

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA DE CAMPINAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE SISTEMAS QUÍMICOS

DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA PARA SIMULAÇÃO
MACROSCÓPICA DE PROCESSOS QUÍMICOS COMPLEXOS

Autor: Florival Rodrigues de Carvalho

Orientador: Prof^o Dr. João Alexandre F.R. Pereira

Tese submetida à Comissão de Pós-Graduação da
Faculdade de Engenharia de Campinas - UNICAMP
38/89 como parte dos requisitos necessários para
obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Qui-
mica

Campinas - SP - Brasil

Agosto - 1989

*Este exemplar corresponde à Redação Final da Tese
defendida por FLORIVAL R. CARVALHO e aprovada pela
comissão Julgadora em 04/08/89*
mlm

UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas

Faculdade de Engenharia de Campinas

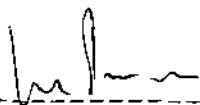
Engenharia Química

"DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA PARA SIMULAÇÃO
MACROSCÓPICA DE PROCESSOS QUÍMICOS COMPLEXOS"

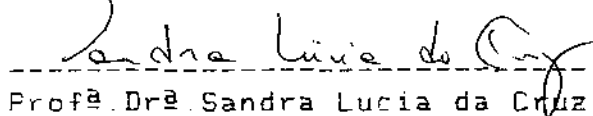
Autor: Florival Rodrigues de Carvalho

Tese submetida à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia de Campinas - UNICAMP como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de "MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA"

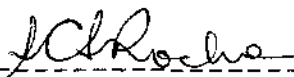
Aprovado por:



Prof^o. Dr. João Alexandre F. da Rocha Pereira
(Orientador)



Prof^a. Dr^a. Sandra Lucia da Cruz



Prof^a. Dr^a. Sandra Cristina S. Rocha

Campinas-SP-Brasil
04 de Agosto 1989

Agradeço

a todos que contribuíram para realização deste trabalho, em especial ao Professor Doutor João Alexandre F.R. Pereira pela orientação e incentivos.

ÍNDICE

	pag.
CAPÍTULO 1 - Introdução	1
CAPÍTULO 2 - Análise da Literatura	5
2.1 - Introdução	6
2.2 - Principais programas executivos de simulação	6
2.3 - Representação modular do processo	8
2.4 - Interação operador-programa executivo	10
2.5 - Unidade computacional ou unidade modular	11
2.6 - Processo de criação de um programa executivo	12
2.7 - Classificação dos programas de simulação	13
2.8 - Principais fases de um programa executivo	14
2.8.1 - Fase de entrada de dados	14
2.8.2 - Fase de processamento	15
2.8.3 - Fase de saída de dados	17
2.8.4 - Banco de dados	17
2.9 - Conclusões	18
CAPÍTULO 3 - Desenvolvimento de um programa executivo	20
3.1 - Introdução	21
3.2 - Informações básicas a respeito de computador e linguagem de programação	22
3.3 - Estrutura do programa	23
3.4 - Entrada de dados	26
3.4.1 - Matriz do Processo	27
3.5 - Matriz de Incidência	35
3.6 - Matriz Conexão das Correntes	37
3.7 - Matriz de Adjacências	39
3.8 - Identificação das correntes de entrada	39
3.9 - Informações das correntes de entrada	41
3.10 - Determinação de sequência de cálculo	43

3.11 - Identificação dos recírculos	45
3.12 - Determinação das correntes de corte	51
3.13 - Gerenciamento dos módulos	57
3.14 - Cálculo das unidades modulares	59
3.14.1 - Área em comum	61
3.14.2 - Admissão dos parâmetros	61
3.15 - Teste de convergência dos resultados	64
3.16 - Impressão dos resultados	67
CAPÍTULO 4 - Desenvolvimento das unidade modulares	68
4.1 - Introdução	69
4.2 - Misturador adiabático (MIT)	69
4.3 - Divisor de correntes (DIV)	71
4.4 - Separador (SEP)	72
4.5 - Flash (FLASH)	74
4.6 - Reator (REA)	76
4.7 - Absorvedor isotérmico (ABSI)	78
4.8 - Termostato (TER)	80
4.9 - Bomba (BOMBA) e Compressor (COMP)	81
4.10 - Válvula (VALV)	82
CAPÍTULO 5 - Processos simulados usando o programa proposto.	84
5.1 - Introdução	85
5.2 - Processo I - Misturador - Divisor de corren- tes - Termostato - Separador	86
5.3 - Processo II - Misturador - Reator - Termosta- to - Separador - Flash - Bomba - Divisor de correntes - Absorvedor isotérmico	91
5.4 - Processo III - Planta para destilação de ál- cool	100
5.5 - Processo IV - Planta para produção de ácido nitríco	107

5.6 - Processo V - Planta de ácido sulfúrico	113
5.7 - Conclusão	119
CAPÍTULO 6 - Conclusões e Sugestões	120
6.1 - Conclusões	121
6.2 - Sugestões	122
APÊNDICE A - Relação entre código, nome, conteúdo, e tipo dos arquivos	124
APÊNDICE B - Relação dos arquivos criados para ar- mazenar os parâmetros das unidades modulares	125
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	126

RESUMO

Neste trabalho foi desenvolvido um programa executivo para a simulação de processos químicos complexos, no estado estacionário, tipo "black-box", tendo como objetivo a determinação do balanço de massa global para todas as unidades do processo.

O programa foi desenvolvido seguindo uma concepção estrutural, que permite uma ampla flexibilidade, podendo ser útil aos mais variados processos existentes na indústria e especialmente para processos em que se verifica a presença de ciclos de produtos.

O sistema computacional determina uma sequência básica de operacionalidade, iniciando com a entrada de dados referente a topologia do processo, isto é, os equipamentos e as ligações entre eles, e a partir destes dados, identifica a presença dos ciclos existentes, determina a sequência ótima de cálculo das unidades do processo, acessa os parâmetros das unidades modulares e gerencia a execução dos cálculos, automatizando as iterações até que a tolerância admitida como critério de convergência seja atingida.

A forma de gerenciamento permite apagar da memória central de processamento (CPU), as etapas do programa executivo que já foram anteriormente utilizadas e que não mais interessam para a execução das etapas posteriores, cria vários arquivos e coordena o fluxo de informações entre os arquivos e as unidades modulares, o uso destes artifícios de programação, é de grande valia para a otimização da CPU e viabiliza o uso do programa em computadores de pequeno porte.

As unidades modulares desenvolvidas, representam praticamente todos os equipamentos mais comumente presentes em processos químicos. Na biblioteca de módulos estão arquivados as seguintes

unidades: REA (Reator), MIT (Misturador), DIV (Divisor de fluxo), TER (Termostato), SEP (Separador), FLASH (Flash), ABSI (Absorvedor Isotérmico), BOMBA (Bomba), COMP (Compressor) e VALV (Válvula) e sendo necessário, é possível criar novas unidades modulares e anexá-las as demais.

O programa foi desenvolvido para microcomputadores compatíveis com o IBM-PC. A escolha deste tipo de computador é devido ao fato da existência de uma grande quantidade de unidades deste modelo em uso no país, das facilidades da sua aquisição e manuseio, o que torna o programa acessível a um grande número de usuários, e também, uma maior vida útil.

1. INTRODUÇÃO

INTRODUÇÃO

Após a revolução industrial no século passado na Inglaterra, alteram-se fundamentalmente as relações até então existentes entre, a força de trabalho, os meios de produção e o capital. A produção artesanal que era responsável pela manufatura dos bens de consumo, cede espaço para uma nova forma de produção, onde estes mesmos bens são produzidos em maiores quantidades e de melhor qualidade, dá-se então, o advento da fábrica. A industrialização passa a ser a forma e meio para atender as necessidades cada vez mais crescentes das populações.

Com o surgimento da indústria e a sua potencialidade de produzir mais e criar novos produtos, ergue-se concomitantemente uma nova ciência, denominada de Tecnologia. O avanço tecnológico foi a alavanca que propulsou as grandes riquezas gerada neste século e isto se evidencia nos dias de hoje. Os países possuidores de tecnologia proporcionam o bem estar de sua população, enquanto que, os países não detentores de tecnologia, suas populações padecem de diversos males.

Um dos maiores feitos do avanço tecnológico nas três últimas décadas, foi sem dúvida nenhuma, a criação e popularização dos computadores. Através destas máquinas esplêndidas foi possível gerar e acumular conhecimento em um espaço de tempo sensivelmente curto.

Particularizando esta análise para a área de nosso interesse, ou seja, a indústria de processos químicos, verifica-se uma notável contribuição que a tecnologia tem prestado a nossa causa, o uso de computadores torna-se cada vez mais frequente e os resultados obtidos a partir deste casamento tem sido notório.

A simulação de processos químicos é uma das áreas da Engenharia Química onde a utilização do computador tornou-se essencial, constituindo-se um meio imprescindível para a análise e otimização de novos processos ou de processos já existentes.

Os programas executivos para a simulação de processos, têm despertado bastante interesse nos últimos anos por parte de pesquisadores e engenheiros em todo o mundo, isto pode ser constatado pelo grande número de trabalhos publicados nas revistas especializadas, oriundos dos mais diferentes países. Um detalhe importante é que, a maioria destes programas foram desenvolvidos por profissionais contratados pelas empresas, cujo objetivo é de criar e aperfeiçoar programas executivos.

Os programas executivos existente no mercado, são em sua grande maioria desenvolvidos para serem usados em grandes computadores, isto restringe o uso destes programas a um número muito pequeno de usuários, geralmente as grandes empresas. A partir do anos 80, com a propagação dos microcomputadores, observa-se segundo a literatura mais recente, uma preocupação de desenvolver programas executivos, com a finalidade de atingir usuário de microcomputador e por conseguinte as pequenas empresas.

No Brasil, a dependencia tecnológica neste setor é total, não existe programas nacionais disponíveis no mercado, há pacotes desenvolvidos por empresas estrangeiras, e que nem sempre atende as necessidades e especificidades das indústrias brasileiras.

Nos capítulos seguintes, apresentaremos as diversas fases do programa executivo por nos desenvolvido. No capítulo 2 trataremos da revisão bibliográfica, onde são analisados os programas executivos descritos na literatura. No capítulo 3 descreveremos os fluxogramas e as técnicas computacionais usadas para transcrever todas as informações em linguagem de programação. No capítulo 4

teremos a biblioteca de módulos, neste capítulo é feito a modelagem matemática de cada equipamento e a denominação do módulo correspondente. No capítulo 5 realizaremos uma série de testes, simulando diversos processos químicos que se encontram em operação, e a partir dos resultados obtidos é feita uma análise da precisão, eficiência e flexibilidade do programa que estamos propondo. Por último no capítulo 6 são feitas as conclusões e as sugestões para futuros trabalhos.

2. ANÁLISE DA LITERATURA

2.1 INTRODUÇÃO

Nas últimas três décadas, tem tido um enorme crescimento o desenvolvimento e sofisticação dos computadores e seus aplicativos. Isto por sua vez, tem dado novas dimensões na síntese, no projeto e na análise de sistemas. Qualquer sistema físico semelhante a uma planta industrial, um avião, um veículo, ou uma análise econômica pode ser adequadamente e realisticamente representado por seus modelos matemáticos para um estudo detalhado, em tempo relativamente curto, através do uso de computadores. Esta atividade é denominada de simulação.

Na área da Engenharia Química, a simulação de processos químicos no estado estacionário, tem tido uma intensa atividade nos últimos anos, haja visto o grande número de artigos publicados nas revistas especializadas, os livros editados e a quantidade de programas de simulação existente no mercado.

A revisão da literatura mostrando a evolução da simulação de processos químicos, foi feita por Motard et al. (1975) e por Evans et al. (1976). Na década de 80 as principais revisões da literatura foram feitas por Rosen (1980) e Husain (1986).

2.2 PRINCIPAIS PROGRAMAS EXECUTIVOS DE SIMULAÇÃO

Muitos artigos foram escritos e publicados no últimos anos a respeito de vários tópicos da simulação de processos químicos no estado estacionário, alguns destes artigos fazem rápidas ou até mesmo detalhadas descrições sobre determinados programas de simulação.

