

COLEÇÃO DE 10 PROBLEMAS NUMÉRICOS TÍPICOS EM ENGENHARIA QUÍMICA RESOLVIDOS COM O SIMULADOR EMSO

R. Rodrigues¹; R. P. Soares¹; A. R. Secchi¹

¹Grupo de Integração, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos (GIMSCOP)
Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central – CEP: 90040-040 – Porto Alegre – RS – Brasil
Telefone: (xx-51) 3308-3315 – Fax: (xx-51)3308-3277
Email: {rodolfo, rafael, arge}@enq.ufrgs.br

RESUMO – A resolução de problemas numéricos cada vez mais pesados tem sido possível pelo surgimento de computadores pessoais de capacidades computacionais cada vez maiores. Em função disto, o trabalho de Cutlip *et al.* (1998) intitulado “*A collection of 10 numerical problems in Chemical Engineering solved by various mathematical software packages*” resume uma coleção de dez problemas típicos do currículo de Engenharia Química, revolidos por meio de seis diferentes *softwares* matemáticos, envolvendo a maioria dos métodos numéricos usualmente utilizados por estudantes de graduação em engenharia. Este conjunto de problemas envolve os mais diversos tópicos de Engenharia Química representando convenientemente o currículo básico do curso de graduação. O presente trabalho discute a resolução destes problemas utilizando o simulador de processos *EMSO*TM, mostrando ser uma alternativa promissora para uso em sala de aula.

PALAVRAS-CHAVE: ensino na graduação; métodos numéricos; simulador *EMSO*.

ABSTRACT – The solution of even more sophisticated mathematical problems becomes possible due to the appearance of personal computers, providing increasingly exceptional computing capabilities. As result, the work of Cutlip *et al.* (1998) called “*A collection of 10 numerical problems in Chemical Engineering solved by various mathematical software packages*” summarize a collection of 10 typical problems throughout the Chemical Engineering curriculum, solved with 6 different mathematical software packages, including the most of numerical methods commonly used by undergraduate engineering students. This collection of problems approach through several Chemical Engineering topics representing properly the basic undergraduation curriculum. This work discusses the solution of these problems using the process simulator *EMSO*TM, showing a promising alternative for using in classroom.

1. INTRODUÇÃO

Com advento de computadores pessoais de capacidades computacionais cada vez maiores, é possível a resolução de problemas cada vez mais sofisticados. Além disto, a necessidade de construir programas computacionais específicos para resolução de problemas matemáticos tem sido reduzida, se não eliminada, pela disponibilidade no mercado de *softwares* matemáticos genéricos que desempenham estas funções satisfatoriamente.

Em função disto, o trabalho de Cutlip *et al.* (1998) intitulado “*A collection of 10 numerical problems in Chemical Engineering solved by various mathematical software packages*” apresenta uma coleção de dez problemas típicos do currículo de Engenharia Química, revolvidos por meio de 6 diferentes *softwares* matemáticos, envolvendo a maioria dos métodos numéricos comumente utilizados por estudantes de graduação em engenharia. Este conjunto de problemas envolve os mais diversos tópicos de Engenharia Química de modo a representar comodamente o currículo básico do curso de graduação.

Este trabalho tem por objetivo discutir o uso do simulador *EMSO* (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*; Soares e Secchi, 2003) na resolução dos 10 problemas propostos por Cutlip *et al.* (1998). *EMSO* é um simulador dinâmico baseado em equações e com desenvolvimento continuado pelo projeto ALSOC (<http://www.enq.ufrgs.br/alsoc>). Aplicações para fins didáticos do mesmo foram apresentadas por Rodrigues *et al.* (2006), valendo lembrar-se da facilidade de acesso por não apresentar custos de utilização para instituições de ensino.

2. O SIMULADOR EMSO

Devido a sua linguagem de modelagem própria orientada a objetos, o

simulador *EMSO* torna os problemas organizados de forma estruturada e de fácil manipulação. Isto permite com que o aluno possa facilmente modificar problemas e analisar o efeito destas mudanças na solução. Os problemas podem ainda ser representados na estrutura de diagramas de blocos, e seus resultados serem visualizados na mesma interface ou em gráficos gerados pelo simulador. O simulador *EMSO* possui uma biblioteca de modelos de código aberto e é de uso livre para Instituições de Ensino, o que o torna uma alternativa para emprego em aulas computacionais.

