



## DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE PARA CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMO-FÍSICAS POR MÉTODOS DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPO

Marcelo F. Leal, Lucinewton S. Moura (Orientador - doutorando), Raul N. Carvalho-Junior (Orientador - doutorando) e Profa. Dra. M. Angela A. Meireles (Orientadora), Faculdade de Engenharia de Alimentos - FEA, UNICAMP

Para a descrição do equilíbrio de fases de substâncias termo-sensíveis a baixas e altas pressões, utilizando equações de estado cúbicas, são necessárias informações experimentais das propriedades termo-físicas das substâncias puras. A determinação experimental destas propriedades é difícil devido à sensibilidade térmica. Dentre as substâncias podemos mencionar os constituintes de alguns extratos naturais, como óleos essenciais, oleoresinas e etc. Logo, o uso de métodos de predição de propriedades termo-físicas é uma alternativa à sua determinação experimental. Neste trabalho foi desenvolvido um software para Windows intitulado 'TermoFis' em linguagem de Programação Pascal em ambiente DELPHI 1.0, com o objetivo de proporcionar ao usuário maior facilidade no uso dos diversos métodos preditivos. A interface gráfica é bem simples e organizada de tal forma que o acesso às rotinas de cálculo do programa é rápido. O programa consiste em uma plataforma inicial, na qual o usuário decidirá com qual propriedade termo-física e qual método irá trabalhar. Estão disponíveis sub-rotinas para cada um dos vinte métodos de cálculos utilizados: Lyndersen (1955); Klincewics e Reid (1984); Lin e Chao (1984); Tsibanogiannis *et al.* (1985); Willman e Teja (1985); Joback e Reid (1987); Somayajulu (1989); Peisheng *et al.* (1990); Vetere (1991); Dohrn (1992); Pretel *et al.* (1992); Hang e Peng (1993); Dohrn (1994); Constantinou e Gani (1994); Gani e O'Connell (1995); Correlação de Edmister's (1994); Sastri *et al.* (1994); Tu (1995); Ourique (1997); Riazi *et al.* (1998). Os métodos foram, por sua vez, classificados como métodos que requerem: i) valores experimentais da temperatura normal de ebulição ( $T_b$ ); ii) valores experimentais da temperatura de fusão ( $T_f$ ). O usuário fornece os dados necessários e os grupos funcionais requeridos e obtém as seguintes propriedades termo-físicas: ii) temperatura, pressão e volume críticos  $T_c$ ,  $P_c$  e  $V_c$ , respectivamente; iii) pressão de vapor ( $P_v$ ); e iii) fator acêntrico ( $w$ ).

Software - Termo-físicas - Cálculo