O conhecimento das características dos programas e dos métodos utilizados no desenvolvimento destes, tem contribuído subs-

tancialmente no desenvolvimento de programas similares em todo o mundo.

Os programas executivos geralmente são desenvolvidos em empresas privadas (indústrias e firmas de consultoria) e em instituições acadêmicas.

A seguir mostraremos uma relação dos principais programas executivos para a simulação de processos químicos no estado estacionário.

Nome do Programa	Organização onde foi Desenvolvido
Indústria	
CHEOPS	Shell Development Co. U.S.A.
CHEVRON	Chevron Research Co., U.S.A.
NETWORK 67	Imperial Chemical Industries, U.K.
SCOPE (66)	Diamond Shamrock Co., U.S.A.
FLOWTRAN	Monsanto Company, U.S.A.
GMB	Badger Company, U.S.A.
Firmas de Consultoria	
FLEXIBLE FLOWSHEET	M.W. Kellogg Co., U.S.A.
PACER-245	Digital Systems Corpn., U.S.A.
Instituições Acadêmicas	
CHESS	U. of Houston, U.S.A.
GEMICS	McMaster University, Canada
PACER	Dartmouth College, London
SPEED-UP	Imperial College, London
SIMUL	Eotvos Loránd University, Budapest
ASPEN	MIT, Cambridge, MA, U.S.A.
PROCESS	

Figura 2.1 Mais conhecidos Programas Executivos.

2.3 REPRESENTAÇÃO MODULAR DO PROCESSO

Os programas executivos foram desenvolvidos usando modelos matemáticos que representam os equipamentos existente na maioria dos processos químicos. Para executar a simulação, é necessário compatibilizar a planta que se deseja simular, com a estrutura na qual foi desenvolvido o programa, de tal forma, que o sistema computacional possa identificar cada equipamento ou cada conexão do processo.

Vejamos como exemplo a planta mostrada na Figura 2.2. Da forma em que o processo está sendo mostrado, é impossível para qualquer programa executivo realizar qualquer espécie de cálculo.

A Figura 2.3 mostra o diagrama de fluxo do processo mostrado na Figura 2.2. Porém, as informações básicas contidas no fluxograma do processo químico mostrado na Figura 2.3, ainda não se encontra numa forma apropriada para serem usadas pelo programa de simulação. Para tanto, este fluxograma é traduzido para um fluxograma de informações, ver Figura 2.4.

No fluxograma de informações, são utilizados os nomes da unidade modulares, ao invés dos nomes dos equipamentos do processo. As conexões entre as unidades representam o fluxo mássico e energético da planta do processo químico.

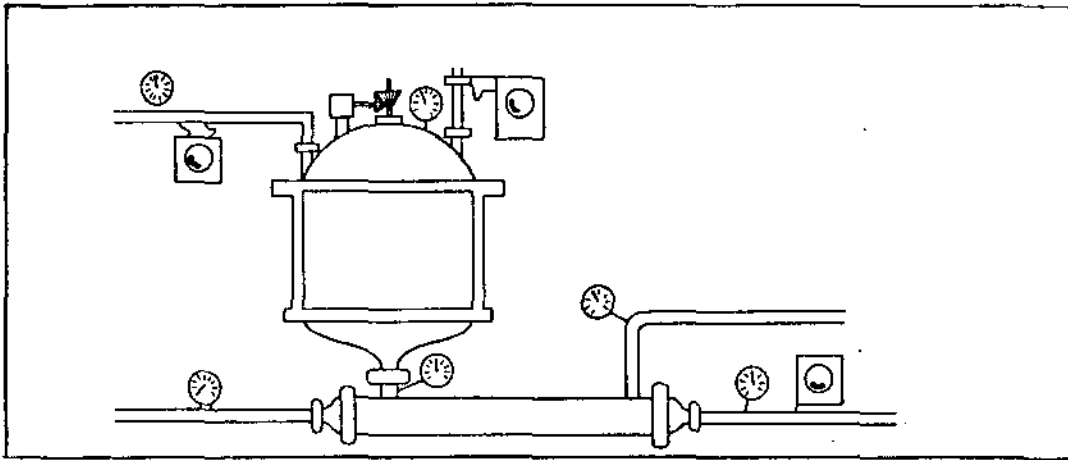


Figura 2.2 - Planta para ser simulada.

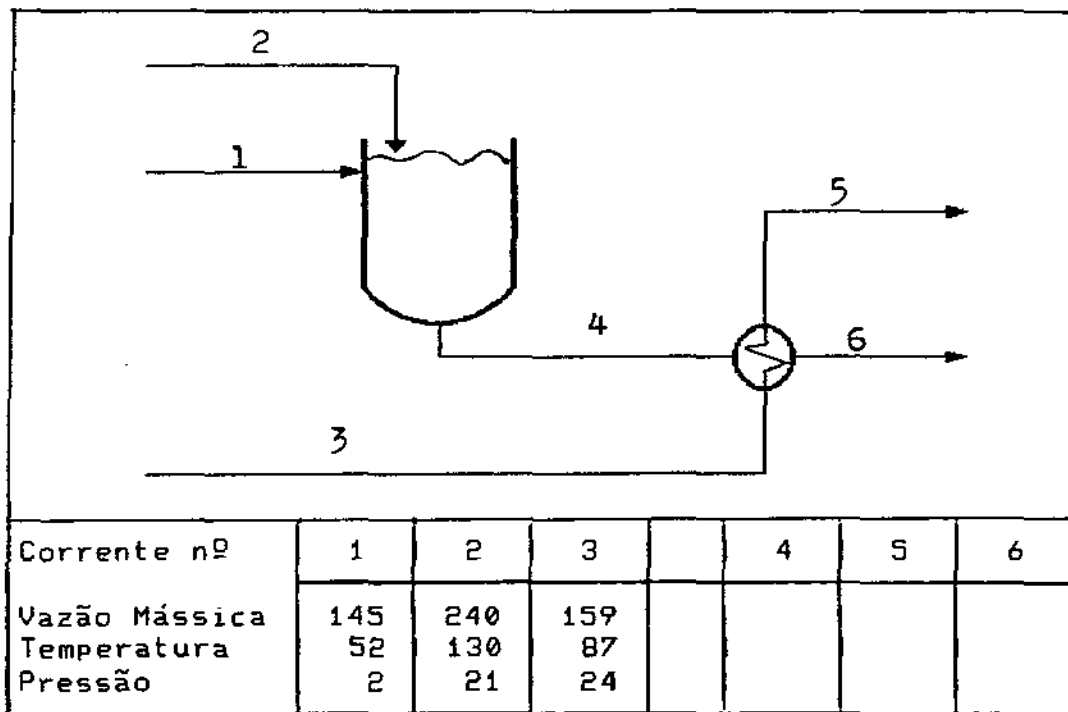
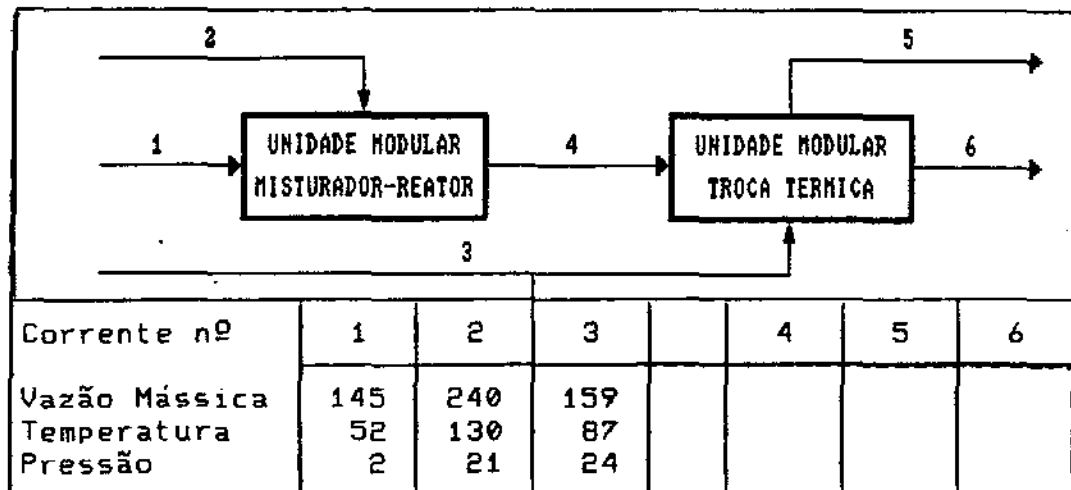


Figura 2.3 - Diagrama de fluxo do processo.



entrada

saída

Figura 2.4 - Representação modular do processo.

2.4 INTERAÇÃO OPERADOR-PROGRAMA EXECUTIVO

O operador do computador e portanto usuário do programa executivo, é de fundamental importância o seu conhecimento sobre o programa para o êxito da simulação. A sintonia que deve existir entre operador-programa é mostrado na Figura 2.5.

o que o operador precisa oferecer	o que o programa executivo oferece
condições de entrada	lê os dados de entrada e guarda em memória
sequência de cálculos (se desejada) e informação das correntes e equipamentos	determina a sequência de cálculos, se esta não for fornecida
modelos matemáticos (unidade modular) de todos os equipamentos	desempenho da unidade computacional na própria ordem
informação para instruir o programa executivo a imprimir ou tomar outras decisões	escreve e armazena os resultados dos cálculos
interpretação dos resultados	resposta

Figura 2.5 - Interação entre o operador e o programa executivo

2.5 UNIDADE COMPUTACIONAL OU UNIDADE MODULAR

O modelo matemático que prediz o que ocorre internamente a um equipamento industrial é chamado de Unidade Computacional. Geralmente a correlação entre a Unidade Computacional e os equipamentos onde se realizam as operações unitárias é feito na proporção de um-para-um, ou seja, cada Operação Unitária só pode ser representada por uma única Unidade Computacional correspondente, por exemplo, a Unidade Computacional de troca térmica representa apenas um trocador de calor, e somente um.

A Figura 2.6 mostra uma Unidade Computacional e a sua interação com as demais fases de um programa executivo.

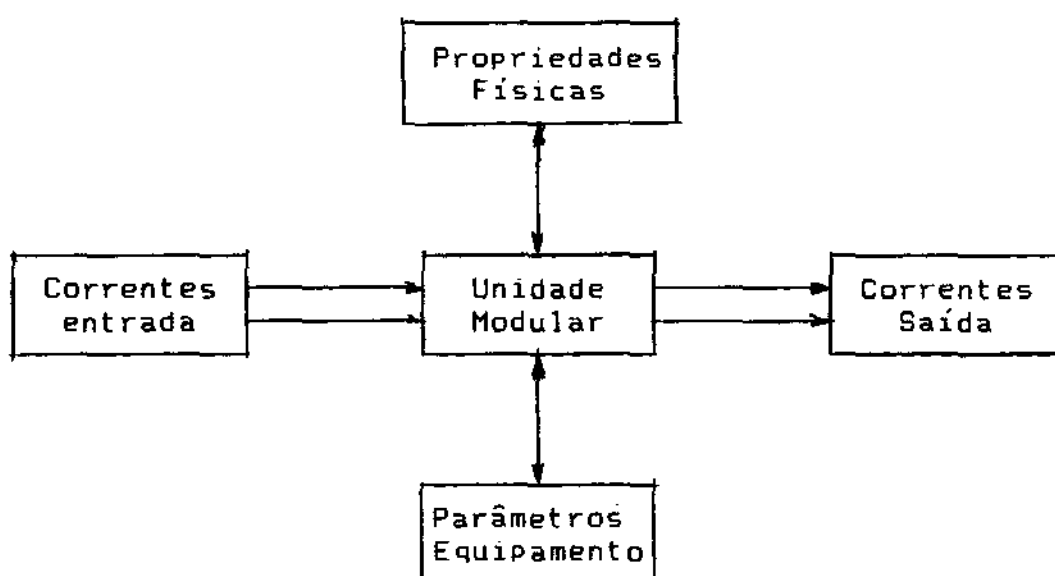


Figura 2.6 - Modelo de Unidade Modular.