As principais características e recursos disponíveis no simulador *EMSO* para os objetivos deste trabalho são:

Interface: Possui uma interface amigável, de maneira que se possam manipular múltiplos modelos simultaneamente e, de maneira análoga, visualizar resultados na forma de gráficos. O recurso de diagramas de blocos permite a rápida criação de fluxogramas de processo, tornando a manipulação dos modelos mais versátil.

Linguagem de modelagem: Utiliza uma linguagem de modelagem própria, com conceitos de programação orientada a objetos, tais como herança e composição. O conceito de herança permite construir modelos complexos a partir de modelos mais simples. Com o conceito de composição podem-se criar modelos a partir de vários outros modelos independentes.

A linguagem de modelagem é estruturada e de fácil utilização e aprendizagem, apresentando três entidades primordiais: **Model**, **DEVICES** e **FlowSheet** (Soares, 2003). O emprego destas entidades é evidenciado mais adiante nas Figuras 1 e 2. Um fluxograma de processo é representado pela entidade **FlowSheet**, constituído por um conjunto de componentes, chamados **DEVICES**. Os **DEVICES** são equivalentes aos equipamentos de um processo. A descrição

matemática de cada **DEVICES**, por sua vez, é representada pela entidade **Model**.

A entidade **Model** abrange as seguintes seções: **PARAMETERS**, **VARIABLES** e **EQUATIONS**. Nas seções **PARAMETERS** e **VARIABLES**, há a declaração respectivamente das constantes e variáveis do sistema a ser modelado. Em **EQUATIONS**, têm-se as expressões das equações que descrevem este sistema. Na seção opcional **ATTRIBUTES** pode-se criar uma representação gráfica para os equipamentos do respectivo **Model**, para uso no diagrama de blocos (Figura 4).

A entidade **FlowSheet** contém todas as especificações de um processo através de um conjunto de equipamentos e seus respectivos modelos definidos na seção **DEVICES** e ligados entre si na seção **CONNECTIONS**. Em sistemas dinâmicos, as condições iniciais são definidas na seção **INITIAL**. Valores são atribuídos às constantes na seção **SET**. A seção **SPECIFY** é usada para remover os graus de liberdade do sistema especificando valores para variáveis.

A estruturação de um **FlowSheet** também está baseada nos conceitos de composição e herança de **Models** internos, dentro do mesmo arquivo, ou referenciando-se a **Models** em arquivos externos utilizando o comando **using**.

Solvers: Utiliza-se de pacotes numéricos para resolução de sistemas de equações algébricas ou algébrico-diferenciais, para a solução de problemas estacionários e dinâmicos. Também há pacotes numéricos para resolução de problemas de otimização, estimação de parâmetros e reconciliação de dados.

Rotinas externas: Permite o uso de rotinas externas, criadas pelo usuário em linguagem C/C++ ou FORTRAN. Assim torna-se possível, entre outras coisas, o uso de pacotes de propriedades físicas externas

permitindo-se resolução de problemas mais complexos.

3. PROBLEMAS PROPOSTOS

Os dez problemas propostos por Cutlip *et al.* (1998) são mostrados resumidamente na Tabela 1. Cada problema está vinculado a determinadas características matemáticas e aos respectivos assuntos aos quais são relacionados à grade de disciplinas de cursos de graduação em Engenharia Química.

Os assuntos abordados são: Introdução à Engenharia Química; Métodos Numéricos; Termodinâmica; Mecânica dos Fluidos; Transferência de Calor e de Massa; Processos de Separação; Cinética e Cálculo de Reatores Químicos; e Controle de Processos. Quanto à complexidade matemática, os problemas abordados envolvem desde sistemas algébricos lineares a sistemas algébrico-diferenciais não-lineares.

