

178

IMPLEMENTAÇÃO DE MODELOS TERMODINÂMICOS LOCAIS PARA A SIMULAÇÃO DE PROCESSOS. *Fábio Brião de Oliveira, Pedro Rafael Fernandes, Jorge Otávio Trierweiler* (Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, UFRGS).

Estão sendo implementados no MATLAB modelos termodinâmicos através de uma programação orientada a objeto, que se caracteriza pelos conceitos de “classe” e “objeto”. Podemos definir “classe” como sendo a estrutura de programação que define um elemento através de suas propriedades, permitindo também identificar-se procedimentos e métodos que são próprios do mesmo. Nesse contexto, “objeto” é o elemento criado de acordo com as definições de uma classe. Os modelos termodinâmicos utilizados para a fase gasosa são: Peng-Robson, Soave-Redlich-Kwong, e virial truncada no terceiro termo. Os modelos de solução são: Wilson, Solução Regular, NRTL e UNIQUAC. Uma novidade deste trabalho será a implementação de redes de modelos termodinâmicos locais, uma nova metodologia na descrição termodinâmica dos sistemas que permitirá um aumento de eficiência na simulação dinâmica de processos. Os algoritmos desenvolvidos serão os métodos aplicados a um objeto definido como um sistema termodinâmico, sob a forma de uma estrutura de dados. O objetivo final é o cálculo do equilíbrio líquido-vapor necessário ao projeto e simulação de processos de separação.(PROPESQ/UFRGS).