

Ensino de equilíbrio de fases para sistemas não ideais através da interface JCosmo

E.Y. de Oliveira, R. de P. Soares

Introdução

O estudo de coeficientes de atividade é uma tarefa fundamental para processos de separação, já que eles são necessários para o cálculo do equilíbrio de fases. Através do correto equilíbrio de fases, torna-se muito mais rápido e preciso o dimensionamento de operações de separação. A motivação deste trabalho é apresentar uma ferramenta computacional que utiliza a mecânica quântica para determinar de forma preditiva os coeficientes de atividade para misturas, apresentando um contraponto aos métodos experimentais, que apesar de obter melhores resultados, apresentam muitas limitações quando comparados ao método computacional.

A ferramenta desenvolvida para os cálculos mencionados é a interface gráfica JCosmo. Esta ferramenta utiliza o modelo COSMO-SAC com os pacotes

termodinâmicos MOPAC ou GAMESS para calcular os coeficientes de atividade de uma mistura binária. A interface ainda apresenta outras funções como apresentar o perfil sigma, o equilíbrio líquido-vapor (ELV) gerado por estes coeficientes e as cargas superficiais das moléculas, que foram levadas em conta nos cálculos.

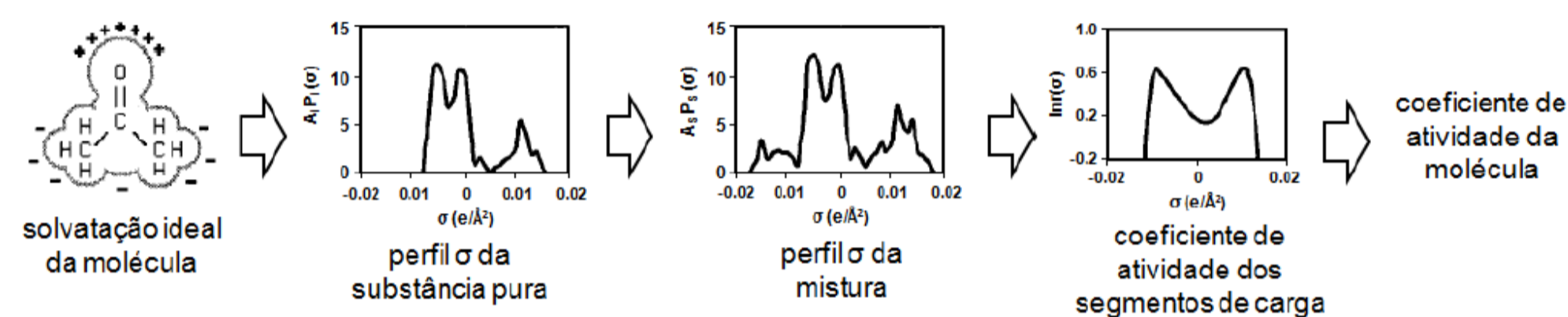
Os resultados obtidos nos cálculos foram muito satisfatórios e é possível comparar no próprio JCosmo os dados experimentais com os resultados preditivos. A qualidade desses resultados leva a concluir que o método preditivo aqui apresentado tem potencial de substituir os métodos mais empíricos.