4. FERRAMENTAS MATEMÁTICAS UTILIZADAS

Em seu trabalho original, Cutlip *et al.* (1998) utilizaram seis *softwares* matemáticos para resolução dos problemas propostos. Os *softwares* em questão foram: **OFFICE EXCEL**® (Microsoft Corporation), **MAPLE**™ (Waterloo Maple, Inc.), **MATCAD**™ (Mathsoft, Inc.), **MATLAB**® (Mathworks, Inc.), **MATHEMATICA**® (Wolfram Research, Inc.) e **POLYMATH**® (Cutlip e Shacham, 1998).

No presente trabalho, os problemas propostos por Cutlip *et al.* (1998) são implementados no simulador **EMSO**. A partir daqui comparações e conclusões são realizadas a respeito dessas 7 ferramentas matemáticas computacionais, com o intuito de evidenciar o uso do **EMSO** como uma alternativa conveniente de um recurso computacional para fins didáticos.

Tabela 1 – Os 10 problemas propostos por Cutlip *et al.* (1998).

Problema	Caracterização matemática	Assunto relacionado
1. Volume molar e fator de compressibilidade Uso da equação de van der Waals para cálculo do volume molar e fator de compressibilidade para uma determinada espécie gasosa	Equação algébrica não-linear única	Introdução à Engenharia Química e Termodinâmica
2. Balanço material estacionário de um sistema de separação Sistema de separação sem ciclos envolvendo balanços de massa em regime estacionário	Sistema de equações algébricas lineares	Introdução à Engenharia Química
3. Representação de dados de pressão Modelos de pressão de vapor dados por uma expressão polinomial e pelas equações de Antoine e de Clausius-Clapeyron modificada.	Ajuste polinomial e regressão linear e não-linear	Métodos Numéricos e Termodinâmica
4. Equilíbrio químico de múltiplas reações Múltiplas reações químicas em equilíbrio num reator batelada em fase gasosa a volume constante.	Sistema de equações algébricas não-lineares	Termodinâmica, e Cinética e Cálculo de Reatores Químicos
5. Velocidade terminal de partículas em queda Velocidade terminal de partículas sólidas em queda em fluidos sob ação da força da gravidade.	Equação algébrica não-linear única	Mecânica dos Fluidos
6. Troca de calor transiente em uma série de tanques agitados Dinâmica de um conjunto de tanques agitados e aquecidos ligados em séries.	Sistema de EDOs de 1ª ordem	Transferência de Calor
7. Difusão com reação química em uma placa unidimensional Difusão e reação química irreversível de 1ª ordem ocorrendo simultaneamente em uma única fase.	Sistema de EDOs de 2ª ordem	Transferência de Massa, e Cinética e Cálculo de Reatores Químicos
8. Destilação binária em batelada Destilação em batelada de uma mistura binária ideal	EDO única e um sistema de equações algébricas não-lineares	Processos de Separação
9. Reação reversível exotérmica em fase gasosa em um reator catalítico Reator catalítico em fase gasosa com reação elementar reversível de 1ª ordem. Há troca de calor com uma camisa e perda de carga ao longo do comprimento do reator	Sistema de EDOs e de equações algébricas não-lineares	Cinética e Cálculo de Reatores Químicos
10. Dinâmica de um tanque aquecido com controle PI de temperatura Dinâmica de um sistema formado por um tanque agitado, um trocador de calor e um controlador PI de temperatura	Sistema rígido de EDOs	Controle de Processos

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Algumas características pertinentes aos seis *softwares* matemáticos avaliados originalmente e mais o EMSO são enumeradas na Tabela 2. Estas características levam em consideração o que o usuário final pode esperar dos mesmos para os fins propostos: aprendizagem, flexibilidade e visualização de

resultados. O item “aprendizagem” compreende o grau de dificuldade ao se aprender a manipular o *software* em questão, incluindo desde o aprendizado da linguagem a qual o problema será escrito à necessidade de se implementar diretamente algum método numérico. O item “flexibilidade” avalia o grau de adaptação dos problemas para situações novas e a própria facilidade da análise de

sensibilidade dos problemas implementados. O item “visualização de resultados” avalia a necessidade de se ter flexibilidade ao se visualizar dados finais (seja em gráficos ou

tabelas), o que é fundamental para interpretação e compreensão dos resultados alcançados pelos problemas.

