

MODELAGEM DO EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR DA MISTURA ACETONA-METANOL PARA SIMULAÇÃO DE TANQUES FLASH ISOTÉRMICOS UTILIZANDO O 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
(caueklain@alunos.utfpr.edu.br)*

A modelagem do equilíbrio líquido-vapor da mistura acetona-metanol foi realizada pelo modelo NRTL, com ajuste de parâmetros no suplemento XSEOS para Microsoft Excel a partir de dados experimentais da literatura. Os parâmetros obtidos apresentaram desvios médios inferiores a 1%, sendo posteriormente empregados na simulação de tanques flash isotérmicos em série. Os resultados evidenciam a confiabilidade da modelagem termodinâmica e a aplicabilidade do XSEOS na simulação de processos de separação.

Palavras-chave: equilíbrio líquido-vapor; NRTL; acetona-metanol; tanque flash; XSEOS

INTRODUÇÃO

A predição do equilíbrio líquido-vapor (ELV) constitui uma das etapas fundamentais no desenvolvimento, projeto e otimização de processos de separação empregados na indústria química, uma vez que fornece as relações de equilíbrio necessárias para a análise, simulação e projeto de operações como destilação, evaporação e separação flash (Prausnitz et al., 1999; Smith et al., 2018). A confiabilidade dessas operações depende diretamente da capacidade dos modelos termodinâmicos em representar o comportamento de equilíbrio das misturas estudadas, especialmente quando envolvem soluções não ideais.

Para sistemas que apresentam desvios significativos da idealidade, modelos baseados em coeficientes de atividade são amplamente empregados para correlacionar dados experimentais de equilíbrio de fases. Entre esses modelos, o *Non-Random Two-Liquid* (NRTL), proposto por Renon e Prausnitz (1968), destaca-se pela elevada capacidade de representar sistemas líquidos não ideais, permanecendo como um dos modelos de coeficiente de atividade mais utilizados na correlação de dados de equilíbrio líquido-vapor e implementado nos principais simuladores comerciais de processos (Domańska, 2019; Labarta et al., 2022).

Embora a correlação de dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor constitua uma etapa clássica da modelagem termodinâmica, seu maior potencial está na utilização dos parâmetros obtidos como base para simulações de operações unitárias e análises de processos. Entre essas aplicações, destacam-se os cálculos de equilíbrio em tanques flash, nos quais a

determinação da fração vaporizada e da composição das fases depende diretamente da representação adequada do equilíbrio termodinâmico (Rachford e Rice, 1952; Seader et al., 2016). Dessa forma, imprecisões na correlação do ELV podem propagar-se ao longo das etapas subsequentes de simulação, influenciando a determinação das condições de equilíbrio e comprometendo análises de desempenho e decisões relacionadas ao projeto de processos.

Nesse contexto, ferramentas computacionais que disponibilizam implementações consolidadas de modelos termodinâmicos contribuem para tornar mais robusta a etapa de correlação de dados experimentais e obtenção de parâmetros de interação. O suplemento XSEOS (*Excess Gibbs Energy Models and Equations of State*), desenvolvido por Castier (2008) para Microsoft Excel, reúne implementações de diferentes equações de estado e modelos de energia de Gibbs em excesso amplamente empregados na Engenharia Química, reduzindo a necessidade de implementação individual dessas equações e permitindo que o desenvolvimento computacional seja direcionado às rotinas específicas de simulação de processos. Dessa forma, os parâmetros ajustados podem ser incorporados em algoritmos desenvolvidos para a resolução de problemas de processos, como os cálculos de equilíbrio em tanques flash (Castier e Ammer, 2011).

Diante desse cenário, o presente trabalho teve como objetivo modelar o equilíbrio líquido-vapor da mistura acetona-metanol por meio do modelo NRTL, utilizando dados experimentais disponíveis na literatura e o suplemento XSEOS para obtenção dos parâmetros termodinâmicos. Posteriormente, os

parâmetros ajustados foram incorporados a uma rotina computacional implementada em planilha eletrônica para simulação de tanques flash isotérmicos em série, buscando evidenciar como a qualidade da correlação termodinâmica influencia a confiabilidade das simulações empregadas na análise e no projeto de processos de separação.

