

IMPLEMENTAÇÃO AUTOMÁTICO DO TERMO DE ASSOCIAÇÃO NAS EQUAÇÕES SAFT E PC-SAFT USANDO THERMATH

*J. L. S. AMARAL¹, P. M. NDIAYE², M. CASTIER³

¹Aluno do DEQ/UFPR ²Professor do DEQ/UFPR ³Professor do DEQ/EQ-UFRJ
Departamento de Engenharia Química - Universidade Federal do Paraná
Caixa Postal 19011
81.531-890 – Curitiba-PR
e-mail: papa@ufpr.br

As equações de estado SAFT (Statiscal Associating Fluid Theory) e PC-SAFT (Perturbed Chain-Statiscal Associating Fluid Theory) são baseados na teoria de perturbação termodinâmica de Wertheim e vêm sendo amplamente empregados na descrição do comportamento de fases de misturas assimétricos. As equações são dadas em termos da energia livre de Helmholtz que por sua vez possui uma contribuição de esferas duras, de cadeia, de dispersão e de associação. Uma das maiores dificuldades encontradas no uso destas equações é a implementação computacional do termo de associação onde comumente o caráter não linear da função que relaciona a fração de sítios não ligados a um determinado sítio central faz com que o termo de associação só pode ser calculado, impondo um modelo de fluido. No entanto os trabalhos de Michelsen (2006) mostram que o cálculo da fração de sítios não ligados a um determinado sítio pode ser abordado como um problema de minimização de uma determinada função. Neste trabalho os termos de associação das equações SAFT e PC-SAFT são implementadas com base nos trabalho de Michelsen usando o código computacional Thermath.

Referência Bibliográfica: Michelsen M.L. Robust and Efficient Solution Procedures for Association Models, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 45, 2006 8449-8453.

*Bolsista PET.