A Unidade Computacional também é conhecida como Unidade Modular ou como bloco. Neste trabalho será utilizada a denominação de Unidade Modular.

2.6 PROCESSO DE CRIAÇÃO DE UM PROGRAMA EXECUTIVO

O processo de criação de um programa executivo é uma tarefa complicada e que envolve uma rotina de métodos, planejamento e harmonia. São várias as particularidades a serem analisadas, o que contribui de forma favorável no aumento da complexibilidade do sistema computacional. O manuseio dos detalhes requer uma minuciosa planificação e alocação de tempo e de pessoal.

A Figura 2.7 apresenta a estratégia sugerida para o equacionamento do problema.

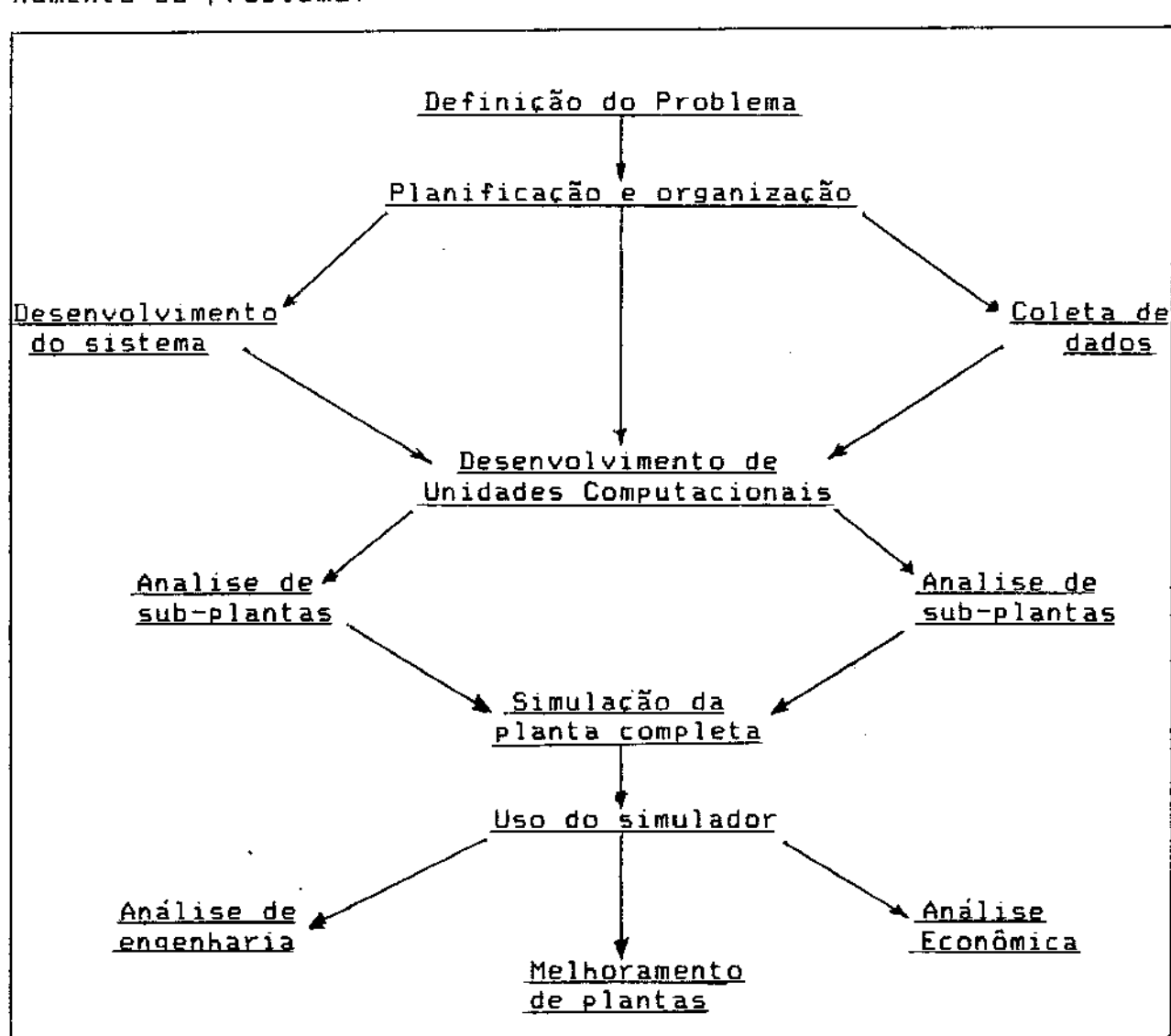


Figura 2.7 - Sugestão de estratégia global.

Fazendo uma análise mais detalhada da Figura 2.7 temos: A primeira fase é a definição do problema, as questões para serem respondidas são determinadas, e a decisão de se adotar uma simulação é feita baseada em uma análise econômica e na quantidade de informações disponíveis. A planificação inclui os estágios de organização de pessoal; treinamento no uso de computadores e na escolha do sistema mais apropriado; convenção na linha de comunicação, definição da nomenclatura; construção de sub-rotinas; determinação de um banco de dados contendo as propriedades físicas dos componentes, parâmetros usado na construção dos equipamentos e dados obtidos junto a planta industrial; e por fim, a construção e análise dos modelos.

2.7 CLASSIFICAÇÃO DOS PROGRAMAS DE SIMULAÇÃO

Kehat e Shacham (1973) classificam os programas executivos de acordo com suas estruturas e possibilidades de uso. Segundo esta classificação, um programa de simulação pode ser dividido em duas categorias: os específicos para a simulação de um processo particular e os de estrutura modular de múltiplo uso.

Os programas de simulação específicos foram desenvolvidos para simulação de um processo particular, sua utilização é restrita para o processo para o qual ele foi desenvolvido. Geralmente estes programas são desenvolvidos por empresas de consultoria com a finalidade de atender as indústrias onde os processos já se encontram instalados, ou então, nos novos processos, o programa de simulação é desenvolvido na mesma empresa responsável pela criação do processo químico.

Na estrutura modular, cada etapa do processo é descrita por um modelo matemático, denominado de unidade modular. As unidades

modulares são conectadas através do conjunto de informações representativas das correntes materiais e do fluxo energético do processo, cabendo ao programa executivo, supervisionar o fluxo de informação entre os módulos. Esta estrutura é a mais difundida entre os programas de simulação já desenvolvidos.

2.8 PRINCIPAIS FASES DE UM PROGRAMA EXECUTIVO

2.8.1 FASE DA ENTRADA DE DADOS

A entrada de dados é uma fase comum a qualquer programa executivo de simulação, a diferença entre eles reside na forma de introduzir os dados e na quantidade de informações a serem fornecidas.

Entre os dados de entrada comumente requeridos por todos os programas, estão aqueles que fornecem informações acerca da topologia do processo, correntes de alimentação, dados de propriedades físicas, parâmetros de projetos das unidades, critérios de convergência e sequência de cálculo, quando esta não é determinada pelo programa, assim como em certos casos quando cálculos de otimização de custos estão envolvidos, são necessários também parâmetros de custos e critérios de otimização.

Alguns programas prevendo futuros erros durante a etapa de digitação de dados, são dotados de subrotinas que verificam a consistência dos dados introduzidos. Quando um dado é inconsistente ou então foi introduzido de forma errada, a subrotina alerta ao operador e imediatamente emite um diagnóstico do erro cometido, e em muitos casos, orienta como o operador deve proceder para realizar a correção.

2.8.2 FASE DO PROCESSAMENTO

Os processos químicos em geral são analisados sob o aspecto da simulação, se existe ou não a presença de reciclo de produtos. Os processos onde não existe a presença de reciclos, o balanço de massa ou o balanço térmico, é feito de forma sequenciada, unidade após unidade, evidentemente as primeiras unidades a serem calculadas serão aquelas onde os valores das correntes de entrada são conhecidos. Para os processos com reciclos de material ou energia, a forma de cálculo do balanço de massa ou balanço térmico, não pode ser realizado de forma tão simples, como no caso anterior.

Há dois caminhos básicos e diferentes para resolver os processos com reciclos. Uma alternativa é o cálculo sequencial, onde são atribuídos valores iniciais às correntes dos reciclos, executado um cálculo iterativo, e analisada a variação dos valores das correntes arbitradas, até que o critério adotado como tolerância seja atingido. Uma outra alternativa é o cálculo simultâneo, isto é, todas as unidades serão calculadas de uma única vez por algum método numérico.

- Cálculo Sequencial

O cálculo sequencial consiste no cálculo das unidades, uma após outra, porém esta sequência não obedece necessariamente o percurso realizado pelo fluxo mássico. A sequência ótima de cálculo é determinada a partir da identificação dos reciclos e das correntes denominadas como de corte. Conhecida as correntes de corte, a elas são atribuídos valores iniciais para a execução da primeira iteração, nas demais iterações os valores das correntes de corte são comparados, até que a variação entre os valores da

iteração vigente e da iteração anterior, seja menor que o critério adotado como tolerância do erro.

A sequência ótima de cálculo é aquela que contém o menor número de correntes de corte, e que minimiza o tempo computacional para um dado processo.

Na literatura encontram-se diversos trabalhos realizados com a finalidade de se determinar a sequência ótima de cálculo. Rubin (1962), Sargent e Westerberg (1964), Lee e Rudd (1966), Shannon et al. (1966), Tiernan (1970) e Montagna e Iribarren (1980) são alguns dos autores que publicaram artigos sobre a sequência de cálculo. Neste trabalho foi usado o método de Tiernan, e uma discussão mais aprofundada sobre este método é feita na seção 3.11.

- Cálculo Simultâneo

A solução dos processos com recírculos através do cálculo simultâneo de todas as unidades, foi estudado por Nagiev (1957), Rosen (1962), Naphtali (1964), Ravicz e Norman (1964), Umeda e Nishio (1972), Weisenfelder e Olson (1979) e Mahelec et al (1979).

Quando as equações envolvidas são lineares ou linearizadas, o cálculo do processo requer apenas a solução direta através do uso de métodos matriciais para se obter a resposta. O sistema de equações é construído fazendo o balanço global para cada componente ou para o fluxo total da massa em cada unidade.

A construção do sistema de equações quando o processo envolve vários componentes e várias unidades é extremamente complexo, principalmente quando o sistema envolve equações não lineares, por esta razão o cálculo simultâneo é pouco difundido entre os programas executivos.

2.8.3 FASE SAÍDA DE DADOS

A saída de dados na maioria dos programas executivos de simulação é feita da seguinte forma: Primeiro são impressos os valores intermediários, e por fim é feita a impressão do relatório final.

Os dados referentes a topologia do processo, correntes de alimentação, identificação dos recírculos, correntes de corte, sequência ótima de cálculo, parâmetros de projeto, valores iniciais atribuídos às correntes de corte e os critérios de tolerância admitidos para a convergência do resultado são impressos à medida que vão sendo introduzidos ou gerados pelo sistema computacional. Ao término de cada iteração, é emitido um relatório intermediário para cada corrente de corte, contendo os valores da iteração anterior, da iteração vigente, como também, o erro percentual de cada variável do sistema.

O relatório final da maioria dos programas executivos apresenta as mesmas variáveis, e diferem apenas no lay-out. Geralmente são impressos para cada corrente do processo, os valores da vazão mássica, temperatura, pressão, composição, entalpia, sendo que, em alguns casos, também se imprime a densidade e outras propriedades físicas dos componentes.

2.8.4 BANCO DE DADOS

O banco de dados é uma outra estrutura comum aos programas executivos de simulação. Nos bancos de dados são armazenadas informações referentes aos componentes e suas propriedades físicas, como por exemplo, peso molecular, densidade, parâmetros para estimar a pressão de vapor, etc.

2.9 Conclusão

Neste capítulo foi feita uma análise sobre os principais programas executivos existentes. Discutiu-se a estratégia e os critérios usados na construção dos programas, o tipo de estrutura, as principais fases, como adaptar a planta do processo para uma estrutura compatível com o programa, e a forma de como o operador deve interagir no programa.