Tabela 2 – Comparativo de características desejáveis em um *software* matemático para os fins propostos.[†]

	Aprendizagem	Flexibilidade	Visualização de resultados
<i>EMSO</i>	****	****	***
<i>Office Excel</i>	**	*	***
<i>Maple</i>	****	***	****
<i>Mathcad</i>	****	***	****
<i>Matlab</i>	***	****	****
<i>Mathematica</i>	****	***	****
<i>Polymath</i>	***	**	**

[†]Esta é uma avaliação subjetiva dos autores deste trabalho, estipulando **** para satisfatório e * para o menos satisfatório para cada um dos itens avaliados.

No que se referem à aprendizagem, os *softwares* matemáticos com representação direta de equações e expressões tais como *MAPLE*, *MATHCAD* e *MATHEMATICA* são mais assimiláveis. Ao usuário é sabido ser mais fácil manipular uma linguagem mais próxima da escrita, entretanto a flexibilidade acaba sendo comprometida pela dificuldade de criação de estruturas lógicas para uso em implementações mais robustas.

A flexibilidade acaba sendo um contrapeso em relação à facilidade de aprendizagem da linguagem. Desta forma, os *softwares* matemáticos com linguagem mais robusta tais como *EMSO* e *MATLAB* acabam prevalecendo quanto à flexibilidade.

Tão importante quanto à facilidade de aprendizagem do *software* matemático está a praticidade de visualização de resultados. A facilidade de representação da solução do problema é fundamental para a interpretação do mesmo, assim sendo, *softwares* com ferramentas gráficas mais flexíveis se destacam, dentre eles *MATHCAD* e *MATHEMATICA*.

Em linhas gerais, o *EMSO* como *software* matemático destaca-se quanto à flexibilidade e aprendizagem, mas cabe aqui ressaltar a sua condição de um simulador de processos genérico. Nesta condição, as características de uma linguagem de modelagem estruturada com uso de rotinas externas aliada a uma interface gráfica amigável e versátil o destacam das demais ferramentas avaliadas. Aplicações do *EMSO* como uma ferramenta de simulação de processo podem ser vistas nos trabalhos de Bicca *et al.* (2006) e Staudt *et al.* (2007).

5.1 Aplicação no simulador EMSO

Para fins de demonstração, o problema n° 6 de Cutlip *et al.* (1998) é aqui apresentado integralmente no *EMSO*. Este problema foi escolhido especificamente para exemplificar convenientemente recursos da linguagem de modelagem e da interface de diagrama de blocos. Este e todos os demais problemas estão disponíveis no *website* do projeto ALSOC (<http://www.eng.ufrgs.br/alsoc>).

As Figuras 1 e 2 elucidam a implementação direta do problema proposto n° 6 utilizando a linguagem de modelagem do