MATERIAL E MÉTODOS

Sistema estudado e dados experimentais

A acetona e o metanol são amplamente empregados como solventes e reagentes nas indústrias farmacêutica e de química fina (Yi et al., 2005; Idrissi et al., 2013). Em razão de sua ampla aplicação industrial, misturas contendo esses compostos são frequentemente encontradas em processos de separação e purificação, tornando esse sistema uma escolha relevante para estudos de modelagem do equilíbrio líquido-vapor e simulação de operações de separação, como tanques flash.

O sistema binário acetona-metanol foi selecionado por apresentar comportamento significativamente não ideal, caracterizado pela formação de um azeótropo de máximo em pressão (ou mínimo em temperatura), sendo amplamente utilizado na avaliação de modelos termodinâmicos aplicados à correlação de dados de equilíbrio líquido-vapor (ELV).

Para a modelagem do sistema foram utilizados dois conjuntos independentes de dados experimentais disponíveis na literatura: dados isotérmicos obtidos por Freshwater e Pike (1967), à temperatura de 55 °C, e dados isobáricos reportados por Iliuta e Thyron (1995), à pressão de 101,32 kPa.

A utilização simultânea desses conjuntos experimentais, de natureza distinta, teve como objetivo a obtenção de um único conjunto de parâmetros de interação binária capaz de representar de forma consistente o comportamento de equilíbrio da mistura sob diferentes condições operacionais, contribuindo para a robustez da correlação termodinâmica.

Modelagem termodinâmica do equilíbrio líquido-vapor

O equilíbrio líquido-vapor (ELV) foi descrito com base na condição de igualdade de fugacidades entre as fases líquida e vapor. Considerando que os dados experimentais utilizados abrangem uma faixa de baixas pressões, incluindo condições atmosféricas e pressões reduzidas, adotou-se a abordagem ϕ - γ (coeficiente de fugacidade e coeficiente de atividade), assumindo comportamento ideal para a fase vapor ($\phi_i \approx 1$), uma vez que, nessas condições, os efeitos das interações intermoleculares na fase vapor são pouco significativos. Para a fase líquida, empregou-se a

convenção de Lewis-Randall, com negligência do fator de correção de Poynting, hipótese também válida para baixas pressões. Nessas condições, a relação de equilíbrio é expressa pela Lei de Raoult modificada:

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (1)$$

em que y_i e x_i representam as frações molares do componente i nas fases vapor e líquida, respectivamente, P é a pressão do sistema, γ_i é o coeficiente de atividade na fase líquida e P_i^{sat} é a pressão de saturação do componente puro.

A pressão de saturação foi calculada pela equação de Antoine:

$$\ln P_i^{sat} = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad (2)$$

em que A_i , B_i e C_i são parâmetros específicos de cada substância e T é a temperatura absoluta. Os parâmetros da equação de Antoine empregados nesta modelagem foram obtidos de Koretsky (2013) e são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros da equação de Antoine (P em bar, T em K).

Substância	A_i	B_i	C_i
Acetona	10,0311	2940,46	-35,93
Metanol	11,9673	3626,55	-34,29

A não idealidade da fase líquida foi representada pelo modelo Non-Random Two-Liquid (NRTL), proposto por Renon e Prausnitz (1968), cujas equações são apresentadas nas Eqs. (3-8) e foram implementadas no ambiente XSEOS. Para a mistura acetona-metanol foram ajustados três parâmetros de interação binária: o parâmetro de não aleatoriedade (α) e os parâmetros energéticos Δg_{12} e Δg_{21} .

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right] \quad (3)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right] \quad (4)$$

nas quais, tem-se:

$$G_{12} = \exp(-\alpha \tau_{12}) \quad (5)$$

$$G_{21} = \exp(-\alpha \tau_{21}) \quad (6)$$

Nas Eqs. (5) e (6), τ_{12} e τ_{21} são parâmetros de interação adimensionais, os quais estão relacionados com os parâmetros energéticos pelas Equações (7) e (8):

$$\tau_{12} = \frac{\Delta g_{12}}{RT} \quad (7)$$

$$\tau_{21} = \frac{\Delta g_{21}}{RT} \quad (8)$$

em que R é a constante universal dos gases e T é a temperatura.