A Figura 2.1 mostra os principais programas executivos, todos eles foram desenvolvidos em indústrias, firmas de consultoria e instituições acadêmicas, todas estrangeiras e na sua grande maioria situadas nos Estados Unidos. Um outro detalhe importante é que estes programas foram desenvolvidos para uso em computadores de grande porte e conseqüentemente o uso do programa é limitado apenas as empresas com condições de adquirir este tipo de computador.

O programa executivo que apresentamos neste trabalho, é semelhante aos demais existentes no mercado para efeito do cálculo do balanço de massa global. Foi desenvolvido com as mesmas características quanto a estrutura modular e forma de cálculo sequenciada, porém difere substancialmente na modelagem matemática usada nas unidades modulares e no tipo de computador utilizado.

O programa também fornece a sequência ótima de cálculo das unidades e segundo a literatura poucos programas de simulação indicam a ordem na qual as unidades vão ser calculadas.

A estrutura da unidade modular é do tipo "black-box", portanto só interessa os dados de entrada e de saída do módulo e sabendo-se os parâmetros básicos do equipamento e valor das variáveis das correntes de entrada, a estrutura "black-box" permite

calcular os valores das correntes de saída.

O computador utilizado foi um micro compatível com IBM-PC, de grande disponibilidade no mercado e com o preço bastante razoável.

Pelas razões que acabamos de expor, se justifica o desenvolvimento de um programa nacional, para ser usado em microcomputadores e que atenda as necessidades de um grande número de empresas que até então se encontram desassistidas.

3. DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA EXECUTIVO

3.1 INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, foi intenso o esforço de pesquisadores e profissionais da Engenharia Química em desenvolver programas executivos para a simulação de processos químicos no estado estacionário. Geralmente estes estudos foram realizados em grandes institutos de pesquisa ou em grandes empresas, onde se dispunha de computadores de grande porte, com alta velocidade de processamento e uma grande capacidade de armazenar informações. Isto decorre basicamente devido ao fato de os programas de simulação manipularem um grande número de variáveis, ocasionando uma demanda de grande capacidade de memória e a utilização frequente, por estes programas, de métodos iterativos de cálculos que requerem um grande tempo de processamento.

Em muitos casos, os sistemas foram construídos tão complexos e sofisticados quanto eram as possibilidades, isto não só obrigava o uso dos grandes computadores, como também, da disponibilidade de tempo para a execução. Em decorrência desses fatores, o sistema torna-se excessivamente caro quando se quer simular processos menores, principalmente aqueles que estão localizados em lugares com limitadas possibilidades de se instalar uma rede de terminais. Com a intenção de contornar estas dificuldades, o sistema computacional que apresentamos neste trabalho, foi desenvolvido no propósito de atender as seguintes comodidades:

- Fácil manipulação
- Linguagem de programação de fácil entendimento (BASIC)
- Redução do tempo de execução
- Possibilidade de utilização do sistema independente da rede de terminais
- Utilização de microcomputador

3.2 INFORMAÇÕES BÁSICAS A RESPEITO DO COMPUTADOR E LINGUAGEM DE PROGRAMAÇÃO

O programa aqui descrito foi escrito em linguagem de programação BASIC para microcomputador compatível com o IBM-PC. As propriedades de ambos, computador e linguagem influenciam a estrutura e algumas características específicas do programa.

A escolha deste tipo de computador origina-se no pressuposto de qual será o objetivo deste programa. Anteriormente já mencionamos os principais problemas enfrentados pelas empresas de menor porte em simular seus processos, em virtude de não dispor de meios para aquisição de grandes computadores e da dificuldade de se instalar uma rede de terminais. A justificativa da nossa preferência pelo uso de microcomputadores, esta em decorrência dos micros terem um preço relativamente baixo, que os torna acessível para a maioria das empresas.

O computador utilizado foi o micro da linha PC-XT, com capacidade de memória de 640 Kbytes, acoplado a um disco rígido de 20 Mbytes e duas unidades de disco flexível de 5 1/4 polegadas, face dupla, com capacidade de armazenamento de 350 Kbytes por unidade, terminal de vídeo e impressora.

Embora a maioria dos programas executivos já desenvolvidos utilizem a linguagem FORTRAN, optamos por construir o programa em linguagem BASIC. Esta escolha se justifica pelas seguintes razões:

- Existência de comandos específicos que possibilitam o uso de forma racional da tela do monitor de vídeo
- Possibilidade de definir funções de multi-instruções, que pode ser usada ao invés de sub-rotinas
- Uso de variáveis em cadeias

- Facil manipulação de dados e de programas armazenados na memória
- Transferência eficiente de informações entre os módulos do programa

É evidente que este tipo de computador e de linguagem têm suas restrições. A principal desvantagem é que o BASIC utiliza apenas 64 Kbytes de memória, isto limita bastante o tamanho do programa, principalmente quando é necessário dimensionar vetores e matrizes, como é o caso dos programas de simulação.

Para suprir esta deficiência, sem sacrificar a generalidade do sistema, é necessário o uso de técnicas computacionais para otimizar a capacidade de memória disponível pelo computador. O artifício mais frequente é a divisão do programa em etapas denominadas de sub-programas, onde os dados de saída de um sub-programa são admitidos como dados de entrada do sub-sequente. Deste modo somente a fração do programa efetivamente envolvido com uma dada etapa do processamento permanece residente na memória de CPU.

3.3 ESTRUTURA DO PROGRAMA

A opção de contruir o programa com estrutura modular, está vinculado diretamente a disponibilidade de memória, cada módulo funciona como um sub-programa. Após o sistema estabelecer qual será a sequência ótima de cálculo, ou seja, a ordem na qual as unidades vão ser executadas, inicia-se o gerenciamento das unidades modulares, cada sub-programa (unidade modular) será transferido da biblioteca de módulos localizadas no disco rígido ou em discos flexíveis para a unidade central de processamento. Executado este módulo, ele será automaticamente apagado da CPU e um

novo módulo será requisitado, obedecendo estritamente a sequência que foi anteriormente determinada. Terminada a execução da última unidade modular, será feito um teste de convergência, se a tolerância admitida como critério não foi atingida, novamente o sistema retornará ao início da sequência de cálculo, re-iniciando a execução de todas as unidades modulares.

A transferência de informações entre sub-programas encadeados é realizada fazendo-se uso ostensivo da interação entre a CPU e as unidades de memória auxiliares, através de criação e leitura de arquivos específicos. Com esta mesma finalidade também são usadas áreas reservadas de memória RAM em comum aos programas.

A estrutura de um programa executivo é composto de diversas fases, obedecendo sempre uma hierarquia de processamento. A seguir apresentaremos as etapas do programa por nós desenvolvido:

- a - Entrada de dados
- b - Cálculo da Matriz de Processo, Matriz de Incidência, Matriz Conexão das Correntes e Matriz de Adjacências
- c - Determinação das correntes de entrada
- d - Determinação da sequência de cálculos
- e - Identificação dos ciclos
- f - Determinação das correntes de corte
- g - Acesso dos parâmetros das unidades
- h - Execução da sequência de cálculo
- i - Teste de convergência
- j - Apresentação dos relatórios

O fluxograma referente a esta estrutura é apresentado na Figura 3.1, na qual os arquivos consultados e gerados são representados por algarismos romanos, sendo especificado no apêndice A.

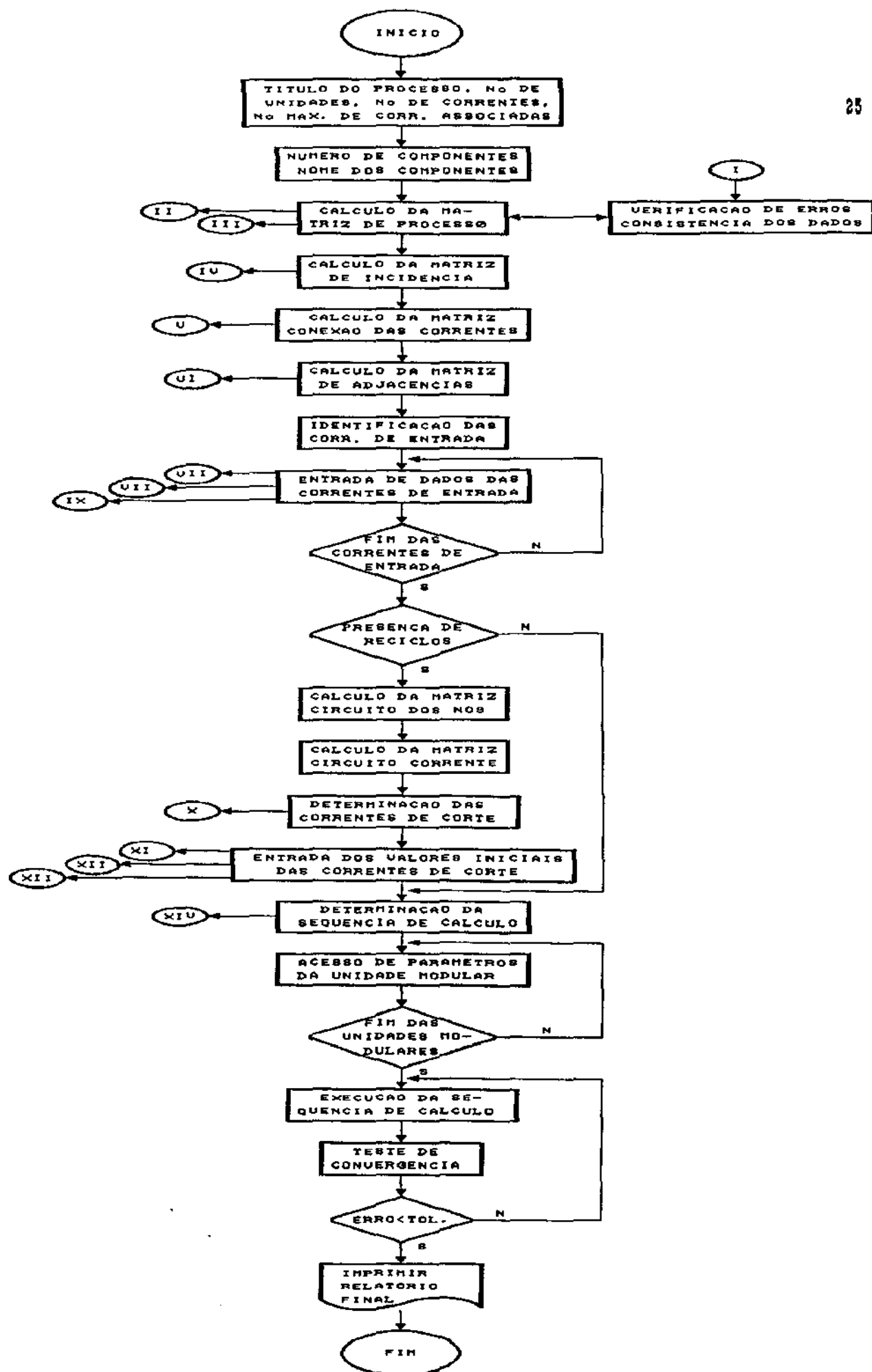


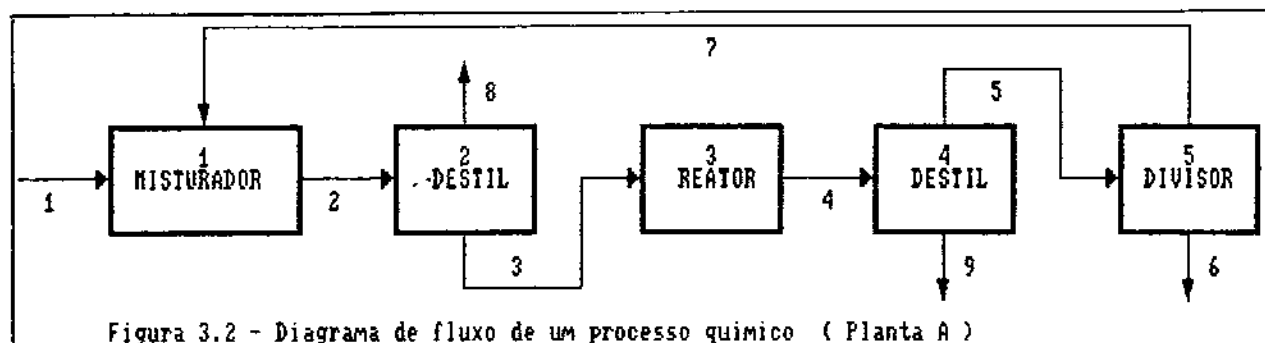
Figura 3.1 - Fluxograma da estrutura principal do programa executivo.

