

É notável a importância industrial da predição do comportamento líquido-vapor para sistemas poliméricos, que possuem comportamento distante do ideal implicando complexidade na modelagem. Nos últimos anos foram desenvolvidos modelos com base na mecânica estatística para se obter maior potencial de predição para estes sistemas. Um deles, a equação PC-SAFT, vem sendo aplicado satisfatoriamente por levar em conta os efeitos da estrutura geométrica molecular sobre as forças dispersivas. Uma versão simplificada foi proposta por Solms e Michelsen (2003), alterando a parte relacionada às interações repulsivas. Isto reduz a complexidade da equação e proporciona melhor velocidade computacional, principalmente para o cálculo das propriedades de estado, que envolvem as derivadas dos termos de energia livre de Helmholtz. O termo dispersivo, mantido na forma original, apresenta a regra de mistura que contém o fator de interação binária. Este fator confere um caráter empírico à equação, dificultando sua utilização para aplicações industriais, já que sua determinação exige suficiente quantidade de experimentos em diversas condições operacionais. Isto pode ser contornado com modelos de energia livre de Gibbs em excesso G^E para misturas polares e assimétricas em amplas faixas operacionais. Neste trabalho, a equação PC-SAFT simplificada foi implementada em linguagem Java e suas predições foram comparadas com as produzidas pela versão completa. Para substâncias puras, a versão completa se reduz à simplificada e resultados idênticos foram obtidos. Para misturas resultados muito similares foram obtidos, justificando o uso da simplificação. Futuramente o objetivo é o desenvolvimento de uma regra de mistura baseada em G^E alterando-se o termo de dispersão da versão simplificada.