

Avaliação do modelo COSMO-SAC (2010) na predição do equilíbrio líquido-líquido de sistemas contendo solventes eutéticos profundos

José Lúcio Bauer Vieira¹, Christian Luiz da Silveira¹

¹Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Brasil (jose.bauer@acad.ufsm.br)

A crescente atividade de exploração e produção de petróleo tem ampliado a geração de resíduos, como a água produzida (AP), efluente rico em óleos, graxas e ácidos naftênicos, compostos de elevada toxicidade e potencial corrosivo. Nesse contexto, a extração líquido-líquido destaca-se como uma técnica promissora para a remoção desses contaminantes. A seleção de solventes adequados para esse processo pode ser auxiliada por modelos termodinâmicos, como UNIFAC-LLE e COSMO-SAC, que permitem avaliar o equilíbrio líquido-líquido (ELL) de um grande número de sistemas com menor custo experimental, incluindo sistemas contendo cossolventes, como os solventes eutéticos profundos (DES). Neste trabalho, avaliou-se o desempenho do modelo COSMO-SAC (2010) na predição do ELL de 36 sistemas contendo DES neutros, comparando seus resultados com modelos descritos na literatura. O desempenho foi analisado por meio do desvio médio absoluto (AAD) do coeficiente de partição, K , em relação aos dados experimentais, bem como pela raiz do desvio quadrático médio das composições (RMSD). O COSMO-SAC (2010) apresentou AAD de 0,411, valor intermediário em relação aos modelos reportados na literatura, que variaram de 0,270 para o UNIFAC a 0,601 para o COSMO-RS-TZVP. Em termos de RMSD, o COSMO-SAC (2010) apresentou valor de 0,0525, inferior aos obtidos com COSMO-RS-TZVP e COSMO-RS-TZVPD-FINE, de 0,0682 e 0,0663, respectivamente, mas superior ao obtido com UNIFAC, de 0,0488. Os resultados indicam que o COSMO-SAC (2010) apresentou desempenho ligeiramente superior aos modelos COSMO-RS avaliados para os sistemas estudados, embora ainda tenha produzido erros superiores aos do UNIFAC e apresente maior custo computacional. Como perspectivas futuras, propõe-se a avaliação do modelo COSMO-SAC 2013, a extensão do estudo para sistemas contendo DES salinos e a aplicação desses modelos ao *screening* de solventes para processos de extração líquido-líquido de ácidos naftênicos.

Palavras-chave: Ácidos naftênicos; Equilíbrio líquido-líquido; COSMO-SAC (2010).

Agradecimentos: Ao Programa de Formação de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (PRH-ANP), por meio do PRH-ANP 52, pelo apoio concedido ao desenvolvimento deste trabalho.