3.4 ENTRADA DE DADOS

A entrada de dados é uma fase que exige cuidados especiais por parte do operador. Pois, é a etapa onde há a interação operador-computador e nesta fase, um erro comprometerá de forma irremediável os resultados. Os dados serão fornecidos em fases diferentes do sistema, quando necessário, mensagens são enviadas por intermédio do monitor de vídeo, solicitando do operador determinadas informações. Ao término de cada sequência de dados introduzidos via teclado, o sistema emite uma mensagem que permite ao operador executar correções, caso algum dado tenha sido digitado erroneamente.

Uma etapa que precede a entrada de dados, é a etapa de identificação das unidades e correntes. Cada equipamento deve ter um número e a unidade computacional que o representa, já as correntes, são indicadas pela sua numeração. Esta providencia é imprescindível não só para a execução do sistema, como também, servirá de guia para o acompanhamento da simulação e posterior análise dos resultados.

Para um melhor entendimento, procuramos estabelecer uma harmonia entre este texto e o programa, de tal forma, que o leitor possa ter uma melhor visualização entre o que está aqui escrito e as mensagens que aparecem no monitor de vídeo durante a execução do sistema computacional. O diagrama de fluxo mostrado na Figura 3.2, servirá como ilustração para as diversas fases do programa.



Os primeiros dados a serem fornecidos são os seguintes: título do processo a ser simulado (TP%), número de unidades do processo (NU), número de correntes (NC) e número máximo de correntes associados a cada unidade (NM), ver Figura 3.3. Logo em seguida, o sistema imprime uma mensagem no vídeo solicitando do operador o número de componentes (NCOMP) existente no processo e seus respectivos nomes (CP%).

```
PROGRAMA EXECUTIVO PARA A SIMULAÇÃO  
DE PROCESSOS POR MICROCOMPUTADOR  
  
TITULO DO PROCESSO =PLANTA A  
  
NUMERO DE UNIDADES DO PROCESSO =5  
NUMERO DE CORRENTES DO PROCESSO =9  
NUMERO MAXIMO DE CORRENTES ASSOCIADAS A CADA UNIDADE =3  
  
ESTAS INFORMACOES ESTAO CORRETAS? (S/N)
```

Figura 3.3 - Aspecto da tela durante a introdução dos dados iniciais.

3.4.1 MATRIZ DO PROCESSO

A matriz do processo é formada quando a topologia do processo é escrita segundo uma estrutura matricial. Cada unidade existente no diagrama de fluxo é representada por uma linha na matriz do processo. A primeira coluna representa o número da unidade, a segunda coluna representa a unidade computacional correspondente, a partir da terceira coluna são representadas as correntes de entrada e saída. Por convenção, as correntes de entrada têm o sinal positivo e as de saída o sinal negativo.

Para introdução da matriz do processo, alguns comandos devem ser esclarecidos. O número da unidade, o nome da unidade e as correntes associadas devem ser precedidos da tecla "enter". Com a finalidade de facilitar, agilizar e diminuir a incidência de erro, o sistema cria automaticamente três páginas idênticas à mostrada na Figura 3.4. Cada página tem a capacidade de até dez unidades, e ao ser digitada a décima primeira unidade, automaticamente o sistema retira da tela do vídeo a página 1 colocando em seu lugar a página 2, o mesmo acontece na unidade 21, desta vez colocando a página 3.

ENTRADA DE DADOS DA MATRIZ DO PROCESSO		
NUMERO DA UNIDADE	NOME DA UNIDADE	CORRENTES ASSOCIADAS
M A T R I Z D O P R O C E S S O		
NUMERO DA UNIDADE	NOME DA UNIDADE	CORRENTES ASSOCIADAS
F6 AVANCA UMA PAGINA * F7 RECUA UMA PAGINA F8 TERMINO DAS CORRENTES * F9 TERMINO DOS DADOS		
		PAG = 1

Figura 3.4 - Página mostrada na tela do vídeo para a introdução da matriz do processo.

As mensagens escritas na parte inferior da tela do vídeo (ver Figura 3.4) têm as seguintes finalidades:

F6 - Avança uma página, por exemplo: ao pressionar a tecla F6, automaticamente o sistema chama a página sub-sequente, que substitui a página que se encontra na tela do vídeo, independente desta estar completa ou não.

F7 - Mecanismo semelhante ao da tecla F6, porém no sentido inverso.

F8 - Terminada a digitação das correntes de uma unidade, o operador deve pressionar a tecla F8. Após esta operação todos os dados referente a esta unidade se desloca para uma posição determinada na parte inferior do vídeo. O cursor retorna a posição inicial e os dados de uma nova unidade podem ser digitados.

F9 - Concluída a digitação dos dados de todas as unidades, o operador deve pressionar a tecla F9 informando ao sistema o término dos dados.

Os números das unidades (NU) e das correntes (NC) devem ser inteiros e não necessariamente consecutivos, porém devem obedecer as seguintes condições: $0 < NU < = 30$ e $0 < NC < 100$. O nome da unidade modular deve ter no máximo 7 dígitos, podendo ser alfanuméricos, sendo o primeiro dígito necessariamente não numérico. Valores que ultrapassem os parâmetros acima descritos, não serão aceitos pelo programa.

Após a digitação de cada dado, o sistema aciona uma sub-rotina específica para a verificação da consistência daquele dado. Uma vez detectado erro, um sinal sonoro é executado reproduzindo o som de um BEEP, logo em seguida uma mensagem de advertência é mostrada no vídeo, indicando a espécie de erro cometido e como o operador deve proceder para a correção de imediato.

Para um melhor esclarecimento, a partir da planta A são apresentadas as Figuras 3.5 a 3.8, mostrando a introdução da matriz do processo e os principais erros causados na etapa da digitação.

As mensagens que aparecem compreendidas entre dois asteriscos nas Figuras 3.5 a 3.8, são os diagnósticos dos erros cometidos durante a introdução dos dados.

ENTRADA DE DADOS DA MATRIZ DO PROCESSO					
NUMERO DA UNIDADE		NOME DA UNIDADE		CORRENTES ASSOCIADAS	
** QUANTIDADE ILEGAL - EXECEDE UNIDADE MAXIMA (5) :REENTRE **					
M A T R I Z D O P R O C E S S O					
NUMERO DA UNIDADE		NOME DA UNIDADE		CORRENTES ASSOCIADAS	
1		MIT		1	7 -2
2		SEP		2	-3 -8
3		REA		3	-4
4		SEP		4	-5 -9
5		DIV		5	-6 -7

F6 AVANCA UMA PAGINA * F7 RECUA UMA PAGINA	
F8 TERMINO DAS CORRENTES * F9 TERMINO DOS DADOS	PAG = 1

Figura 3.5 - Diagnóstico do erro provocado quando o número da unidade digitada é superior ao número de unidades anteriormente especificado (NU)

ENTRADA DE DADOS DA MATRIZ DO PROCESSO					
NUMERO DA UNIDADE	NOME DA UNIDADE	CORRENTES ASSOCIADAS			
5	** QUANTIDADE ILEGAL * EXCEDE CAMPO (7) * REENTRE **				
M A T R I Z D O P R O C E S S O					
NUMERO DA UNIDADE	NOME DA UNIDADE	CORRENTES ASSOCIADAS			
1	MIT	1	7	-2	
2	SEP	2	-3	-8	
3	REA	3	-4		
4	SEP	4	-5	-9	
F6 AVANCA UMA PAGINA * F7 RECUA UMA PAGINA					
F8 TERMINO DAS CORRENTES * F9 TERMINO DOS DADOS					PAG = 1

Figura 3.6 - Diagnóstico do erro provocado quando o nome da unidade computacional digitada excede o campo de 7 dígitos.

ENTRADA DE DADOS DA MATRIZ DO PROCESSO						
NUMERO DA UNIDADE	NOME DA UNIDADE	CORRENTES ASSOCIADAS				
5	** CARACTER NAO NUMERICO OU ZERO (B)REENTRE **					
M A T R I Z D O P R O C E S S O						
NUMERO DA UNIDADE	NOME DA UNIDADE	CORRENTES ASSOCIADAS				
1	MIT	1	7	-2		
2	SEP	2	-3	-8		
3	REA	3	-4			
4	SEP	4	-5	-9		
F6 AVANCA UMA PAGINA * F7 RECUA UMA PAGINA						
F8 TERMINO DAS CORRENTES * F9 TERMINO DOS DADOS						PAG = 1

Figura 3.7 - Diagnóstico do erro provocado quando o operador digita zero ou um caracter não numérico no campo reservado as correntes associadas.

ENTRADA DE DADOS DA MATRIZ DO PROCESSO						
NUMERO DA UNIDADE	NOME DA UNIDADE	CORRENTES ASSOCIADAS				
5	*** INCONSISTENCIA * REENTRE COM CORRENTES ***					
M A T R I Z D O P R O C E S S O						
NUMERO DA UNIDADE	NOME DA UNIDADE	CORRENTES ASSOCIADAS				
1	MIT	1	7	-2		
2	SEP	2	-3	-8		
3	REA	3	-4			
4	SEP	4	-5	-9		
F6 AVANCA UMA PAGINA * F7 RECUA UMA PAGINA						
F8 TERMINO DAS CORRENTES * F9 TERMINO DOS DADOS						PAG = 1

Figura 3.8 - Mensagem de inconsistência em virtude de uma mesma corrente ser digitada mais de uma vez na mesma unidade modular.

Concluída a introdução dos dados referente ao diagrama de fluxo, alguns erros podem ser cometidos na digitação sem ser percebido pelas sub-rotinas de verificação. O sistema ainda permite realizar correções na matriz do processo. A seguinte mensagem é apresentada na tela do vídeo "DESEJA FAZER ALGUM TIPO DE CORREÇÃO NOS DADOS? (S/N)". Pressionando a tecla "S", o sistema apresenta cinco tipos de correções, ver Figura 3.9. Digitando o número que se encontra à direita, o sistema realiza a operação correspondente. Não sendo necessário realizar correções, o operador deve pressionar a tecla "N" ou "enter".

ESCOLHA QUAL TIPO DE CORREÇÃO A SER FEITA	
APAGAR TODAS AS PÁGINAS	1
APAGAR APENAS UMA PÁGINA	2
NÚMERO DA UNIDADE	3
NOME DA UNIDADE	4
CORRENTES ASSOCIADAS	5
AGUARDANDO O TIPO DE CORREÇÃO	

Figura 3.9 - Alternativas para corrigir matriz do processo, após a introdução de todos os dados.

Para encerrar a entrada de dados da matriz do processo, o sistema realiza mais duas verificações de erros. Primeiro verifica se os nomes das unidades computacionais digitadas, são compatíveis com os nomes das unidades armazenadas na biblioteca de módulos. No arquivo MODULO.SEQ estão arquivados todos os nomes das unidades computacionais, nomes que representam os módulos existente na biblioteca do programa. O sistema abre o arquivo e analisa os nomes das unidades digitadas e os nomes das unidades existentes no arquivo, uma vez existindo pelo menos um nome que

não seja compatível, o sistema apresenta a mensagem "NOME DO MÓDULO INCOMPATÍVEL **", número do módulo, "**", nome do módulo. Após informar a existência do erro, duas outras mensagens aparecem na tela do monitor de vídeo: "GRAFIA INCORRETA - EXECUTAR CORREÇÃO 1" e "CANCELAR A EXECUÇÃO DO PROGRAMA 2". Se por uma razão qualquer o nome do módulo apresenta um erro de ortografia, o operador deve pressionar a tecla 1 e o sistema retornará automaticamente a página onde a unidade foi digitada e aguardará que seja processada a correção; porém se o erro foi detectado pela inexistência da unidade modular digitada, torna-se impossível a execução do sistema, e o operador deve pressionar a tecla 2 cancelando a simulação.