EMSO. Na Figura 1, utiliza-se a entidade **Model** para representar cada entidade real do problema: as correntes de óleo e de calor, e o tanque. A partir desta figura podem-se observar os recursos de herança e composição da linguagem de modelagem.

```

1
2 using "types";
3
4
5
6 #*-----
7 *----- Model of a stream -----*
8 Model oil_stream
9 PARAMETERS
10 w as flow_mass(Brief="Mass flow rate", DisplayUnit='kg/min');
11 cp as cp_mass(Brief="Heat capacity of the oil", DisplayUnit='kJ/kg/K');
12
13 VARIABLES
14 T as temperature;
15
16 SET
17 cp = 2*'kJ/kg/K';
18 w = 100*'kg/min';
19 end
20
21 Model tank_source
22 ATTRIBUTES
23 Palette = true;
24 Brief = "Simple inlet stream";
25 Icon = "icon/tank_source";
26
27 VARIABLES
28 out Outlet as oil_stream(Brief="Outlet stream", PosX=1, PosY=0.5);
29 end
30
31 Model tank_sink
32 ATTRIBUTES
33 Palette = true;
34 Brief = "Simple outlet stream";
35 Icon = "icon/tank_sink";
36
37 VARIABLES
38 in Inlet as oil_stream(Brief="Inlet stream", PosX=0, PosY=0.5);
39 end
40
41
42 Model heat_stream
43 VARIABLES
44 T as temperature;
45 end
46
47 Model steam
48 ATTRIBUTES
49 Palette = true;
50 Brief = "Simple inlet stream";
51 Icon = "icon/tank_source";
52
53 VARIABLES
54 out Outlet as heat_stream(Brief="Outlet stream", PosX=1, PosY=0.5);
55 end
56
57
58 #*-----
59 *----- Model of one tank -----*
60
61 Model heated_tank
62 ATTRIBUTES
63 Palette = true;
64 Brief = "Simple model of a steady-state CSTR";
65 Icon = "icon/heated_tank";
66
67 PARAMETERS
68 UA as Real(Brief="heat transfer coefficient and area", Unit='kJ/min/K');
69
70 VARIABLES
71 in Inlet as oil_stream (Brief="Inlet stream", PosX=0.51, PosY=0);
72 out Outlet as oil_stream (Brief="Outlet stream", PosX=1, PosY=0.975);
73 in InletQ as heat_stream(Brief="Rate of heat supply", PosX=0, PosY=0.715);
74 M as mass (Brief="Mass in tank");
75 Q as heat_rate(Brief="Rate of heat transferred", DisplayUnit='kJ/min');
76
77 SET
78 UA = 10*'kJ/min/K';
79
80 EQUATIONS
81 "Energy balance"
82 (M*Outlet.cp)*diff(Outlet.T) = Inlet.w*Inlet.cp*(Inlet.T
83 - Outlet.T) + Q;
84
85 "Rate of heat transferred"
86 Q = UA*(InletQ.T - Outlet.T);
87 end
88

```

Figura 1 – Representação de entidades do problema real em entidades da linguagem de modelagem.

A Figura 2 representa o problema global utilizando-se o recurso de composição para criar a estrutura de **FlowSheet** a partir da interconexão entres os **DEVICES** que usam os **Models** desenvolvidos na Figura 1.

```

89 #*-----
90 *----- Three tanks in series -----*
91
92 #*-----
93 FlowSheet series_of_tanks
94 VARIABLES
95 feed as oil_stream;
96
97 DEVICES
98 steam1 as steam;
99 steam2 as steam;
100 steam3 as steam;
101
102 tank1 as heated_tank;
103 tank2 as heated_tank;
104 tank3 as heated_tank;
105
106 CONNECTIONS
107 feed to tank1.Inlet;
108 tank1.Outlet to tank2.Inlet;
109 tank2.Outlet to tank3.Inlet;
110
111 steam1.Outlet to tank1.InletQ;
112 steam2.Outlet to tank2.InletQ;
113 steam3.Outlet to tank3.InletQ;
114
115 SPECIFY
116 feed.T = 293.15*'K';
117
118 steam1.Outlet.T = 523.15*'K';
119 steam2.Outlet.T = 523.15*'K';
120 steam3.Outlet.T = 523.15*'K';
121
122 tank1.M = 1000*'kg';
123 tank2.M = tank1.M;
124 tank3.M = tank2.M;
125
126 INITIAL
127 tank1.Outlet.T = 293.15*'K';
128 tank2.Outlet.T = tank1.Outlet.T;
129 tank3.Outlet.T = tank2.Outlet.T;
130
131 OPTIONS
132 TimeStart = 0;
133 TimeStep = 1;
134 TimeEnd = 90;
135 TimeUnit = 'min';
136 end
137

```

Figura 2 – Representação do processo global com os dispositivos conectados entre si.

A Figura 3 ilustra a solução do problema proposto n° 6. Os dados gerados podem ser graficados e visualizados na mesma interface, como visto nesta figura, ou mesmo exportados para manipulação em outras ferramentas matemáticas como **SCILAB**® (Consortium Scilab – INRIA, ENPC), **MATLAB** e **OFFICE EXCEL**.

