



**Universidade:  
presente!**

**UFRGS**  
PROPEAQ



**XXXI SIC**

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Aumento do poder preditivo do modelo COSMO-SAC-Phi pela remoção de um de seus parâmetros
<b>Autor</b>	BRUNO CALIXTO REDIN
<b>Orientador</b>	RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

# Aumento do poder preditivo do modelo COSMO-SAC-Phi pela remoção de um de seus parâmetros

Aluno: Bruno Calixto Redin

Professor Orientador: Rafael de Pelegrini Soares  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS

Métodos computacionais de predição de propriedades de misturas são de grande importância para os âmbitos acadêmico e industrial. Porém, para os métodos computacionais usuais, qualquer mistura que contenha um composto polar precisa de, pelo menos, parâmetros de interação binários, além de dados sobre as substâncias puras. Isso impossibilita a aplicação desses métodos para moléculas pouco conhecidas.

Nesse sentido, contornando esse problema, o modelo COSMO-SAC-Phi (CSPHi) prevê com considerável sucesso o comportamento de misturas, dependendo apenas de dados de volume e pressão de saturação das substâncias puras. Com estes dados, o modelo original do CSPHi ajusta 4 parâmetros por substância pura para a execução de seus cálculos.

O que se pretende neste trabalho é reduzir o número de parâmetros ajustados para apenas três por substância. A ideia é substituir um destes parâmetros por uma grandeza que se possa calcular apenas conhecendo a molécula com que se trabalha.

Dentre os 4 parâmetros atualmente ajustados, um deles representa o volume ocupado pela molécula ( $b_i$ ). Inicialmente foram comparados os valores de  $b_i$  com o volume calculado pela técnica de química computacional COSMO. Foi observada uma grande correlação entre estes volumes e conseguiu-se obter uma equação linear para o  $b_i$  a partir daquele estimado pelo COSMO.

Usando esse volume predito, pode-se remover o parâmetro relacionado ao volume molecular. Entretanto, a comparação com dados experimentais se deteriora quando estes volumes são utilizados. Assim, os três parâmetros restantes foram reajustados para a real avaliação de quanta precisão foi perdida ao manter um parâmetro fixo.

O programa original estimava as pressões das substâncias puras com um erro médio de 1,16%, e os volumes com erro médio de 1,59%. Antes das comparações o ajuste original foi executado novamente, porém agora considerando contribuições iguais tanto para pressão quanto volume. Com esta alteração, ocorreu um pequeno aumento nos erros das pressões, para 1,33%, mas com uma considerável melhora na precisão da estimativa do volume, tendo o erro diminuído para 0,67%. Por fim o parâmetro  $b_i$  foi substituído por um ajuste linear e os demais parâmetros reajustados. Com isso, foram verificados erros de 1,28% para a pressão e 1,08% para o volume.

Como se pôde observar, foi possível, sem grandes perdas de precisão, reduzir um dos parâmetros ajustados no método CSPHi. Isto é uma contribuição interessante na direção da obtenção de um método que não necessite de nenhum dado experimental para prever o comportamento de misturas.