



APLICAÇÃO DA TÉCNICA INSIDE-OUT PARA O CÁLCULO DE EQUILÍBRIO DE FASES EM OPERAÇÕES UNITÁRIAS DO CHEM+.

Beatriz Nandara Amaro Dantas¹, Antônio Tavernard Pereira Neto²

RESUMO

O desenvolvimento em modelos rigorosos para o cálculo de equilíbrio e o aumento da capacidade em esforços computacionais tem permitido o uso de simuladores de processos cada vez mais precisos. Através de um simulador de processos é possível descrever um processo em execução, o que é uma importante ferramenta na compreensão da operação de uma indústria química complexa. A principal vantagem desses simuladores aqui representados pelo CHEM+, é diminuir o tempo das tarefas repetitivas e demoradas de um engenheiro de processos, como por exemplo, analisar a forma de reduzir o impacto ambiental, aumentar a segurança e controle de processos, otimizar o desempenho econômico da planta. O presente trabalho tem como objetivo implementar a metodologia Inside-Out no equilíbrio de fases usados em diversas operações unitárias dos simuladores de processos químicos. O conceito Inside-Out foi motivado a fim de superar as dificuldades da resolução de flash rigoroso, sem a introdução de novas dificuldades cujo principal objetivo é acima de tudo, robustez em face de um possível nível extremamente fraco de estimativas iniciais. E como ganho intangível, ele visa ainda ampliar a capacidade de compreensão e solução de problemas complexos sem a utilização de simuladores comerciais, dados que os mesmos são caixas pretas, e nem sempre é compreendido quais cálculos estão sendo realizados pelo simulador. Através do software Matlab foram implementados a metodologia Inside-Out para o flash PT, PV, TV, PQ e QV, o modelo de atividade UNIFAC e a equação de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK). Os resultados obtidos tiveram grande concórdância com o simulador Aspen Plus além de apresentar eficiência em termos de memória RAM e esforço computacional.

Palavras-chave: Simulador de Processos, Metodologia Inside-Out, Equilíbrio líquido-vapor.

¹Aluna de Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: beatriz.nandara@eq.ufcg.edu.br

²Doutor, Professor, Departamento de Engenharia Química, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: tavernard@eq.ufcg.edu.br



***INSIDE-OUT TECHNIQUE APPLICATION FOR PHASE EQUILIBRIUM
CALCULATION IN UNIT OF OPERATIONS CHEM +.***

ABSTRACT

The development in rigorous models for the calculation of equilibrium and the increase of the capacity in computational efforts has allowed the use of simulators of processes more and more precise. Through a process simulator it is possible to describe a running process, which is an important tool in understanding the operation of a complex chemical industry. The main advantage of these simulators represented by CHEM+ is to reduce the time of a process engineer's repetitive and time-consuming tasks, such as analyzing how to reduce environmental impact, increase safety and process control, optimize economic performance of the plant. The present work aims to implement the Inside-Out methodology in the equilibrium of phases used in several unit operations of the chemical process simulators. The Inside-Out concept was motivated in order to overcome the difficulties of rigorous flash resolution without introducing new difficulties whose main goal is above all, robustness in the face of a possible extremely weak level of initial estimates. And as an intangible gain, it also aims to expand the ability to understand and solve complex problems without the use of commercial simulators, given that they are black boxes, and it is not always understood which calculations are being performed by the simulator. Through the Matlab software, the Inside-Out methodology for Flash PT, PV, TV, PQ and QV, the UNIFAC activity model and the Soave-Redlich-Kwong (SRK) state equation were implemented. The results obtained were very in agreement with the Aspen Plus simulator and presented efficiency in terms of RAM and computational effort.

Keywords: Process Simulator, Inside-Out Methodology, Liquid-vapor equilibrium.