Ferramenta JCOSMO e o modelo COSMO-SAC

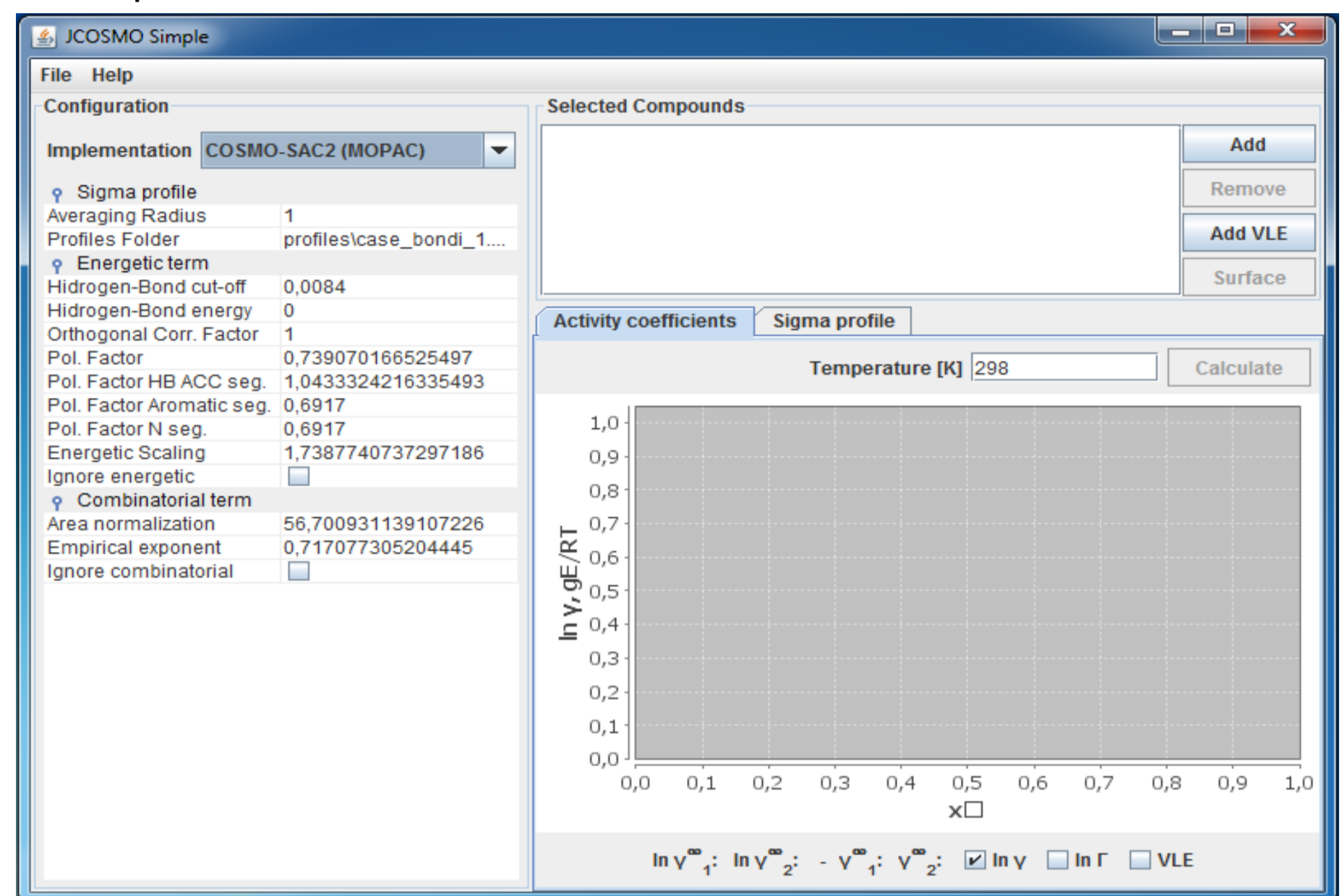
A ferramenta JCOSMO é capaz de utilizar diferentes modelos COSMO-SAC com a finalidade de se calcular os coeficientes de atividade de uma solução. A partir dos coeficientes, é possível se determinar o equilíbrio líquido-vapor de uma mistura.

Também podem ser obtidas comparações com dados experimentais e visualizar-se o perfil sigma tanto na forma de gráfico quanto o seu valor na superfície da molécula.

Representação esquemática do modelo COSMO-SAC:



Exemplo da interface JCOSMO:



Resultados

Primeiramente a ferramenta calcula os valores de sigma, utilizando o modelo COSMO-SAC determinado pelo usuário. Partindo destes, são calculados os coeficientes de atividade, que resultam nos ELVs. No caso apresentado nas figuras é possível analisar o erro qualitativamente do modelo comparado com dados experimentais.

As figuras mostram as principais funcionalidades da interface. Pode-se observar os gráficos mostrando os coeficientes de atividade, os gráficos de perfil sigma, os ELVs e as superfícies coloridas, que se baseiam no valor do perfil sigma.

