



Conectando vidas
Construindo conhecimento

CONHECIMENTO FORMACÃO INOVAÇÃO
Salão UFRGS 2021

XVII SALÃO DE ENSINO

27/09 a 1/10
VIRTUAL

Evento	Salão UFRGS 2021: XVII SALÃO DE ENSINO DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Alternativas de calibração para os parâmetros do programa de predição de propriedades COSMO-SAC-Phi
Autor	BRUNO CALIXTO REDIN
Orientador	RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

Título: ALTERNATIVAS DE CALIBRAÇÃO PARA OS PARÂMETROS DO PROGRAMA DE PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES COSMO-SAC-PHI.

Autor: Bruno Calixto Redin

Orientador: Rafael de Pelegrini Soares

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Departamento: Escola de Engenharia

O crescente uso de programas de simulação de processos requer uma boa base de predição de propriedades de mistura. Assim, o aprimoramento de programas de predição de propriedades de mistura se faz necessário. Então, este trabalho tem o objetivo de tornar o programa de predição de propriedades de mistura COSMO-SAC-Phi adaptado ao uso em situações reais. O programa funciona baseado na metodologia COSMO, e com a adição de 4 parâmetros, sendo eles: R_k , que representa o volume expresso em \AA^3 ; b_h , que representa um volume livre para a substância; δ e δT , que juntos formam uma equação de dispersão, dependente da temperatura. A metodologia COSMO fornece, a partir do cálculo das superfícies de cargas de uma molécula, as forças de interação eletrostáticas entre duas moléculas, ao passo que os 4 parâmetros mencionados, complementam este cálculo para que seja possível encontrar as forças de interação total entre estas moléculas, permitindo o cálculo do coeficiente de atividade em mistura, e por consequência, propriedades de mistura. No entanto, para que estes parâmetros funcionem para cada substância, é necessária a calibração deles, e para isto se usam dados experimentais de pressão e volume de saturação, das substâncias puras. Como a aplicação para muitas simulações reais envolve substâncias que carecem de dados experimentais destas propriedades, estudaram-se métodos alternativos para a calibração dos parâmetros R_k e b_h . Para os casos do parâmetro R_k , descobriu-se que ele se relaciona bem com o volume associado à superfície de cargas obtida pelo modelo COSMO, de modo que pode-se obter uma boa estimativa do parâmetro R_k a partir deste volume. Já para o parâmetro b_h , mesmo com o auxílio de programas de inteligência artificial, até o presente momento não foi encontrado um padrão óbvio para o parâmetro.