



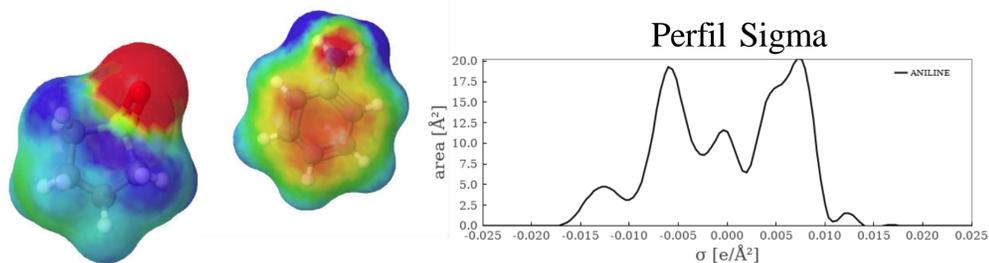
Aumento do poder preditivo do modelo COSMO-SAC-Phi pela remoção de um de seus parâmetros

Bruno Calixto Redin, Rafael de Pelegrini Soares
Laboratório Virtual de Predição de Propriedades
Departamento de Engenharia Química - UFRGS



INTRODUÇÃO

A partir da teoria de superfície de contatos COSMO-RS¹, o modelo COSMO-SAC-Phi² consegue prever dados de equilíbrio de misturas com considerável sucesso. No entanto, o modelo envolve 4 parâmetros que precisam ser estimados com dados experimentais de substâncias puras. Estes dados nem sempre estão disponíveis, principalmente os de volume de saturação. Então, nesse trabalho, propõe-se um método alternativo para estimar os parâmetros do COSMO-SAC-Phi, tornando possível sua aplicação em casos de limitação de dados experimentais.



METODOLOGIA

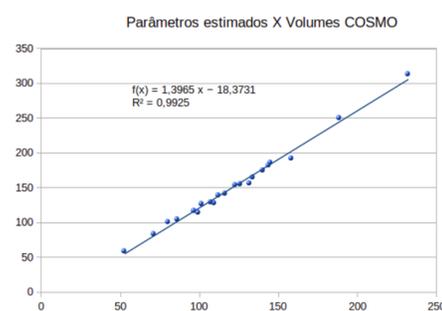
Estimativa dos parâmetros com o programa sem alterações

Comparação do parâmetro de volume com os volumes previstos pelo COSMO

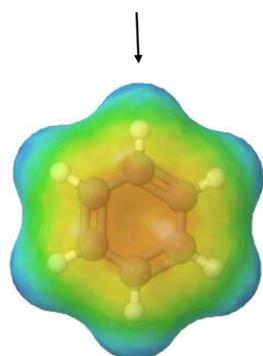
Estimativa do parâmetro de volume com o auxílio da equação isolada

Uso no programa do novo parâmetro de volume encontrado.

O programa só precisa ajustar 3 parâmetros

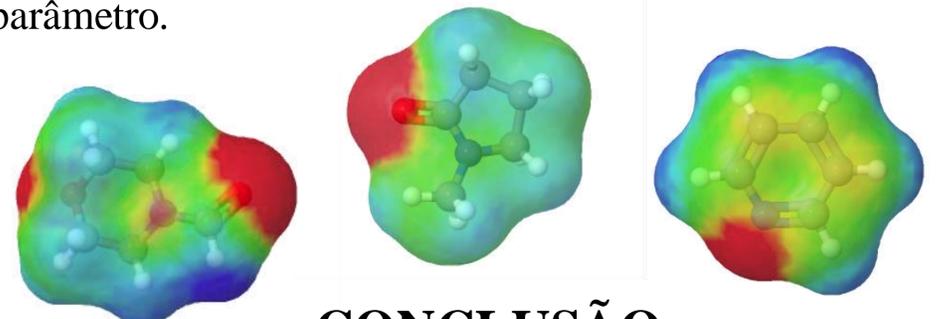


Volume COSMO



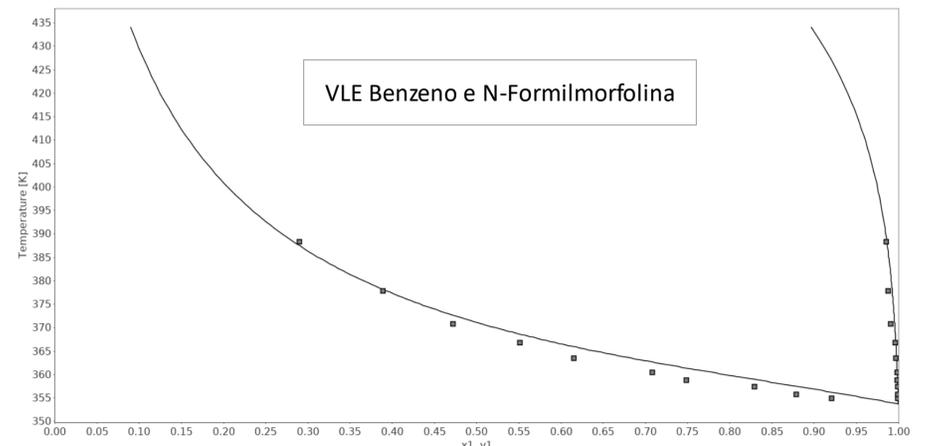
RESULTADOS E DISCUSSÕES

Obteve-se uma alternativa para a estimativa dos parâmetros, em casos com ausência de dados experimentais para volume de saturação das substâncias puras. Observou-se, também, que não houve uma piora significativa nas previsões para substâncias puras, mostrando que a reta foi de fato útil, e que os resultados não são comprometidos quando removemos um parâmetro.



CONCLUSÃO

Ao usarmos uma aproximação baseada no modelo COSMO para prever o parâmetro de volume usado no COSMO-SAC-Phi, conseguimos contornar um problema de ausência de dados de volume de saturação, comuns para algumas substâncias, e ainda sim não comprometer a qualidade dos resultados.



REFERÊNCIAS

- [1] Andreas Klamt, Conductor-like screening model for real solvents: a new approach to the quantitative calculation of solvation phenomena, *J. Phys. Chem.* 99 (7) (feb 1995) 2224e2235.
[2] de P. Soares, Rafael; Baladão, Luis F.; Staudt, Paula B., A pairwise surface contact equation of state: COSMO-SAC-Phi, *Fluid Phase Equilibria*, 2019, p. 13-26.