

## USO DO PYTHON COMO FERRAMENTA DE ENSINO DE TERMODINÂMICA

DOI: 10.37702/2175-957X.COBENGE.2023.4649

Admilson Lopes Vieira - lopesvieira@utfpr.edu.br  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Lisandra Ferreira de Lima - lisandra@utfpr.edu.br  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

**Resumo:** *O presente trabalho teve como objetivo desenvolver um código computacional em Python para estimativas de propriedades termodinâmicas utilizando equações de estado. O algoritmo desenvolvido permite a estimativa do volume molar, fator de compressibilidade, entalpia e entropia entre dois estados termodinâmicos de um gás puro. Foi desenvolvida uma interface gráfica para facilitar a visualização dos dados. Os dados foram testados exaustivamente com base na literatura. O resultado final foi uma ferramenta de fácil e rápida utilização, com alta confiabilidade para servir tanto como facilitador do processo ensino aprendizagem de conceitos Termodinâmicos como ferramenta para solução de problemas industriais.*

**Palavras-chave:** python, termodinâmica, engenharia química

# USO DO PYTHON COMO FERRAMENTA DE ENSINO DE TERMODINÂMICA

## 1 INTRODUÇÃO

A Termodinâmica na Engenharia Química é utilizada para solução de inúmeros problemas industriais, como é o caso de dimensionamento ou análise de segurança em tanques para confinamento de fluidos, cálculos energéticos em equipamentos de fluxo e cálculos de propriedades termodinâmicas da matéria prima ou do produto. Na contramão da sua relevância, ela é preterida pela grande parte do corpo discente. Isto se justifica pelas dificuldades de assimilação devido alta complexidade física e matemática dos conceitos envolvidos.

Acredita-se que o desenvolvimento de uma articulação lógico-dedutiva entre os conceitos, as idealizações, as hipóteses, as convenções e as relações inferidas em um problema Termodinâmico sejam capazes de descrever, classificar ou até mesmo avaliá-los de maneira mais ativa e crítica. Desta forma, propor mecanismos para que os alunos, a partir de uma análise física do problema, desenvolvam procedimentos matemáticos de maneira mais rápida e, possam dedicar a maior parte do tempo na estruturação e na análise dos resultados que suas considerações iniciais provocaram, parece ser uma boa estratégia para esta articulação.

Acredita-se que o uso de linguagem computacional possibilita uma solução rápida, a realização de problemas mais realísticos, além de auxiliar na criatividade, no desenvolvimento de raciocínio lógico analítico no aluno e estratégia assíncrona de aprendizagem.

Propriedades residuais são propriedades termodinâmicas que medem quão diferente é o comportamento de um gás puro em relação ao comportamento esperado em condições idealizadas. São de extrema relevância para análise de problemas de fluidos confinados, ou em que há mudança de fase, ou mesmo para cálculo de equipamentos de potência.

A modelagem para cálculo das propriedades residuais, utilizando equação de estado adequadas (EOS) se mostram muito adequadas para predição destas propriedades. No entanto, quanto maior a complexidade matemática do modelo termodinâmico, mais dificultoso e entediante torna-se o cálculo analítico destas propriedades, sendo assim, o uso de implementação para solução de problemas desta natureza, parece convergir do ponto de vista educacional e tecnológico.

O Python tem se popularizado muito, tanto no meio acadêmico (GUO, 2014; PERKEL, 2015) como na indústria (PYTHON, 2017). O crescimento na utilização desta linguagem se deve a sua simplicidade e a facilidade em se aprender a programar, principalmente quando comparada às linguagens Java e C, resultando em um código limpo e legível (PYTHON, 2017; MENEZES, 2010; BEAZLEY e JONES, 2013). Além disso, possui uma licença de código aberto que pode ser usada livremente até mesmo para fins comerciais.

Em síntese, o objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um algoritmo em Python a ser utilizado como ferramenta para estimativa de propriedades residuais, que poderá ser utilizado tanto como ferramenta educação mediada por tecnologia, sendo capaz de estimar valores de propriedades termodinâmicas.

