**Universidade de São Paulo**

**Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos**

# Departamento de Engenharia de Alimentos

**ZEA0564 – FÍSICO-QUÍMICA (DIURNO E NOTURNO)**

**TRABALHO EM GRUPO (TG) – enunciado disponibilizado em 13/06/2023**

**TIPO 2: R600(1)/R245fa(2) a 323.15 K**

**Fonte de dados de ELV: Yang, L. et al. (2016). Isothermal (vapour + liquid) equilibrium measurements and correlation for the {n-butane (R600) + 1,1,1,3,3-pentafluoropropane (R245fa)}**

**system at temperatures from (303.150 to 373.150) K. Journal of Chemical Thermodynamics, 95, 49-53.**

***Data de entrega (máxima): até 05/07/2022 – no Moodle***

***Horário: até 23:59 h (sem possibilidade de extensão de prazo)***

***Fazer o trabalho em TRIOS***

***(na impossibilidade, fazer em duplas, mas somente em último caso!)***

**Ajustes de modelos de Energia Livre de Gibbs em Excesso utilizando o software Thermosolver – Equilíbrio Líquido-Vapor**

Utilizando o conjunto de dados de ELV disponibilizado para o seu grupo, faça os ajustes do modelo de energia livre de Gibbs em excesso usando o modelo NRTL. Expresse os dados obtidos a partir dos modelos de G em excesso para as propriedades da fase líquida - resultados de GE/RT e ln γi - através de gráficos, confrontando dados experimentais e obtidos pelos modelos. Construa também o diagrama P-x-y, também confrontando dados experimentais e obtidos pelo modelo.

Compare os dados modelados com os dados experimentais. Além disso, compare os dados experimentais com os resultados obtidos pelo ajuste feito no artigo.

 Faça uma avaliação do ajuste dos modelos através de gráficos de desvios (de pressão e de fração molar do componente 1 na fase vapor) *vs*. x1. Compare com os desvios obtidos pela modela gem usada no artigo.

**O TG deve ser entregue em um único *arquivo Excel (e só Excel)*. Coloque cada modelagem em uma aba diferente, e as discussões e conclusão final em uma aba separada das modelagens. Justifique todas as suas afirmações!!!!!!!!**

**Roteiro sugerido para a execução do trabalho:**

***Introdução: Qual a importância de se estudar o comportamento do ELV das duas substâncias (R32 e propano)?***

**Parte 1: Pesquisa e organização dos dados experimentais**

* Download do programa Thermosolver (software gratuito para ajuste de dados termodinâmicos disponibilizado pelo Dr. Koretsky, autor de um dos nossos livros-texto) e familiarização com seu uso.

<https://cbee.oregonstate.edu/education/Thermosolver/>

* Organize a planilha para o cálculo das propriedades da fase líquida. Faça o cálculo dos coeficientes de atividade pela Lei de Raoult modificada, e de G em excesso **experimentais** pelo modelo NRTL.

**Parte 2: Modelagem com os modelos de G em excesso – Thermosolver**

* **Atenção: o Thermosolver exige que o separador de decimal seja PONTO. Se vc está com a configuração do seu computador e/ou Excel como VÍRGULA, mude para ponto. Caso contrário, o programa não rodará corretamente.**
* Calcule as propriedades da fase líquida utilizando os modelos de G em excesso na planilha fornecida
* Faça o cálculo dos coeficientes de atividade e de G em excesso modelados
* Faça o cálculo dos valores de Pmod, y1mod e y2mod
* Construa os gráficos GE/RT *vs*. x1. e ln γi *vs*. x1, confrontando dados experimentais e obtidos pelos modelos.
* Construa também o diagrama P-x-y, confrontando dados experimentais e obtidos pelo modelo NRTL.
* Faça uma avaliação do ajuste do modelo através de gráficos de desvios (de pressão e de fração molar do componente 1 na fase vapor) *vs*. x1, através da análise dos desvios dos dados modelados.

**Parte 3:**

* Escreva suas conclusões sobre os modelos utilizados. O modelo se ajustou aos dados? Por que sim ou não?
* Faça um gráfico único com os dados de desvios de P e outro para os desvios de y1, para visualizar melhor o que acontece com os valores de desvio conforme o modelo para fase líquida se torna mais sofisticado do ponto de vista físico.
* Qual a diferença entre os modelos que seu grupo usou e o modelo usados por Yang et al. (2016)? Pode-se considerar que os autores conseguiram uma modelagem melhor que a sua? Justifique.