Regressão dos parâmetros termodinâmicos

Os parâmetros do modelo NRTL foram obtidos por regressão simultânea de dois conjuntos experimentais, compreendendo 29 pontos isotérmicos e 37 pontos isobáricos. Essa abordagem permite a determinação de um único conjunto de parâmetros capaz de representar diferentes condições termodinâmicas de equilíbrio.

A função objetivo utilizada na regressão consistiu na minimização dos desvios relativos entre valores experimentais e calculados de temperatura, pressão e fração molar do componente mais volátil na fase vapor, sendo definida por:

$$FO = \sum_{n_p} \left[\left(1 - \frac{T_{calc}}{T_{exp}} \right)^2 + \left(1 - \frac{P_{calc}}{P_{exp}} \right)^2 + \left(1 - \frac{y_{calc}}{y_{exp}} \right)^2 \right] \quad (9)$$

em que n_p representa o número total de pontos experimentais utilizados na regressão.

Implementação computacional da correlação termodinâmica

A implementação da modelagem termodinâmica foi realizada utilizando o suplemento XSEOS (*Excess Gibbs Energy Models and Equations of State*) para Microsoft Excel, desenvolvido por Castier (2008), o qual disponibiliza rotinas consolidadas para cálculo de propriedades termodinâmicas e equilíbrio de fases.

A otimização dos parâmetros foi conduzida com o auxílio do Solver do Microsoft Excel, empregando o algoritmo GRG Não Linear. Durante o processo de regressão, foram impostas restrições ao parâmetro de não aleatoriedade (α), limitado ao intervalo entre 0 e 1, garantindo consistência física ao modelo.

A qualidade da correlação obtida foi avaliada por meio do desvio médio relativo (*Average Relative Deviation* ou *ARD*), calculado conforme a Eq. (10):

$$ARD(\%) = \frac{100}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p} \left| \frac{Z_{calc,i} - Z_{exp,i}}{Z_{calc,i}} \right| \quad (10)$$

em que Z_{calc} e Z_{exp} representam, respectivamente, os valores calculados pelo modelo e os valores experimentais da propriedade analisada, n_p corresponde ao número de pontos experimentais e Z representa a variável de interesse (temperatura, pressão ou fração molar do componente mais volátil na fase vapor). Neste trabalho, o *ARD* foi calculado separadamente para os conjuntos de dados isotérmicos e isobáricos, sendo utilizado como indicador da capacidade do modelo NRTL em reproduzir os dados experimentais empregados na regressão.

Os parâmetros obtidos foram posteriormente utilizados na simulação dos sistemas de separação descritos a seguir.

Simulação dos tanques flash isotérmicos

O processo de separação foi modelado por meio de dois tanques flash isotérmicos dispostos em série. A corrente de alimentação, com vazão total de 10.000 mol h⁻¹ e composição molar de 0,20 de acetona e 0,80 de metanol, foi alimentada ao primeiro estágio de separação. O vapor gerado neste estágio foi encaminhado ao segundo flash, operando sob pressão distinta, selecionada no intervalo de 0,5 a 1,0 bar. O líquido constituído em cada estágio foi considerado como corrente de saída correspondente.

O equilíbrio líquido-vapor em cada estágio foi calculado com base na Eq. (1), utilizando o modelo NRTL com os parâmetros previamente ajustados.

A fração de vaporização em cada estágio foi obtida pela resolução da equação de Rachford–Rice:

$$\sum_{i=1}^n \frac{z_i (K_i - 1)}{1 + \psi (K_i - 1)} = 0 \quad (11)$$

em que z_i representa a fração molar do composto i na alimentação do tanque flash, ψ é a fração vaporizada e K_i é o coeficiente de equilíbrio definido por:

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^{sat}}{P} \quad (12)$$

A equação de Rachford–Rice foi resolvida iterativamente até convergência numérica, garantindo o atendimento simultâneo dos balanços de massa e das condições de equilíbrio em cada estágio.

O procedimento foi aplicado de forma sequencial, sendo o vapor gerado no primeiro flash utilizado como alimentação do segundo estágio, permitindo avaliar o comportamento do sistema em configuração de múltiplos estágios.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ajuste dos parâmetros do modelo NRTL

Os parâmetros do modelo NRTL obtidos para a mistura acetona-metanol são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2. Parâmetros do modelo NRTL obtidos para a mistura acetona(1)-metanol(2).