## 2 METODOLOGIA

O algoritmo é estruturado de forma que é necessário que o usuário insira as propriedades físicas da substância, estados termodinâmicos inicial e final do sistema e equação de estado a ser utilizada. Os cálculos são feitos utilizando a equação de estado escolhida pelo usuário como modelo para a substância cujas propriedades físicas foram inseridas. Dessa forma, são calculadas as propriedades residuais nos estados inicial e final, através de equações apresentadas na disciplina de Termodinâmica de cursos de Engenharia Química (Smith, 2007; Lira, 2012) e a variação dessas propriedades entre os estados inicial e final considerando idealidade. Então, os valores calculados são apresentados através de uma interface gráfica. A metodologia geral de cálculo é esquematizada no fluxograma está descrita na Figura 1:

Figura 1 – Fluxograma esquemático da utilização do algoritmo



Fonte: autoria própria

Foi desenvolvida uma interface gráfica utilizando a biblioteca Tkinter do Python para facilitar a utilização do algoritmo. A Figura 2 mostra a interface quando o algoritmo é iniciado. Os campos brancos devem ser preenchidos pelo usuário e os valores calculados são mostrados nos campos cinza.

Figura 2 – Interface gráfica quando o algoritmo é inicializado.

Considerações:  
 $C_p = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^{-2} + E \cdot T^3$

Equações de Estado:  
 1 - VdW  
 2 - RK  
 3 - SRK  
 4 - PR  
 5 - Virial com 2 coeficientes  
 6 - Virial com 3 coeficientes

Resultados:

Equação de estado usada:  Equação:

		Ponto 1:		Ponto 2:		Gás Ideal:		Soma:	
Tc/K	<input type="text" value="0.0"/>	$V_{m1}/(m^{**3}/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$V_{m2}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$V_{mgi}/(J/mol.K)$	Não calculado	-	Sem sentido físico
Pc/bar	<input type="text" value="0.0"/>	z1	<input type="text" value="0.0"/>	z2	<input type="text" value="0.0"/>	zgi	1	-	Sem sentido físico
w	<input type="text" value="0.0"/>	$H_{r1}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$H_{r2}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$H_{gi}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$H/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>
A	<input type="text" value="0.0"/>	$S_{r1}/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>	$S_{r2}/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>	$S_{gi}/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>	$S/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>
$Bx10^{**3}$	<input type="text" value="0.0"/>	$G_{r1}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$G_{r2}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$G_{gi}/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>	$G/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>
$Cx10^{**6}$	<input type="text" value="0.0"/>	$A_{r1}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$A_{r2}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$A_{gi}/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>	$A/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>
$Dx10^{**5}$	<input type="text" value="0.0"/>	$U_{r1}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$U_{r2}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$U_{gi}/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>	$U/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>
$Ex10^{**9}$	<input type="text" value="0.0"/>	$V_{r1}/(m^{**3}/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$V_{r2}/(J/mol)$	<input type="text" value="0.0"/>	$V_{gi}/(J/mol.K)$	<input type="text" value="0.0"/>	-	Sem sentido físico
Número da equação de estado	<input type="text" value="0.0"/>	Calcular							

Fonte: autoria própria

Os campos da coluna 1 devem ser preenchidos com as informações necessárias, sendo que T1 e P1 se referem às condições no ponto inicial, e T2 e P2, no ponto final. Nas colunas 2 e 3 serão apresentados os valores das propriedades calculados pelo algoritmo, enquanto na coluna 4 serão apresentadas as variações das propriedades que um gás ideal sofre entre os estados termodinâmicos referentes aos pontos 1 e 2. A última coluna apresenta a variação total das propriedades entre os pontos 1 e 2.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este programa pode ser utilizado tanto para a análise de resultados e escolha do método adequado para cálculo das propriedades termodinâmicas quanto pode ter sua rotina computacional alterada quando o aluno necessitar de outros dados ou especificações, uma vez que tem sua escrita em código aberto.

Para avaliar a concordância das estimativas do algoritmo desenvolvido com a literatura, foram realizados cálculos de propriedades residuais de diversas substâncias químicas, em vários estados termodinâmicos. Os resultados obtidos através do algoritmo foram comparados com os valores reportados por Smith et al. (2007).

