



DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS PARA MODELOS TERMODINÂMICOS DE ATIVIDADE ATRAVÉS DO UNIFAC POR REGRESSÃO NÃO-LINEAR.

Raphael Magalhães de Oliveira Nascimento¹, Antônio Tavernard Pereira Neto ²

RESUMO

É conhecido na literatura que para determinação do equilíbrio líquido-vapor de misturas com um elevado desvio da idealidade na fase líquida é necessário o uso de um fator de correção que é chamado de coeficiente de atividade. Logo, para encontrar o valor desse coeficiente utiliza-se modelos termodinâmicos de atividade, por meio de várias opções de fórmulas, que necessitam de parâmetros experimentais em suas equações. Porém, nem sempre se tem conhecimento desses parâmetros para qualquer tipo de substância. O intuito desse trabalho é que a partir de um modelo que já é disponível todos os valores experimentais para componentes orgânicos, UNIFAC, gerar os parâmetros de outros modelos termodinâmicos, como NRTL, através de regressão não linear no software MATLAB[®]. A presente metodologia é usada pelos simuladores comerciais como ASPEN, PRO II, etc. quando não há dados experimentais entre os pares de componentes usados na simulação

Palavras-chave: Coeficiente de atividade, UNIFAC, NRTL.

¹Aluno de Engenharia Química, Unidade Acadêmica de Engenharia Química, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: raphael.magalhaes@eq.ufcg.edu.br

²Doutor, Professor, Unidade Acadêmica de Engenharia Química, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: tavernard@eq.ufcg.edu.br

DETERMINATION OF PARAMETERS OF THERMODYNAMIC MODELS OF ACTIVITIES FROM UNIFAC BY NON-LINEAR REGRESSION

ABSTRACT

It is known that the vapor-liquid equilibria calculations of mixtures with high non-idealities in the liquid phase it is necessary to use a correction factor known as activity coefficient. Model for the excess Gibbs energy of the mixture can be used to compute the value of said coefficient, using experimental data available for each compound. However, many compounds lack these data, preventing us to use most of these models. In this work, we use the UNIFAC model, which has experimental data available for most the organic compounds, to generate the parameters required by other models, such as NRTL, through the usage of nonlinear regression. Commercial software like Aspen Plus and PRO II apply this methodology when no experimental data are available.

Keywords: Activity Coefficient, UNIFAC, NRTL.