower = 1);

5   VARIABLES
6   F as flow_mol;
7   T as temperature;
8   P as pressure;
9   z(NoComps) as fraction (Brief = "Molar Fraction");
10  h as enth_mol;
11  v as fraction (Brief = "Vapourisation fraction");
12 end

```

---

Porém, este modelo de corrente não apresenta formas de calcular propriedades importantes da mistura, como por exemplo a entalpia.

Utilizando o VRTherm como um CalcObject do EMSO, esta propriedade pode ser calculada da seguinte forma:

---

```

1 Model stream_therm as stream
2   PARAMETERS
3   ext PP as CalcObject(Brief = "VRTech Physical Properties");

5   EQUATIONS
6   h = (1-v)*PP.LiquidEnthalpy(T, P, z)
7     + v*PP.VapourEnthalpy(T, P, z);
8 end

```

---

Como pode ser visto na linha 6 do modelo acima, duas funções do VRTherm estão sendo utilizadas: LiquidEnthalpy e VapourEnthalpy. A lista completa de propriedades que podem ser calculadas desta forma utilizando o VRTherm, assim como os argumentos de cada cálculo, podem ser encontrados na [Subseção 7.1.2](#).

### 7.1.1 Modelos

O VRTherm implementa uma série de modelos para os cálculos de propriedades de misturas. Na [Tabela 7.1](#) é apresentada a forma que devem ser indicados os modelos escolhidos:

Tabela 7.1: Modelos Disponíveis no VRTherm

Forma de uso no EMSO	Modelo
"Ideal"	Gás Ideal
"IdealLiquid"	Líquido Ideal
"RK"	Redlich Kwong
"SRK"	Soave Redlich-Kwong
"PR"	Peng-Robinson
"APR"	Peng-Robinson Assimétrico
"ASRK"	Soave Redlich-Kwong Assimétrico
"UNIFAC"	UNIFAC(Dortmund)

### 7.1.2 Propriedades

Abaixo segue a lista completa de propriedades que podem ser calculadas pelo VRTherm em modelos dentro do EMSO. Estas propriedades são divididas em três grandes grupos: as propriedades dos componentes puros, propriedades de misturas e cálculos de equilíbrio.

A [Tabela 7.2](#) trata das propriedades de componentes puros e a [Tabela 7.3](#) apresenta as propriedades de misturas. Já na [Tabela 7.4](#) são apresentadas funções que envolvem cálculos de equilíbrio de fases.

Tabela 7.2: Propriedades de componentes puros do VRTherm disponíveis no EMSO.

Função no EMSO	Propriedade	Argumentos
NormalBoilingPoint	Temperatura de Ebulição	-
VapourPressure	Pressão de Vapor	$T$
CriticalTemperature	Temperatura Crítica	-
CriticalPressure	Pressão Crítica	-
CriticalVolume	Volume Crítico	-
NormalFreezingPoint	Temperatura de congelamento	-
MolecularWeight	Massa molar	-



**Nota:** As propriedades de componentes puros, Tabela 7.2, serão sempre um vetor de comprimento igual ao número de componentes da mistura. As propriedades de misturas, Tabela 7.3 sempre serão um único valor que representa a mistura como um todo.

Tabela 7.3: Propriedades de misturas do VRTherm disponíveis no EMSO.

Função no EMSO	Propriedade	Argumentos
NumberOfComponents	Número de componentes da mistura	-
LiquidCpCv	$C_p/C_v$ da fase líquida	$T, P, z_l$
VapourCpCv	$C_p/C_v$ da fase vapor	$T, P, z_v$
LiquidCp	$C_p$ do líquido	$T, P, z_l$
VapourCp	$C_p$ do vapor	$T, P, z_v$
LiquidCv	$C_v$ do líquido	$T, P, z_l$
VapourCv	$C_v$ do vapor	$T, P, z_v$
LiquidCompressibilityFactor	Fator de compressibilidade do líquido	$T, P, z_l$
VapourCompressibilityFactor	Fator de compressibilidade do vapor	$T, P, z_v$
LiquidEnthalpy	Entalpia do líquido	$T, P, z_l$
VapourEnthalpy	Entalpia do vapor	$T, P, z_v$
LiquidEntropy	Entropia da fase líquida	$T, P, z_l$
VapourEntropy	Entropia da fase vapor	$T, P, z_v$
LiquidGibbsFreeEnergy	Energia Livre de Gibbs do líquido	$T, P, z_l$
VapourGibbsFreeEnergy	Energia Livre de Gibbs do vapor	$T, P, z_v$
LiquidVolume	Volume molar da fase líquida	$T, P, z_l$
VapourVolume	Volume molar da fase vapor	$T, P, z_v$
LiquidDensity	Densidade do líquido	$T, P, z_l$
VapourDensity	Densidade do vapor	$T, P, z_v$
LiquidThermalConductivity	Condutividade térmica de líquido	$T, P, z_l$
VapourThermalConductivity	Condutividade térmica de vapor	$T, P, z_v$
LiquidViscosity	Viscosidade da fase líquida	$T, P, z_l$
VapourViscosity	Viscosidade da fase vapor	$T, P, z_v$
LiquidFugacityCoefficient	Coefficiente de Fugacidade do líquido	$T, P, z_l$
VapourFugacityCoefficient	Coefficiente de Fugacidade do vapor	$T, P, z_l$

Para que o cálculo de flash seja totalmente realizado no VRTherm dentro do simulador EMSO, deve-se atribuir às saídas da função as variáveis existentes no modelo , por exemplo:

```

1  VARIABLES
2  in Feed as stream;
3  out  OutletL as stream_therm;
4  out  OutletV as stream_therm;
5  vfrac as fraction;
6  EQUATIONS
7  "The flash calculation"
8  [vfrac, OutletL.z, OutletV.z] = PP.Flash(OutletV.T, OutletV.P,
      Feed.z);

```

Tabela 7.4: Cálculos de flash do VRTherm disponíveis no EMSO.

Função no EMSO	Propriedade	Argumentos	Saída da função
VapourFraction	Fração vaporizada de uma corrente	$T, P, z$	$v_{frac}$
Flash	Cálculo de flash TP	$T, P, z$	$v_{frac}, z_l, z_v$

---

## 8 Cálculos de Propriedades Termodinâmicas

---

Neste capítulo é apresentada uma breve teoria a cerca dos cálculos necessários para estimar as principais propriedades termodinâmicas. No VRTherm há dois grandes grupos de cálculos de propriedades. O primeiro, apresentado a seguir, utiliza relações Termodinâmicas clássicas e o segundo utiliza correlações encontradas livremente na literatura.

### Sumário

---

<b>8.1 Ponto de Referência</b> . . . . .	<b>44</b>
<b>8.2 Entalpia</b> . . . . .	<b>44</b>
<b>8.3 Entropia</b> . . . . .	<b>44</b>
<b>8.4 Calor Específico <math>C_p</math></b> . . . . .	<b>44</b>

---

## 8.1 Ponto de Referência

O VRTherm considera como seu ponto de referência o estado de gás ideal em uma temperatura de 300 K.

Muitos pacotes de cálculos termodinâmicos consideram um ponto de referência de 0 K, ou próximo disto. A escolha deste ponto de referência gera algumas simplificações nos cálculos, porém é sabido que as correlações de calor específico não apresentam bons resultados em temperaturas inferiores a 150 K. Por este motivo, no VRTherm um ponto de referência com maior temperatura é utilizado.

## 8.2 Entalpia

$$H = H^{ig} + \int_{\infty}^V \left[ T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V, N_j} + V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T, N_j} \right] dV \quad (8.1)$$

onde  $H^{ig}$  é a entalpia de gás ideal.

## 8.3 Entropia

$$S = S^{ig} + \int_{\infty}^V \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V, N_j} - \frac{R}{V} \right] dV + R \ln Z \quad (8.2)$$

onde  $S^{ig}$  é a entropia de gás ideal.

## 8.4 Calor Específico $C_p$

$$C_p = C_p^{ig} + T \int_{\infty}^V \left( \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_V dV - \frac{T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V^2}{\left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T} - R \quad (8.3)$$

onde  $C_p^{ig}$  é o  $C_p$  de gás ideal.

---

## Índice Remissivo

---

- VRTech
  - suporte, [vi](#)
- Atualizações do VRTherm, [viii](#)
- Cálculos Termodinâmicos
  - $C_p$ , [44](#)
  - entalpia, [44](#)
  - entropia, [44](#)
  - ponto de referência, [44](#)
- Chave eletrônica, [4](#)
- Coefficiente de Atividade
  - líquido ideal, [13](#)
  - UNIFAC, [13](#)
- Direitos autorais, [v](#)
- EMSO
  - Corrente, [39](#)
  - flashq, [41](#)
  - Separador, [39](#)
- Equações de Estado Cúbicas, [10](#)
  - Peng-Robinson, [11](#)
    - assimétrica, [12](#)
  - Redlich-Kwong, [11](#)
  - Soave Redlich-Kwong, [11](#)
    - assimétrica, [12](#)
- Excel, [22](#)
  - flash, [27](#)
  - ponto de bolha, [27](#)
  - Desinstalação, [23](#)
  - Exemplos, [27](#)
  - Fases, [24](#)
  - Instalação, [23](#)
  - Misturas, [24](#)
  - Propriedades de Substâncias, [26](#)
  - Propriedades de uma Fase, [25](#)
  - Utilização, [24](#)
- Gás Ideal, [10](#)
- Instalação, [4](#)
  - chave eletrônica, [4](#)
- Linux, [5](#)
  - cliente, [6](#)
  - servidor, [6](#)
- Problemas, [7](#)
- Windows, [5](#)
- Interface gráfica, [20](#)
- Líquido Ideal, [13](#)
- MatLab, [31](#)
  - Ajuda, [36](#)
  - Desinstalação, [33](#)
  - Exemplos, [36](#)
  - Fases, [34](#)
  - Instalação, [32](#)
  - Misturas, [34](#)
  - Propriedades de Substâncias, [35](#)
  - Propriedades de uma Fase, [35](#)
  - Utilização, [33](#)
- Modelagem Rigorosa
  - aplicações, [3](#)
  - introdução, [2](#)
- Modelos Termodinâmicos
  - coeficiente de fugacidade, [13](#)
  - equações de estado cúbicas, [10](#)
  - gás ideal, [10](#)
  - regras de mistura, [14](#)
  - van der Waals, [10](#)
- Peng-Robinson, [11](#)
  - assimétrica, [12](#)
- Ponto de referência, [44](#)
- Propriedades, [17](#)
  - cálculos de flash, [17](#)
  - componentes puros, [17](#)
  - equilíbrio de fases, [17](#)
  - misturas, [17](#)
- Redlich-Kwong, [11](#)
- Regras de Combinação
  - clássica, [14](#)
  - conformal, [15](#)

Regras de combinação, 14

Regras de Mistura, 14  
clássica, 14

Símbolos e Convenções, vii

Simulação

importância da, 2

Soave Redlich-Kwong, 11  
assimétrica, 12

Suporte, vi

van der Waals, 10

VRTherm

aplicações, 3

banco de dados, 3

direitos autorais, v

Excel, 22

instalação, 4

Interface gráfica, 20

MatLab, 31

modelos, 40

o que é, 2

propriedades, 40

usando, 38