

COMO CALCULAR OS COEFICIENTES DE FUGACIDADE DOS COMPONENTES DE UMA MISTURA BINÁRIA, DADOS OS SEGUINTE DADOS:

PRESSÃO , P

TEMPERATURA, T

COMPOSIÇÃO NA FASE LÍQUIDA, x_1

COMPOSIÇÃO NA FASE VAPOR, y_1

k_{ij} : parâmetro de interação binária (é constante se T é constante)

CO2 (1)		
Tc 1	304.2	K
Pc 1	72.865	atm
w 1	0.22362	
PM 1	44.01	g/mol

2-propanol (2)		
Tc 2	508.3	K
Pc 2	47.017	atm
w 2	0.66687	
PM 2	60.096	g/mol

Peng-Robinson ELV

Tr 1	1.0289		
m1	0.7060		
a(T)1	0.9798		
a1	3.83	L2.atm/mol2	
b1	0.03	L/mol	

Tr 2	0.6158		
m2	1.2831		
a(T)2	1.6288		
a2	27.55	L2.atm/mol2	
b2	0.07	L/mol	

$$m_i = 0.37464 + 1.54226 \omega_i - 0.26992 \omega_i^2$$

$$\alpha(T)_i = \left[1 + m_i \left(1 - \sqrt{T_{r,i}} \right) \right]^2$$

$$a_i = \frac{0.45724 R^2 T_{c,i}^2 \alpha(T)_i}{P_{c,i}} \quad b_i = \frac{0.07780 R T_{c,i}}{P_{c,i}}$$

kij	0.0125
-----	--------

a11	3.831
a12	10.273
a21	10.273
a22	27.551

$$a_{i,j} = (1 - k_{i,j}) \sqrt{a_i a_j}$$

Fase Líquida

Regras de mistura

$$a^L = \sum_i^c \sum_j^c x_i x_j a_{ij} \quad b^L = \sum_i^c x_i b_i$$

$a^L =$	26.933
$b^L =$	0.068

A^L	0.2902	(adimensional)
B^L	0.0189	(adimensional)

$$A^L = \frac{a^L P}{R^2 T^2}$$

$$B^L = \frac{b^L P}{RT}$$

Fase Vapor

Regras de mistura

$$a^V = \sum_i^c \sum_j^c y_i y_j a_{ij} \quad b^V = \sum_i^c y_i b_i$$

$a^V =$	4.446
$b^V =$	0.029

A^V	0.0479	(adimensional)
B^V	0.0079	(adimensional)

$$A^V = \frac{a^V P}{R^2 T^2}$$

$$B^V = \frac{b^V P}{RT}$$

$$Z^3 - (1 - B^L)Z^2 + (A^L - 2B^L - 3B^{2,L})Z - A^L B^L + B^{2,L} + B^{3,L} = 0$$

$$Z^3 - (1 - B^V)Z^2 + (A^V - 2B^V - 3B^{2,V})Z - A^V B^V + B^{2,V} + B^{3,V} = 0$$

Raíces				Raíces			
coef 1	1	1.0000		coef 1	1	1.0000	
coef 2	$-(1-B^L)$	-0.9811		coef 2	$-(1-B^V)$	-0.9921	
coef 3	$A^L - 2B^L - 3(B^L)^2$	0.2513		coef 3	$A^V - 2B^V - 3(B^V)^2$	0.0319	
coef 4	$B^L + (B^L)^2 + (B^L)^3$	-0.0051		coef 4	$B^V + (B^V)^2 + (B^V)^3$	-0.0003	
	Z1	0.0222		Z1	0.9592		
	Z2	0.0222	====> a menor raíz !!!!!!!!!!!	Z2	0.9592		====> a maior raíz !!!!!!!!!!!
	Z3	0.0222		Z3	0.9592		
Z^L	0.0222			Z^V	0.9592		

Fase Líquida

Peng-Robinson
ELV

Fase Vapor

$$\ln \hat{w}_i^L = \frac{b_i}{b^L} (Z^L - 1) - \ln(Z^L - B^L) + \frac{A^L}{2\sqrt{2}B^L} \left(\frac{2 \sum_k^c x_k a_{k,i}}{a^L} - \frac{b_i}{b^L} \right) \ln \left(\frac{Z^L + (1 - \sqrt{2})B^L}{Z^L + (1 + \sqrt{2})B^L} \right)$$

$$\ln \hat{w}_i^V = \frac{b_i}{b^V} (Z^V - 1) - \ln(Z^V - B^V) + \frac{A^V}{2\sqrt{2}B^V} \left(\frac{2 \sum_k^c y_k a_{k,i}}{a^V} - \frac{b_i}{b^V} \right) \ln \left(\frac{Z^V + (1 - \sqrt{2})B^V}{Z^V + (1 + \sqrt{2})B^V} \right)$$

coeficiente de fugacidade 1 (L)

$$\hat{\phi}_1^L \quad 9.5729$$

coeficiente de fugacidade 1 (V)

$$\hat{\phi}_1^V \quad 0.9667$$

coeficiente de fugacidade 2 (L)

$$\hat{\phi}_2^L \quad 0.0223$$

coeficiente de fugacidade 2 (V)

$$\hat{\phi}_2^V \quad 0.8389$$