Após ter verificado as unidades modulares, o sistema verifica se alguma corrente com o mesmo sinal foi digitada em mais de uma unidade. Caso seja encontrado, o sistema apresenta no vídeo as unidades que estão com a mesma corrente, e informa como o operador deve proceder para efetuar a correção.

Concluída a introdução da matriz do processo e a sua verificação, os dados são armazenados em dois arquivos. Primeiro sob a forma sequencial MATPROCS.SEQ e depois por linhas MATPROCS.ALE.

As informações contidas na matriz do processo podem ser reescritas de modo a serem mais apropriadas ao uso em computadores. A partir da matriz do processo, três outras matrizes podem ser calculadas: a matriz de conexão das correntes, a matriz de incidência e a matriz de adjacência. Estas matrizes constituem-se em importante ferramenta para as etapas de cálculos posteriores.

Os programas de simulação operam internamente fazendo uso de estruturas matriciais. Grandes espaço na CPU são ocupados, limitando consideravelmente o uso de microcomputadores para estes fins. Para obter o máximo de eficiência na utilização da CPU, as

matrizes foram dimensionadas a partir dos dados de entrada: NU, NC, NM E NCOMP.

Para os processos em que o número dos módulos e/ou das correntes não obedecem uma sequência numérica, o sistema realiza uma re-numeração dos módulos e/ou correntes, ordenando a partir da unidade. Quando esta operação é realizada, o operador é alertado através do seguinte comunicado: "EM VIRTUDE DAS UNIDADES MODULARES E/OU DAS CORRENTES ASSOCIADAS NÃO TEREM OBEDECIDO UMA SEQUÊNCIA NUMÉRICA, HOVE UMA RE-ORDENAÇÃO NA NUMERAÇÃO DO MÓDULOS E/OU DAS CORRENTES ASSOCIADAS". Para evitar confusão na identificação dos módulos e/ou das correntes, é providenciado uma impressão no papel da equivalência entre a numeração anterior e a numeração re-ordenada.

Como fase final da entrada de dados referente ao diagrama de fluxo, a matriz do processo é novamente apresentada na tela do monitor de vídeo, ver Figura 3.10. O operador deve analisar minuciosamente a correlação entre o diagrama de fluxo e a matriz do processo, consciente da equivalência dos dados, deve então, dar continuidade as demais etapas.

IMPRESSAO NO VÍDEO DA MATRIZ DO PROCESSO					
1	MIT	1	7	-2	
2	SEP	2	-3	-8	
3	REA	3	-4		
4	SEP	4	-5	-9	
5	DIV	5	-6	-7	
DESEJA REVER A MATRIZ DO PROCESSO (S/N)					

Figura 3.10 - Matriz do processo para a planta A.

3.5 MATRIZ DE INCIDÊNCIA

Uma outra forma de codificar as informações do diagrama de fluxo é através da matriz de incidência, mostrada na Figura 3.11 para a planta A da Figura 3.2. A primeira coluna refere-se ao número das unidades modulares, as demais colunas em sua primeira linha correspondem a numeração das correntes. O símbolo "+1" indica que o número da corrente associada existente naquela coluna, entra na unidade modular da linha correspondente. O símbolo "-1" indica que a corrente sai do equipamento. O espaço em branco ou zero indica que a corrente não está conectada a unidade.

A matriz de incidência também pode ser obtida a partir da matriz do processo, para isto, foi desenvolvido o fluxograma mostrado na Figura 3.12, onde $MP(i,j)$, matriz do processo; $MI(i,j)$, matriz de incidência; C , número de unidades modulares; NM , número máximo de correntes associadas por unidade. O arquivo MATINCD.ALE foi criado para armazenar a matriz de incidência

**** MATRIZ INCIDENTE ****										
UNIDADE	CORRENTE									
	1	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	1	1	-1	0	0	0	0	1	0	0
2	1	0	1	-1	0	0	0	0	-1	0
3	1	0	0	1	-1	0	0	0	0	0
4	1	0	0	0	1	-1	0	0	0	-1
5	1	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0

Figura 3.11 - Matriz de incidencia para a Planta A

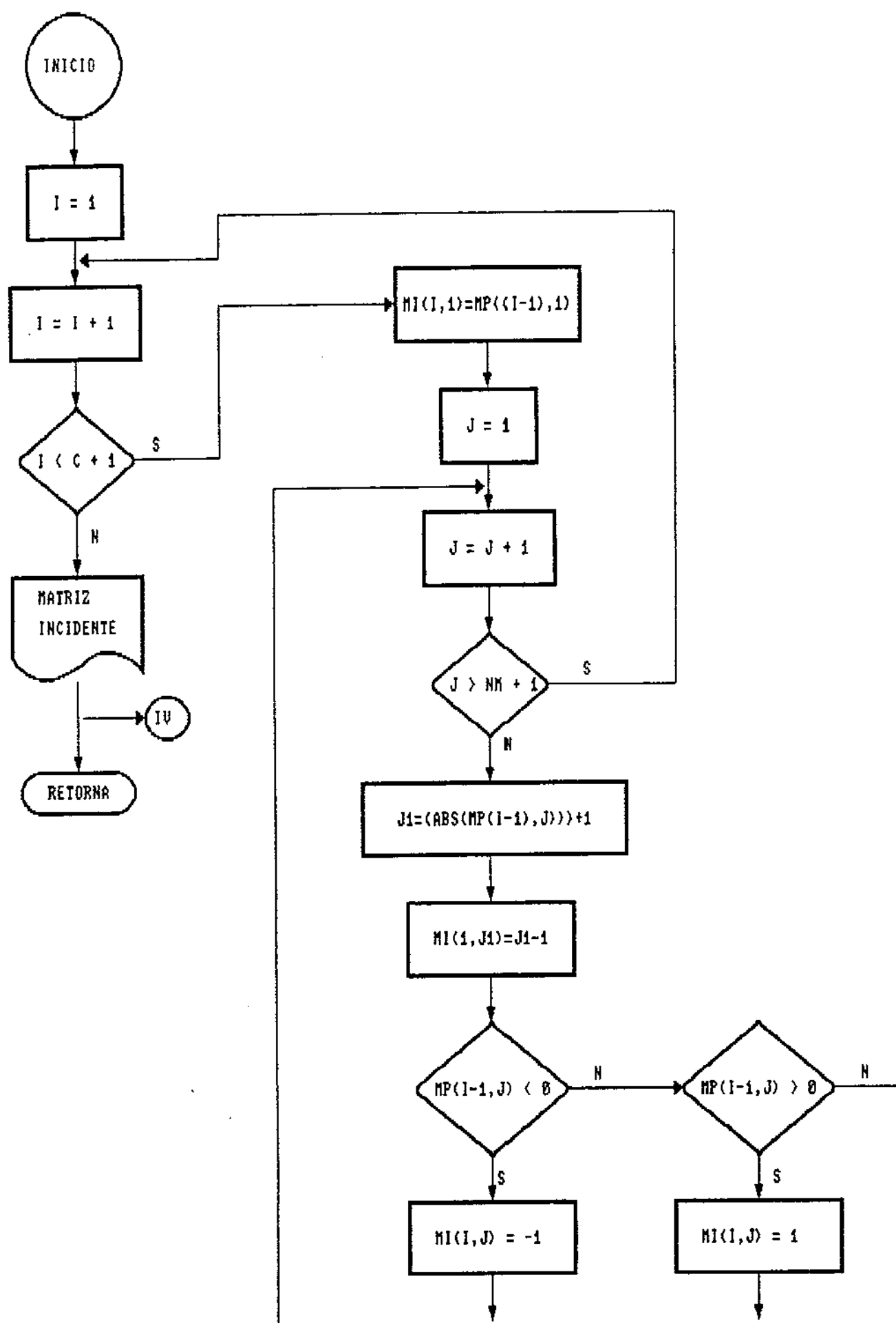


Figura 3.12 - Fluxograma para a calculo da matriz de incidencia

3.6 MATRIZ CONEXÃO DAS CORRENTES

A matriz conexão das correntes possui três colunas. A primeira coluna é formada pelo número das correntes do processo, a segunda corrente é formada pelo número da unidade computacional de onde a corrente é originária, a terceira e última coluna é formada pelo número da unidade computacional a qual a corrente se destina.

O número zero é atribuído para: a unidade de origem das correntes de alimentação e também para a unidade a que destina as correntes dos produtos finais.

A Figura 3.13 mostra a matriz conexão das correntes para a planta A (ver Figura 3.2).

A matriz conexão das correntes pode ser construída a partir das informações do diagrama de fluxo (ver Figura 3.2), ou ainda, através da matriz do processo (ver Figura 3.10). Neste trabalho a matriz conexão das correntes foi construída a partir da matriz do processo, para isto foi usado o fluxograma apresentado na Figura 3.14, onde $MP(i,j)$, matriz do processo; $MC(i,j)$, matriz conexão das correntes; C , número das unidades modulares; NM , número máximo de correntes associadas por unidade. O arquivo MATCONX.SEQ foi criado para armazenar a matriz conexão das correntes.

**** MATRIZ CONEXAO DAS CORRENTES ****			
CORRENTE	DA UNIDADE	PARA UNIDADE	
1	0	1	
2	1	2	
3	2	3	
4	3	4	
5	4	5	
6	5	0	
7	5	1	
8	2	0	
9	4	0	

Figura 3.13 - Matriz conexão das correntes para a Planta A.

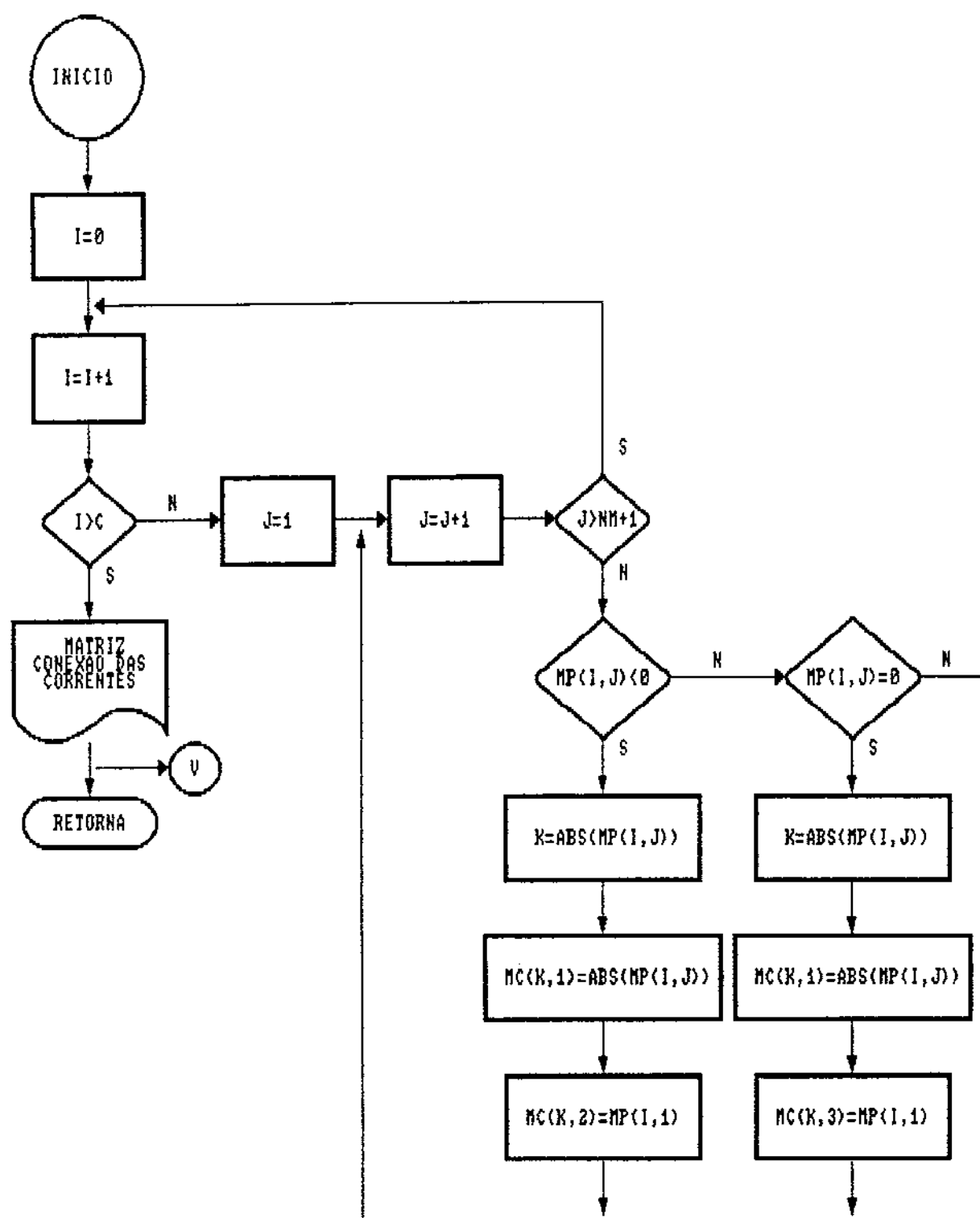


Figura 3.14 - Fluxograma para o calculo da matriz conexao das correntes.

