

MODELAGEM DO EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR DA MISTURA ACETONA–METANOL E APLICAÇÃO NA SIMULAÇÃO DE TANQUES FLASH ISOTÉRMICOS UTILIZANDO XSEOS

C. K. da Silva, E. A. Gomes, L. O. Lima, S. Wruck, C. N. Silva Junior, A. Zuber

*Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Francisco Beltrão, Brasil
(andrez@utfpr.edu.br)*

A modelagem termodinâmica do equilíbrio líquido-vapor (ELV) é fundamental para o projeto e a análise de operações de separação na indústria química. Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivo correlacionar dados experimentais de ELV da mistura acetona(1)–metanol(2) por meio do modelo de coeficiente de atividade NRTL, para posteriormente aplicar os parâmetros obtidos na simulação de um sistema de tanques flash isotérmicos em série implementado em planilha eletrônica. Foram utilizados dados experimentais isotérmicos a 328 K e isobáricos a 1 bar disponíveis na literatura. O ajuste dos parâmetros do modelo NRTL foi realizado com auxílio do suplemento XSEOS para Microsoft Excel, uma ferramenta computacional desenvolvida para cálculos de equilíbrio de fases e propriedades termodinâmicas por meio de equações de estado e modelos de Gibbs em excesso. Para minimizar os desvios entre os valores experimentais e calculados, empregou-se o Solver do Excel com o algoritmo GRG Não Linear. Os parâmetros obtidos foram $\alpha = 0,15$, $G_{12} = 1109,96 \text{ J mol}^{-1}$ e $G_{21} = 659,04 \text{ J mol}^{-1}$, resultando em desvios médios relativos de 0,59% para os dados isotérmicos e 0,39% para os dados isobáricos, indicando adequada representação do comportamento não ideal da mistura. Os parâmetros ajustados foram então empregados na implementação dos cálculos de equilíbrio líquido-vapor em uma planilha Excel para simulação de dois tanques flash isotérmicos operando em série, a partir da rotina iterativa de Rachford-Rice. Considerando uma alimentação de $10.000 \text{ mol h}^{-1}$ contendo 20% molar de acetona, o primeiro estágio operando a 325 K e 0,71 bar apresentou fração vaporizada de 0,50 e composição de acetona na fase vapor de 0,26. No segundo estágio, operando a 325 K e 0,73 bar, obteve-se fração vaporizada de 0,80 e composição de acetona na corrente de vapor de 0,29, promovendo o aumento da concentração de acetona na corrente de vapor em relação à alimentação original. Os resultados demonstram que a adequada correlação de dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor exerce influência direta na confiabilidade das simulações de processos de separação. Além disso, a integração entre o suplemento XSEOS e o Microsoft Excel mostrou-se uma alternativa acessível e de fácil utilização para a obtenção de parâmetros termodinâmicos e simulação de operações envolvendo misturas não ideais.

Palavras-chave: equilíbrio líquido-vapor; modelo NRTL; acetona-metanol; tanques flash; XSEOS.