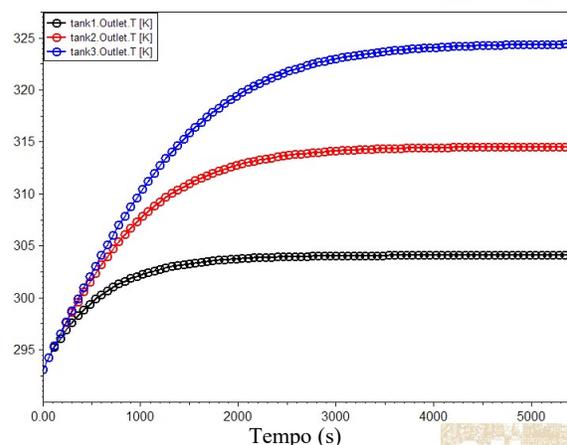


Figura 3 – Solução do problema proposto n° 6: evolução da temperatura (K) para os 3 tanques ao longo do tempo (s), obtido no EMSO.

Uma representação alternativa das linhas de códigos da Figura 2 seria o uso do

diagrama de blocos. A Figura 4 ilustra esta representação para este mesmo problema. Tal recurso torna os problemas mais flexíveis por facilitar a inserção e visualização de valores como também por tornar a composição ilimitada, extrapolando-se para novas situações sem trabalho de reprogramação de código.

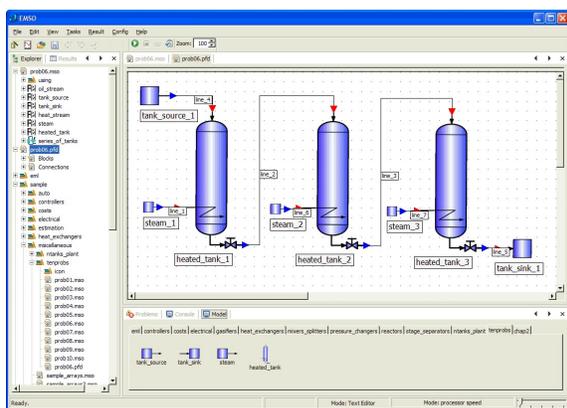


Figura 4 – Uso da interface de diagramas de blocos para representação do fluxograma.

As implementações completas de todos os problemas também podem ser acessadas diretamente na biblioteca de modelos da última distribuição do EMSO. Consultando-se a página do projeto ALSOC podem-se ainda obter as últimas atualizações dos problemas.

6. CONCLUSÕES

Por ser um simulador de processos de uso geral, o EMSO mostra-se bastante versátil ao unir características de simuladores de processos (linguagem de modelagem estrutura, pacote de propriedades físicas e interface de diagrama de blocos) e de ferramentas matemáticas genéricas (pacotes numéricos e representação gráfica de resultados). Neste sentido o EMSO constitui-se em uma ferramenta de engenharia completa e ideal para os objetivos propostos neste trabalho.

7. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o suporte financeiro dado ao Projeto ALSOC pela FINEP e as empresas que compõem o consórcio.

8. REFERÊNCIAS

BICCA, G. B.; SECCHI, A. R.; WADA, K. *Modelagem estruturada de trocadores de calor casco e tubos*. In: XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 2006. Santos. p.2364-2371.

CUTLIP, M. B. *et al.* A collection of 10 numerical problems in Chemical Engineering solved by various mathematical software packages. *Comp. App. in Eng. Edu.* v.6, n.3, p.169-180, 1998.

CUTLIP, M. B.; SHACHAM, M. *Polymath*, version 4.1, Willimantic, 1998.

RODRIGUES, R. *et al.* *Ensino de cinética e cálculo de reatores químicos utilizando o simulador EMSO*. In: XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 2006. Santos. p.3986-3993.

SOARES, R. P. *Desenvolvimento de um simulador genérico de processos dinâmicos*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Escola de Engenharia. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.

SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. *Emso: a new environment for modelling, simulation and optimization*. In: ESCAPE 13, 2003. Lappeenranta: Elsevier Science Publishers. p.947-952.

STAUDT, P. B.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. *Dynamic simulation of reactive distillation processes to predict start-up behavior*. In: 8th International IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, 2007. Cancún. p.285-290.