Parâmetro	Valor
α	0,15
$\Delta g_{12} \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$	1109,96
$\Delta g_{21} \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$	659,04

O ajuste simultâneo dos dados isotérmicos e isobáricos resultou em desvios médios relativos (*ARD*) de 0,59% e 0,39%, respectivamente, indicando que o modelo foi capaz de representar adequadamente o comportamento de equilíbrio da mistura sob diferentes condições termodinâmicas.

Os parâmetros ajustados foram obtidos a partir da regressão simultânea dos dados experimentais utilizados neste estudo, sendo recomendados para simulações realizadas em condições de temperatura e pressão próximas às representadas pela base experimental.

Os valores obtidos para o parâmetro de não aleatoriedade (α) encontram-se dentro da faixa típica reportada para sistemas líquido-líquido e líquido-vapor altamente não ideais, embora inferiores ao valor reportado por Iliuta e Thyron (1995) para o mesmo sistema. Essa diferença pode ser atribuída tanto à estratégia de regressão simultânea empregando dados isotérmicos e isobáricos quanto à forma distinta de parametrização adotada na literatura, na qual os parâmetros energéticos são frequentemente apresentados em base de temperatura equivalente.

Adicionalmente, estudos anteriores para a mistura acetona-metanol (Freshwater e Pike, 1967) empregaram modelos como van Laar, Margules e Redlich-Kister, obtendo boa representação de dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor em condições isotérmicas. Esses resultados evidenciam o comportamento não ideal da mistura e demonstram que diferentes modelos podem descrever satisfatoriamente conjuntos específicos de dados experimentais.

No presente trabalho, entretanto, optou-se pelo modelo NRTL por se tratar de um modelo fundamentado na teoria da composição local, amplamente empregado em simuladores comerciais de processos para a representação do equilíbrio líquido-vapor de misturas não ideais. Além disso, a estimação dos parâmetros foi realizada considerando simultaneamente dados experimentais isotérmicos e isobáricos, permitindo a obtenção de um único

conjunto de parâmetros aplicável a diferentes condições de operação e adequado à simulação de tanques flash no ambiente XSEOS.

Representação do equilíbrio líquido-vapor

A qualidade da correlação termodinâmica foi avaliada a partir da capacidade do modelo NRTL em reproduzir os dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor da mistura acetona-metanol, caracterizada por forte não idealidade e formação de um azeótropo de máximo em pressão.

Os diagramas de equilíbrio líquido-vapor obtidos experimentalmente e calculados pelo modelo são apresentados na Figura 1, para as condições isotérmicas, e na Figura 2, para as condições isobáricas. Observa-se que o mesmo conjunto de parâmetros ajustados foi capaz de reproduzir satisfatoriamente ambos os conjuntos de dados, evidenciando boa concordância entre os valores experimentais e calculados ao longo de toda a faixa de composição estudada.

Além da adequada representação das curvas de equilíbrio, verifica-se que o modelo reproduziu corretamente a curvatura característica do sistema e a região azeotrópica, aspectos fundamentais para a descrição do comportamento termodinâmico da mistura acetona-metanol. A representação consistente dessas características é particularmente relevante, uma vez que pequenas discrepâncias na predição do equilíbrio podem resultar em diferenças significativas nos cálculos de composição das fases e, consequentemente, na simulação de operações de separação.

Os resultados obtidos demonstram que a estratégia de regressão simultânea de dados isotérmicos e isobáricos permitiu obter um conjunto único de parâmetros com capacidade de representar diferentes condições experimentais, sem a necessidade de ajustes específicos para cada conjunto de dados. Essa característica amplia a aplicabilidade da correlação termodinâmica e fornece maior confiabilidade para sua utilização em cálculos de equilíbrio líquido-vapor empregados na simulação de processos.

Aplicação dos parâmetros ajustados na simulação dos tanques flash isotérmicos

Uma vez validada a capacidade do modelo NRTL em representar o equilíbrio líquido-vapor da mistura acetona-metanol, os parâmetros ajustados foram empregados na simulação de dois tanques flash isotérmicos operando em série. O fluxograma apresentado na Figura 3 resume a configuração do sistema, as condições de operação adotadas em cada estágio e os principais resultados obtidos para as correntes de processo.