Na Tabela 1 são apresentadas a substância, a propriedade a ser analisada e a equação de estado utilizada para o cálculo e os valores obtidos pelo programa em comparação com o valor reportado.

Tabela 1 – Cálculo das propriedades termodinâmicas pelo programa desenvolvido

Número	Propriedade	EOS	Smith et al. (2007)	Valor Calculado
Butano (500K, 50 bar)	Z	VdW	0,6608	0,6599
Etileno (300K e 35 bar)	H <sup>R</sup>	RK	-1764,00	-1768,50
	S <sup>R</sup>		-4,1200	-4,1304

Verifica-se que os valores obtidos pelo algoritmo desenvolvido estão em excelente concordância com os reportados pelas referências adotadas. As discordâncias podem ser devidas a imprecisões numéricas, diferentes métodos numéricos utilizados e diferentes valores de propriedades físicas de cada substância utilizados para os cálculos do algoritmo.

Estes resultados foram apresentados apenas como demonstração de validade do programa, mas durante as aulas pode ser utilizado para contextualizar em relação ao efeito da pressão em e as forças atrativas da substância, a validade de considerações de idealidade para substâncias com pressões próximas as atmosféricas, confronto com dados da tabela de vapor e análise, dentre outras abordagens. Tornando a aula mais dinâmica e elucidativa.

## 4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Dessa forma, foi desenvolvido com sucesso um algoritmo em Python que calcula volume molar, fator de compressibilidade, propriedades residuais entalpia e entropia em uma dada condição de temperatura e pressão, variação total de entalpia e entropia entre dois estados termodinâmicos de um gás puro. O algoritmo fornece estimativas confiáveis, condizentes com a literatura e permite o cálculo de forma fácil, através da interface gráfica.

O programa pode ser manipulado pelos alunos e utilizado como ferramenta de compreensão física do comportamento termodinâmico das substâncias.

A fácil visualização e utilização e alta confiabilidade dos dados apresentados também possibilita a sua utilização projetos de pesquisa e em problemas de projetos industriais.

## AGRADECIMENTOS

Agradecemos a UTFPR por todo apoio e suporte financeiro.

## REFERÊNCIAS

PYTHON. **The official home of the Python Programming Language**. Disponível em <<https://www.python.org/>>. Acesso em: 23 jun. 2022

GUO, P. **Python is Now the Most Popular Introductory Teaching Language at Top U.S. Universities**. Communications of the ACM 7 July. <https://cacm.acm.org/blogs/blog-cacm/176450-python-is-now-the-most-popular-introductory-teaching-language-at-top-u-s-universities/fulltext>. Acesso em 23 jun. 2021.

MENEZES, N. N. C. **Introdução à programação com Python: algoritmos e lógica de programação para iniciantes**. São Paulo: Novatec, 2010. 222 p. ISBN 9788575222508

BEAZLEY, D.; JONES, B. K. **Python cookbook**. São Paulo: Novatec, 2013. 719 p. ISBN 9788575223321.

PERKEL, J. M. Pick Up Python. **Nature**, v. 518, n. 7537, p. 125, 2015.

SMITH, J.M., VAN NESS, H.C., ABBOTT, M.M., **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**, 7ª edição, Editora LTC, 2007.

## INSTRUCTIONS FOR PREPARATION AND SUBMISSION OF MANUSCRIPTS TO THE SCIENTIFIC COMMITTEE OF THE 51º BRAZILIAN CONGRESS ON ENGINEERING EDUCATION AND VI INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON EDUCATION IN ENGINEERING – COBENGE 2023

**Abstract:** *This work aim is to develop a computational code in Python to estimate thermodynamic properties using equations of state. The developed algorithm allows the estimation of molar volume, compressibility factor, enthalpy and entropy between two thermodynamic states of a pure gas. A graphical interface was developed to facilitate data visualization. The data was carefully tested based on the literature. The result was an easy and fast tool, with high reliability, to serve both as a facilitator of the teaching-learning process of thermodynamic concepts and a tool for solving industrial problems.*

**Keywords:** *python, thermodynamics, chemical engineering*