COEQ
CONGRESSO ONLINE
DE ENGENHARIA QUÍMICA

ISBN: 978-65-86861-56-3

MODELAGEM TERMODINÂMICA DO EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR (ELV) PARA A MISTURA N-HEPTANO/TOLUENO: COMPARAÇÃO COM DADOS EXPERIMENTAIS

Congresso Online de Engenharia Química, 1ª edição, de 09/11/2020 a 12/11/2020
ISBN dos Anais: 978-65-86861-56-3

FÉLIX; Jamyla Soares Anício Oliveira [1], SILVA; Mayara Teixeira [2], BORGES; Danielle Oliveira [3], ASSAD-FILHO; Alfredo [4], REIS; Miria Hespanhol Miranda [5]

RESUMO

Introdução: O sistema binário n-heptano/tolueno é uma mistura de interesse no setor petroquímico, sendo muito utilizada como solvente, por exemplo no subfracionamento e identificação dos constituintes dos asfaltenos. Em processos de separação, as equações de estado são normalmente empregadas em simulações de processos químicos e o conhecimento acerca do comportamento de um sistema de interesse é de relevante importância para adequação destas equações, afim de que descrevam satisfatoriamente o comportamento das misturas. Cada mistura tem suas particularidades, porém toda a predição de equilíbrio de fases parte da igualdade de fugacidades e, no caso de misturas de hidrocarbonetos, a formulação *phi-phi* é a termodinamicamente mais adequada para descrever o comportamento tanto da fase líquida quanto da fase vapor. Objetivo: O objetivo deste trabalho foi avaliar o desempenho de modelos termodinâmicos frente a dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor obtidos na literatura para uma mistura composta de n-heptano e tolueno. Método: Para realizar a avaliação dos modelos termodinâmicos foram simulados dados experimentais de um artigo que utilizou pressão constante, sendo elas de 400 mmHg, 200 mmHg, 100 mmHg e 50 mmHg. Foram conduzidas simulações com os modelos termodinâmicos utilizando as equações de estado (EOS) Soave-Redlich-Kwong (SRK), Redlich-Kwong (RK) e Peng-Robinson (PR) com Coco Simulator versão 3.4, afim de verificar qual modelo representaria melhor o comportamento da mistura. Foram utilizadas equações de estado para descrever tanto a fase vapor quanto a fase líquida (formulação *phi-phi*) devido à natureza da mistura, que é composta por dois hidrocarbonetos. Os resultados foram confrontados com as curvas de Bolha T e Orvalho T. Resultados: As curvas de bolha e orvalho do sistema binário composto por n-heptano e tolueno determinadas aplicando-se a equação de estado de RK apresentaram desvios consideráveis quando comparados aos dados experimentais encontrados na literatura em todas as pressões avaliadas. Assim, RK não foi um modelo adequado para descrever os dados experimentais dessa mistura. Por outro lado, quando foram utilizadas as equações de PR e SRK, as curvas apresentaram pequenos desvios na temperatura, indicando que tais modelos podem ser utilizados para representação do equilíbrio de fases deste sistema. Estes resultados podem ser justificados pelo fato de que os modelos de Peng-Robinson e Soave-Redlich-Kwong correlacionam melhor os seus parâmetros com a temperatura do sistema. Conclusões: Pode-se concluir que as equações de

[1] Universidade Federal de Uberlândia, jamyla_soares@hotmail.com
[2] Universidade Federal de Uberlândia, mayara.silva@ufu.br
[3] Universidade Federal de Uberlândia, danielle@ufu.br
[4] Universidade Federal de Uberlândia, alfredo.assad@ufu.br
[5] Universidade Federal de Uberlândia, miria@ufu.br

estado de Peng-Robinson e Soave-Redlich-Kwong são capazes de predizer o ELV do sistema binário composto por n-heptano e tolueno a baixas pressões. A abordagem *phi-phi* é uma boa escolha para determinação da consistência termodinâmica de dados experimentais nesses sistemas.

PALAVRAS-CHAVE: Equação de estado, Equilíbrio de fases, N-heptano, Termodinâmica, Tolueno.

[1] Universidade Federal de Uberlândia, jamyla_soares@hotmail.com
[2] Universidade Federal de Uberlândia, mayara.silva@ufu.br
[3] Universidade Federal de Uberlândia, danielle@ufu.br
[4] Universidade Federal de Uberlândia, alfredo.assad@ufu.br
[5] Universidade Federal de Uberlândia, miria@ufu.br