As condições de operação dos tanques flash não foram definidas arbitrariamente. Inicialmente, foram realizados estudos exploratórios variando-se as temperaturas e pressões de operação de ambos os estágios, buscando identificar condições que proporcionassem um compromisso entre o enriquecimento da acetona na corrente de vapor produzida pelo segundo flash e uma vazão de vapor suficientemente elevada.

Como os cálculos foram implementados em planilha eletrônica, essa análise foi conduzida por meio de sucessivas simulações, permitindo avaliar qualitativamente a influência das variáveis operacionais sobre o desempenho do sistema. Embora uma otimização matemática formal possa ser empregada para a determinação das condições ótimas de operação, essa abordagem encontra-se fora do escopo do presente trabalho.

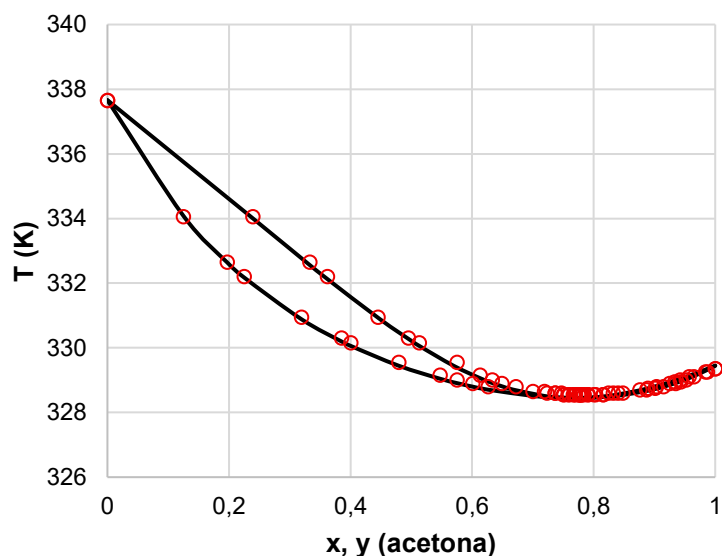


Figura 1. Diagrama T–x–y do equilíbrio líquido-vapor da mistura acetona–metanol a 101,32 kPa. Pontos: dados experimentais de Iliuta e Thyron (1995). Linhas contínuas: modelo NRTL ajustado neste trabalho.

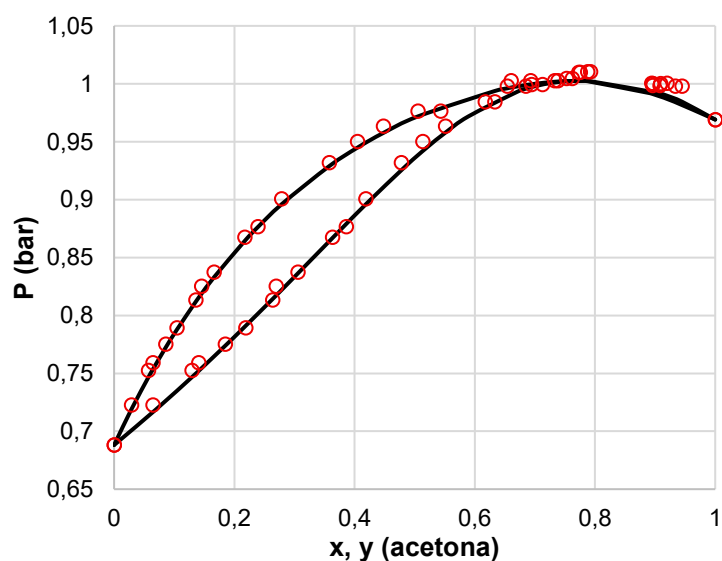


Figura 2. Diagrama P–x–y do equilíbrio líquido-vapor da mistura acetona–metanol a 55 °C. Pontos: dados experimentais de Freshwater e Pike (1967). Linhas contínuas: modelo NRTL ajustado neste trabalho.