3.7 MATRIZ DE ADJACÊNCIAS

A matriz de adjacências mostrada na Figura 3.15, é uma matriz quadrada na qual tanto a primeira linha como a primeira coluna contém os números das unidades modulares envolvidas no processo. A unidade "1" indica a ligação da unidade existente na linha com a unidade representada pela coluna. O zero ou espaço em branco mostra que não há ligação naquela direção.

Como a matriz de incidência e conexão das correntes, a matriz de adjacências também será construída a partir da matriz do processo. O fluxograma utilizado é apresentado na Figura 3.16, onde $MP(i,j)$, matriz do processo; $MA(i,j)$, matriz de adjacências; C , número de unidades. O arquivo MATADJ.ALE foi criado para armazenar a matriz de adjacências.

**** MATRIZ ADJACENCIA ****						
DA	PARA					
UNIDADE	1	1	2	3	4	5
1	1	0	1	0	0	0
2	1	0	0	1	0	0
3	1	0	0	0	1	0
4	1	0	0	0	0	1
5	1	1	0	0	0	0

Figura 3.15 - Matriz de adjacências para a Planta A.

3.8 IDENTIFICAÇÃO DAS CORRENTES DE ENTRADA

A partir da matriz de incidência é possível identificar todas as correntes de entrada existente no diagrama de fluxo. Quando somamos as colunas desta matriz (ver Figura 3.11), três resul-

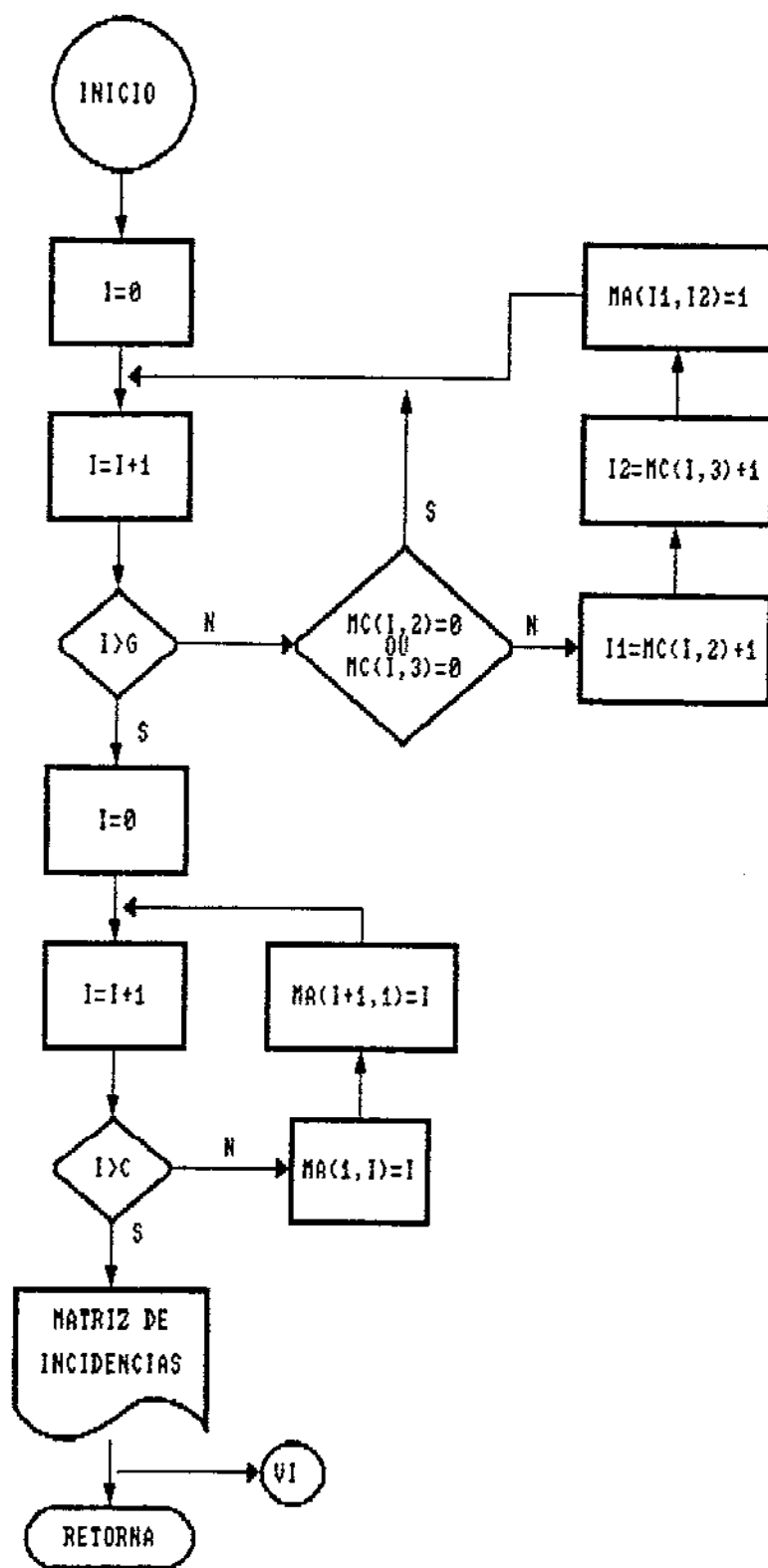


Figura 3.16 - Fluxograma para o cálculo da matriz de adjacências.

tados são possíveis de se obter: "+1", "0" e "-1". Se o resultado da soma de uma coluna for igual a "+1", a corrente é tida como de entrada (alimentação). Se a soma for "-1", a corrente é produto. Se a soma for zero, a corrente é de conexão entre duas unidades.

O fluxograma que identifica as correntes de entrada é mostrado na Figura 3.17, onde as variáveis têm os seguintes significados: $H(i,j)$, matriz de incidência; $SMI(j)$, somatório da coluna; $CORR(j)$ vetor que armazena as correntes de entrada.

3.9 INFORMAÇÕES DAS CORRENTES DE ENTRADA

Identificadas as correntes de entrada, o sistema necessita conhecer quais as características de cada corrente. Uma sub-rotina é acionada e o operador é informado via tela do monitor de vídeo, quais os dados que precisam serem fornecidos.

A Figura 3.18 mostra a identificação da corrente de entrada para a planta A (ver Figura 3.2), e os dados fornecidos pelo operador para a corrente.

VALORES INICIAIS DAS CORRENTES DE ENTRADA

CORRENTE NUMERO = 1

Vazão Mássica (kg/s) = 100

Temperatura (K) = 300

Pressão (Kgf/m²) = 1

Número de Componentes = 3

Nome do componente	Fração Mássica
A	0.1
B	0.5
C	0.4

Estas informações estão corretas (S/N)

Figura 3.18 - Dados fornecidos para a corrente de entrada para a Planta A.

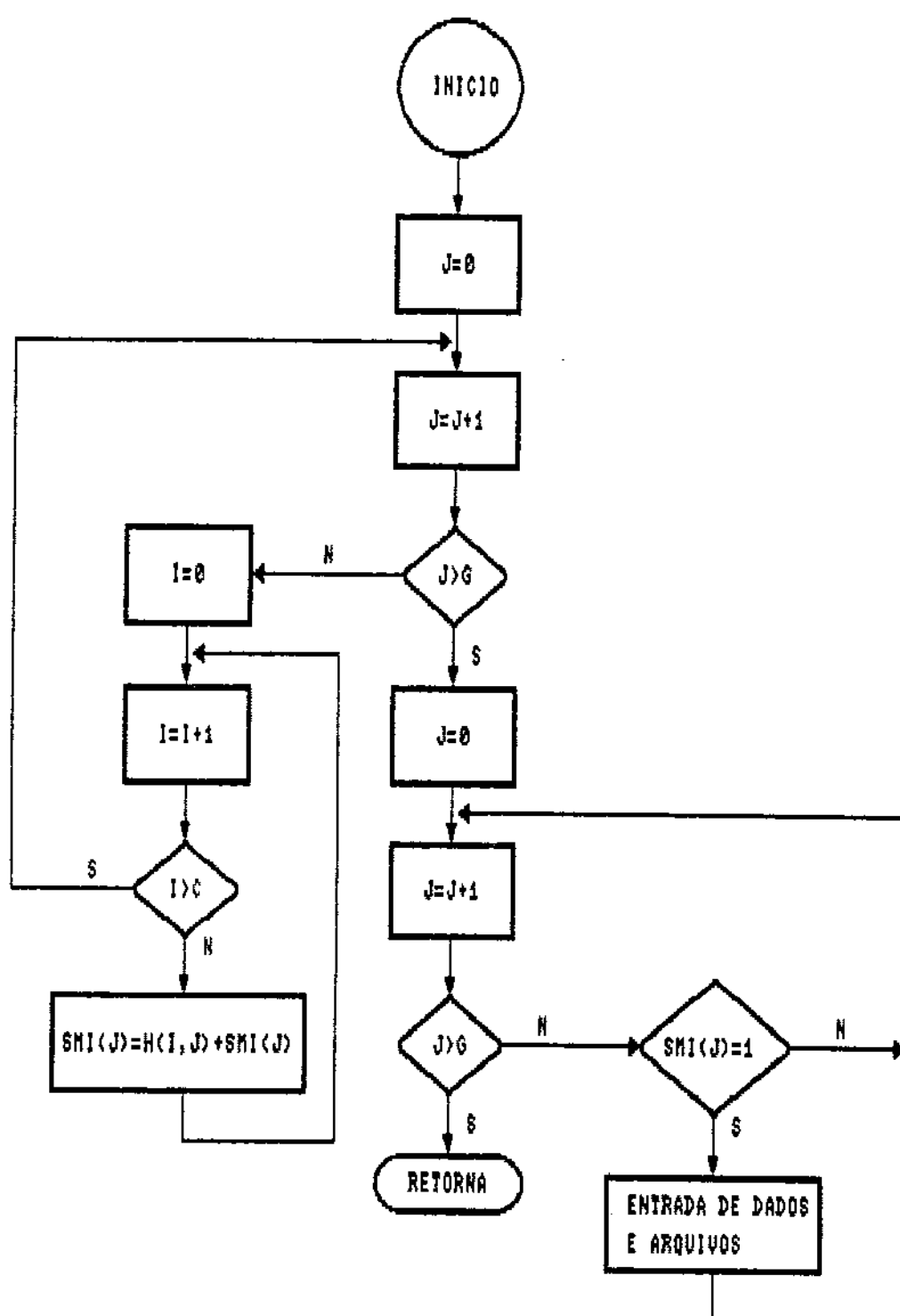
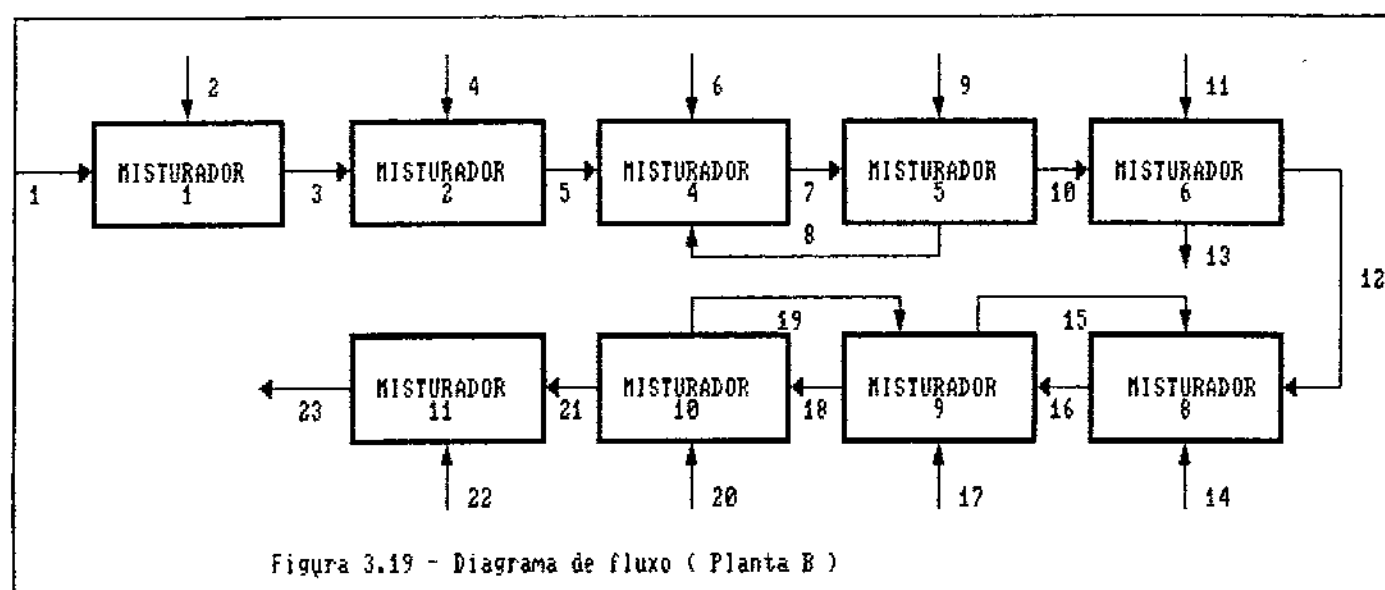