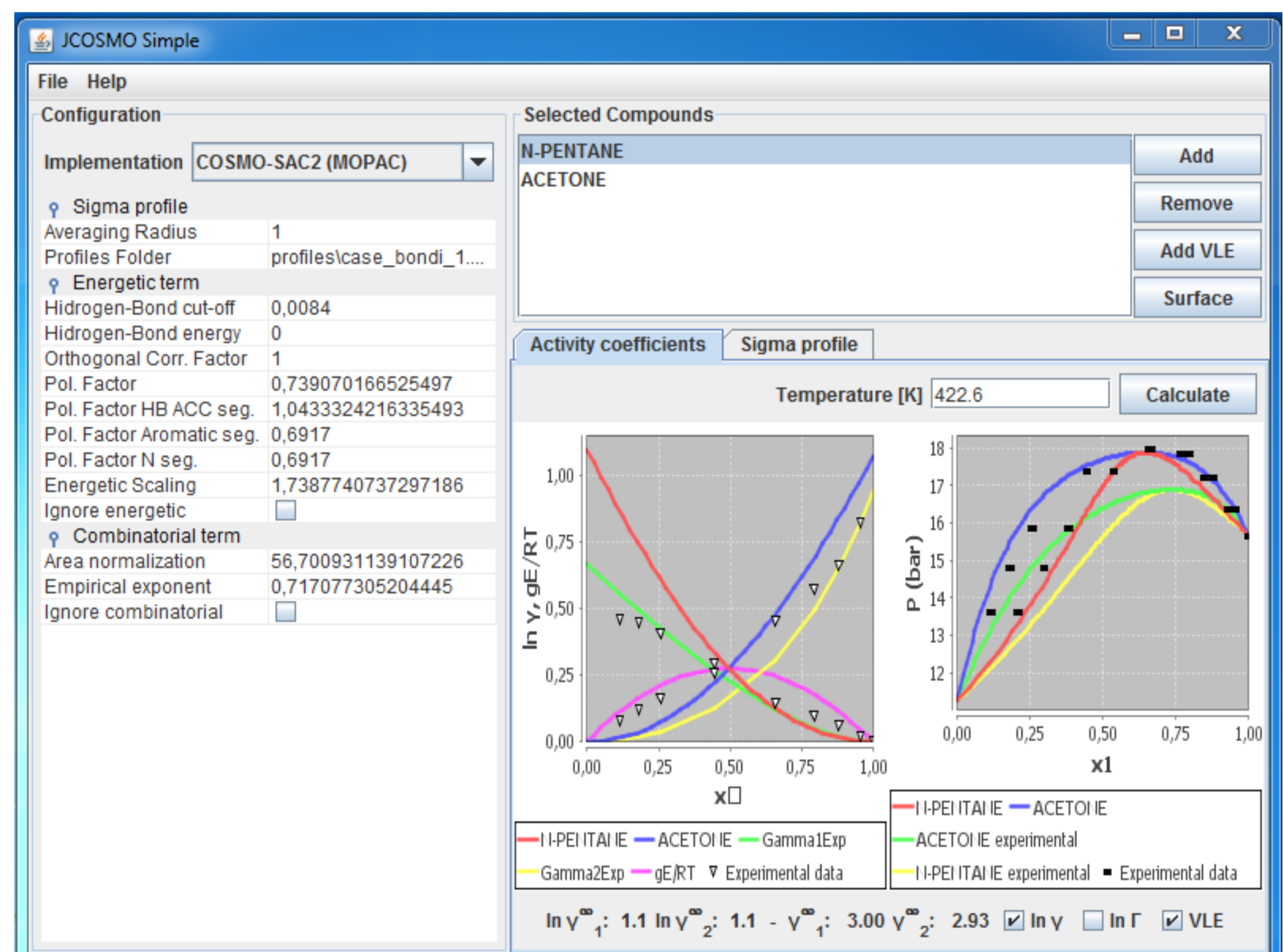
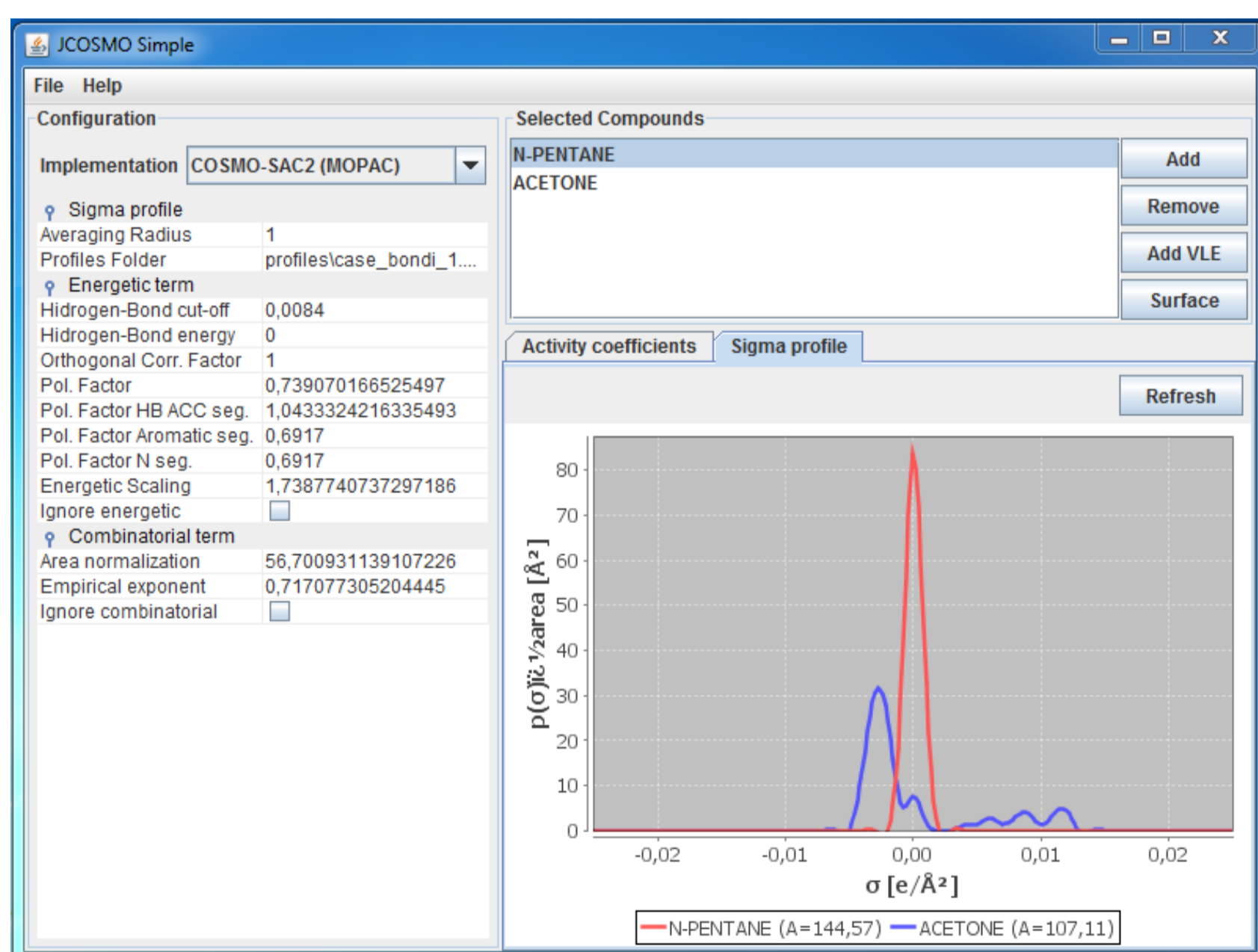
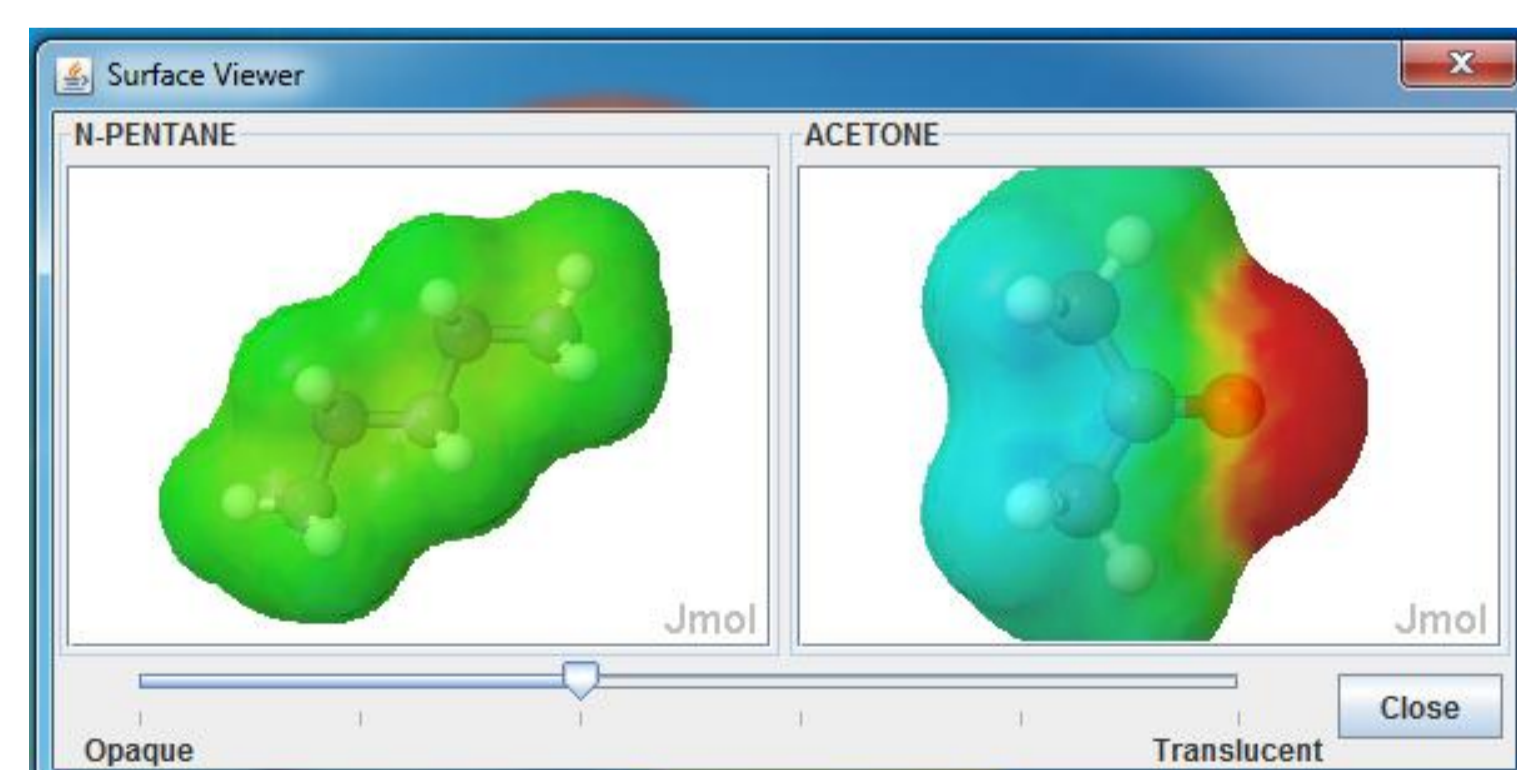


Gráfico ilustrando o valor do coeficiente de atividade (esquerda) e o gráfico ilustrando o ELV (direita) para a mistura de N-Pentano + Acetona



Perfil sigma para a mistura de N-Pentano + Acetona



Perfil sigma dos componentes

Conclusões

A interface JCOSMO apresenta várias funções que permitem o usuário analisar diversos aspectos de uma mistura, utilizando o modelo COSMO-SAC. Apesar de não possuir ainda uma análise quantitativa com os dados experimentais para medir a qualidade da predição, os resultados qualitativos são promissores.

Para alguns casos, os dados da predição desviam muito do valor real, o que cria uma demanda por melhoramentos no modelo COSMO-SAC também.



GIMSCOP
grupo de intensificação, modelagem, simulação, controle e otimização de processos

Autor: Eduardo Yatudo de Oliveira

Orientador: Rafael de Pelegrini Soares

Departamento de Engenharia Química - UFRGS
Rua Luis Englert, s/n. Porto Alegre, RS.
CEP: 90040 - 040
e-mails: eduardoy@ufrgs.br / rafael@enq.ufrgs.br
FONE: (51)3308-4166 / (51)3308-3528