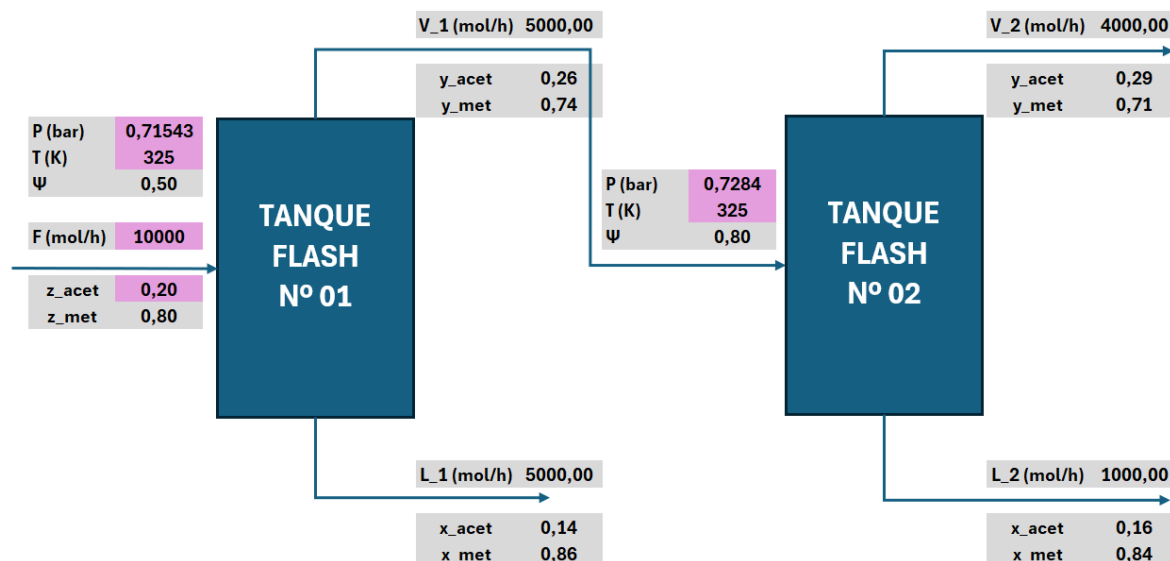


Figura 3. Fluxograma do sistema de dois tanques flash isotérmicos operando em série, indicando as condições de operação, as frações vaporizadas e as composições das correntes de vapor obtidas na simulação utilizando os parâmetros do modelo NRTL ajustados neste trabalho.

Outro aspecto relevante é que os tanques flash foram simulados a 325 K (52 °C), temperatura distinta daquela empregada nos dados isotérmicos utilizados na regressão dos parâmetros do modelo NRTL (55 °C). Essa escolha somente foi possível em razão da estratégia adotada de ajuste simultâneo de dados isotérmicos e isobáricos, que resultou em um conjunto de parâmetros capaz de representar o comportamento termodinâmico da mistura em diferentes condições de equilíbrio. Dessa forma, os parâmetros ajustados puderam ser empregados em condições de operação distintas daquelas utilizadas na regressão, ampliando sua aplicabilidade em simulações de processos.

Para a corrente de alimentação, contendo 20% molar de acetona e vazão de 10.000 mol h⁻¹, o primeiro estágio, operando a 325 K e 0,71 bar, apresentou fração vaporizada de 0,50, produzindo uma corrente de vapor com 26% molar de acetona. A corrente de vapor gerada alimentou o segundo estágio, operando a 325 K e 0,73 bar, no qual foi obtida fração vaporizada de 0,80 e composição de acetona de 29% na fase vapor.

Observa-se um enriquecimento progressivo da acetona na corrente de vapor, cuja composição aumentou de 20% na alimentação para 26% após o primeiro estágio e 29% após o segundo. Esse comportamento é consistente com a maior volatilidade da acetona em relação ao metanol e evidencia a capacidade da modelagem termodinâmica em prever adequadamente a distribuição dos componentes entre as fases. Embora o presente estudo tenha considerado

apenas dois estágios de separação, a metodologia empregada pode ser estendida para sistemas mais complexos, desde que estejam disponíveis modelos termodinâmicos capazes de representar adequadamente o equilíbrio de fases da mistura em estudo.

Os resultados demonstram que a qualidade da correlação do equilíbrio líquido-vapor é determinante para a obtenção das constantes de equilíbrio empregadas na resolução da equação de Rachford-Rice e, consequentemente, para a previsão das frações vaporizadas, das composições das correntes de saída e da avaliação do desempenho do sistema de separação. Dessa forma, o emprego de parâmetros obtidos a partir de uma correlação termodinâmica consistente constitui uma etapa essencial para aumentar a confiabilidade de simulações de operações envolvendo misturas não ideais.

CONCLUSÃO

O presente trabalho demonstrou que a regressão simultânea de dados experimentais isotérmicos e isobáricos permitiu obter um conjunto consistente de parâmetros do modelo NRTL para a mistura acetona-metanol, proporcionando adequada representação do equilíbrio líquido-vapor em diferentes condições operacionais. A boa concordância entre os resultados experimentais e calculados evidenciou a capacidade da correlação termodinâmica em reproduzir o comportamento não ideal da mistura, incluindo a região azeotrópica.

Os parâmetros ajustados foram empregados na simulação de dois tanques flash isotérmicos operando em série, evidenciando que a qualidade da modelagem termodinâmica exerce influência direta sobre a determinação das constantes de equilíbrio, das frações vaporizadas e das composições das correntes obtidas na operação de separação. Dessa forma, o trabalho reforça que a correlação de dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor não constitui apenas uma etapa de ajuste de modelos, mas fornece a base necessária para simulações de processo mais confiáveis e para análises de projeto de equipamentos envolvendo misturas não ideais.

Além dos resultados obtidos para a mistura acetona-metanol, a metodologia desenvolvida pode ser aplicada a outros sistemas de interesse da Engenharia Química, constituindo uma alternativa acessível para estudos de equilíbrio de fases e simulação de operações de separação em ambiente Microsoft Excel, por meio da integração entre o suplemento XSEOS e rotinas computacionais implementadas pelo usuário.

REFERÊNCIAS

- CASTIER, M. XSEOS – an open software for chemical engineering thermodynamics. **Chemical Engineering Education**, v. 42, n. 2, p. 74–81, 2008.
- CASTIER, M.; AMER, M. M. XSEOS: an evolving tool for teaching chemical engineering thermodynamics. **Education for Chemical Engineers**, v. 6, n. 2, p. e62–e70, 2011.
- DOMAŃSKA, U. Thermodynamic models for liquid-state activity coefficients. **Processes**, v. 7, n. 5, art. 277, 2019.
- FRESHWATER, D. C.; PIKE, F. W. Vapor-liquid equilibrium data for systems of acetone-methanol-isopropanol. **Journal of Chemical and Engineering Data**, v. 12, n. 2, p. 179–183, 1967.
- IDRISSI, A.; POLOK, K.; BARJ, M.; MAREKHA, B.; KISELEV, M.; JEDLOVSKY, P. Free energy of mixing of acetone and methanol: A computer simulation investigation. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 117, n. 50, p. 16157–16164, 2013.
- ILIUTA, M. C.; THYRION, F. C. Vapour-liquid equilibrium for the acetone-methanol-inorganic salt system. **Fluid Phase Equilibria**, v. 103, p. 257–284, 1995.
- KORETSKY, M. D. **Engineering and chemical thermodynamics**. 2. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2013.
- LABARTA, J. A.; OLAYA, M. M.; MARCILLA, A. F. What does the NRTL model look like? Determination of boundaries for different fluid phase equilibrium regions. **AIChE Journal**, v. 68, n. 10, e17805, 2022.
- PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; AZEVEDO, E. C. **Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria**. 3. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1999.
- RACHFORD, H. H.; RICE, J. D. Procedure for use of electronic digital computers in calculating flash vaporization hydrocarbon equilibrium. **Journal of Petroleum Technology**, v. 4, n. 10, p. 327–328, 1952.
- RENON, H.; PRAUSNITZ, J. M. Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. **AIChE Journal**, v. 14, n. 1, p. 135–144, 1968.
- SEADER, J. D.; HENLEY, E. J.; ROPER, D. K. **Separation process principles**. 4. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2016.
- SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M.; SWIHART, M. T. **Introduction to chemical engineering thermodynamics**. 8. ed. New York: McGraw-Hill Education, 2018.
- YI, W.; WANG, C.; LI, H.; HAN, S. Isothermal and Isobaric Vapor-Liquid Equilibria of the Ternary System of 2,2-Dimethoxypropane + Acetone + Methanol. **Journal of Chemical and Engineering Data**, v. 50, n. 6, p. 1837–1840, 2005.