Figura 3.17 - Fluxograma para a determinação das correntes de entrada.

Após a introdução dos dados das correntes de entrada, estes são armazenados sob a forma matricial. No arquivo QTPNCOMP.ALE são arquivados a vazão, temperatura, pressão e número de componentes; no arquivo NOMECOMP.ALE o nome dos componentes; e no arquivo FRAMOL.ALE a fração mássica de cada componente.

3.10 DETERMINAÇÃO DA SEQUENCIA DE CALCULO

O computador não pode ver as informações apresentadas no diagrama de fluxo, como por exemplo, a planta A mostrada na Figura 3.2. Ele trabalha apenas fazendo uso de sua própria equivalência numérica. Nesta seção e na duas próximas, mostraremos os meios para encontrar uma sequência de cálculo do processo na forma numérica, que será obtida a partir das informações contidas no diagrama de fluxo.



Na planta B da Figura 3.19, fica claro que a unidade 1 pode ser calculada diretamente, desde que se conheçam os valores das correntes de entrada; a unidade 2 também pode ser calculada. Como pode ser visto, as unidades 4 e 5 formam um reciclo em laço e não podem ser calculadas diretamente como as anteriores. A unidade 6 pode ser calculada se as unidades 4 e 5 forem anteriormente cal-

culadas. As unidades 8, 9 e 10 também formam ciclos, podem ser calculadas conjuntamente ou através da abertura do ciclo, desde que a unidade 6 tenha sido calculada. Por fim, calcula-se a unidade 11 e a sequência de cálculo está concluída. Este exemplo mostra que nos processos químicos, há unidades que podem ser calculadas diretamente, e outras que obrigam o uso de técnicas especiais.

Baseado neste procedimento, os cálculos são divididos em duas etapas.

- 1 - Separar as unidades que fazem parte de um ciclo e aquelas que são (ou podem ser) diretamente calculadas.
- 2 - Planificação do cálculo de cada um dos ciclos separadamente.

Quando não existem ciclos nas informações do diagrama de fluxo, as unidades podem ser calculadas uma após a outra, iniciando a partir das unidades nas quais só existem correntes de entrada. A sequência de cálculo coincide com o sentido do fluxo de massa, estes diagramas são denominados de processo em série.

Um processo com ciclo é aquele no qual uma corrente de saída de uma unidade, afeta diretamente as correntes de entrada da própria unidade, isto implica que pelo menos uma unidade não pode ser calculada diretamente. Nos processos onde ocorre a presença de ciclos, a sequência de cálculos não obedece necessariamente o sentido do fluxo de massa.

Há vários caminhos diferentes para se determinar a sequência de cálculo de processos com ciclo. Sagart e Westerberg (1964) obtiveram a sequência de cálculo a partir da matriz do processo. Uma outra forma de se obter a sequência de cálculo é a partir da matriz de adjacências; uma discussão mais aprofundada do uso da matriz de adjacência na obtenção da sequência de cálculo é feita

nos livros de Himmelblau e Bischoff (1968), Rudd e Watson (1968). Recentemente Montagna e Iribarren (1987) publicaram um artigo no qual a sequência de cálculo é determinada usando a técnica da integração linear otimizada.

Neste trabalho, a sequência ótima de cálculo das unidades do processo será determinada a partir da matriz de adjacências.

A matriz de adjacências é um instrumento bastante eficaz para separar as unidades em série das unidades de reciclos. A técnica utilizada é a da eliminação sucessiva das linhas correspondentes ao número da coluna cujo somatório é nulo. Após somar separadamente cada coluna existente na matriz de adjacências, a hierarquia do cálculo é determinada. A primeira unidade na sequência de cálculo, é aquela associada à primeira coluna cujo somatório é nulo, e assim sucessivamente.

Após a execução da soma da última coluna, a matriz de adjacências deve resultar em uma matriz nula, caso contrário está confirmado a presença de reciclo.

O fluxograma para a determinação da sequência de cálculo está apresentado na Figura 3.20, na qual são usadas as seguintes variáveis: ART(j), registra as colunas que apresentam o somatório nulo; MA(i,j), matriz de adjacências e T, acumula o somatório da matriz de adjacências. A sequência de cálculo é armazenada no arquivo SEQCAL.SEQ.

3.11 IDENTIFICAÇÃO DOS RECICLOS

O sistema através da matriz de adjacências pode detectar a existência de reciclos, porém não nos informa quais as unidades que fazem parte de cada reciclo.

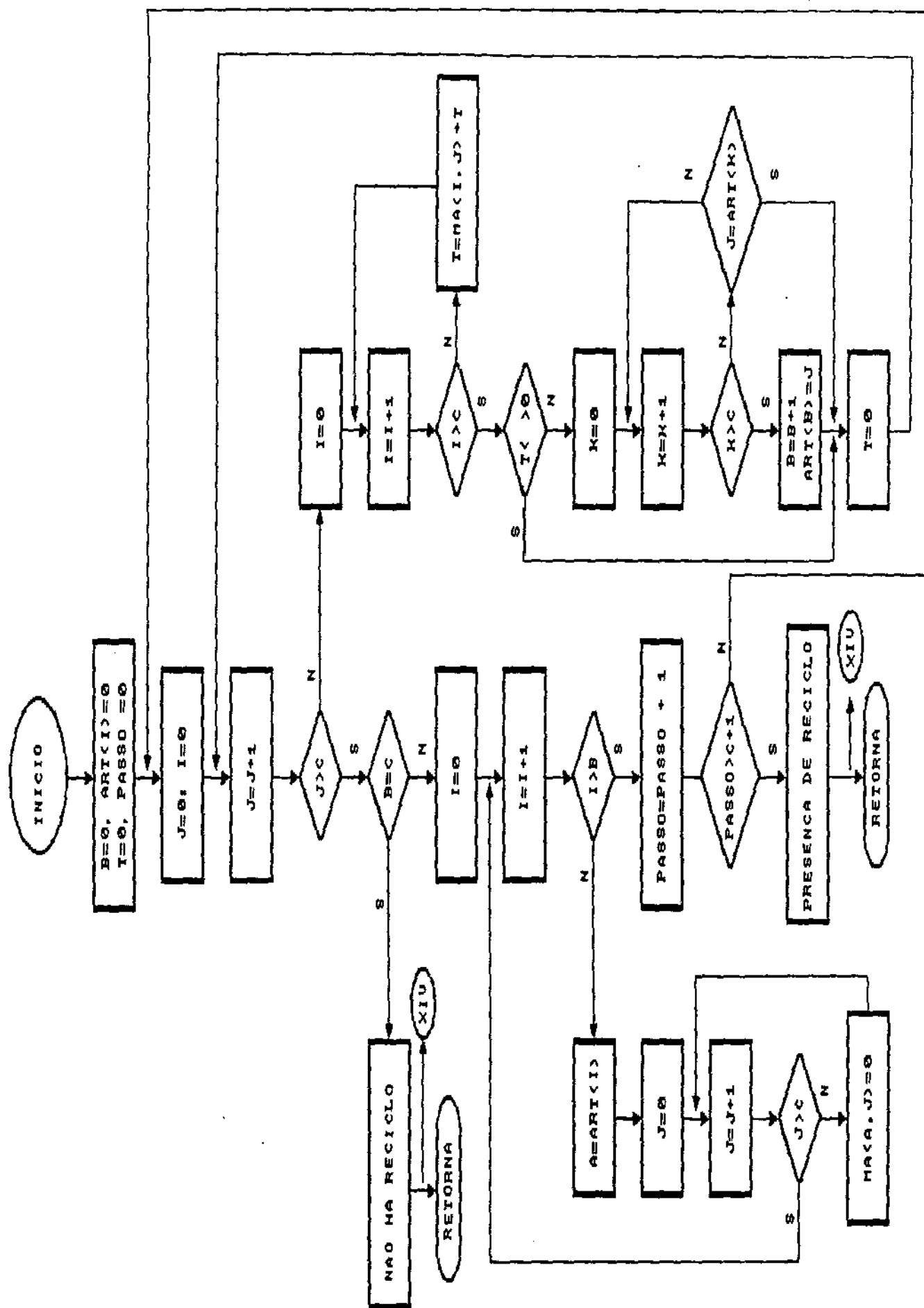


Figura 3.20 - Fluxograma para a determinação da sequência de cálculo

Segundo a literatura, dos vários algoritmos propostos para a identificação dos ciclos, o algoritmo desenvolvido por James C. Tiernan (1970) é o mais eficiente, e por esta razão vamos utilizá-lo.

Na intenção de melhor entendermos o algoritmo proposto por Tiernan, alguns conceitos devem ser discutidos à priori.

Um diagrama é definido a partir de uma série de vértices, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, e um operador de arco $\bar{()}$ que opera em todos os elementos individuais de V , resultando um subconjunto de V . Na forma ilustrada de um gráfico, cada vértice é representado por um arco originado no ponto v_i até o ponto v_j . Neste contexto v_i é o vértice inicial do arco e v_j é o vértice terminal do arco. Por exemplo, considere a Figura 3.21, onde:

$$V = \{v_1, v_2, \dots, v_5\}$$

$$\bar{(v_1)} = \{v_2\}$$

$$\bar{(v_2)} = \{v_2, v_3, v_4\}$$

$$\bar{(v_3)} = \{v_5\}$$

$$\bar{(v_5)} = \{v_1\}$$

Um percurso é uma sequência de arcos, onde o vértice terminal de um arco é o mesmo vértice que inicia o próximo arco. Na Figura 3.21 um exemplo de percurso é $(v_1, v_2, v_2, v_3, v_5)$.

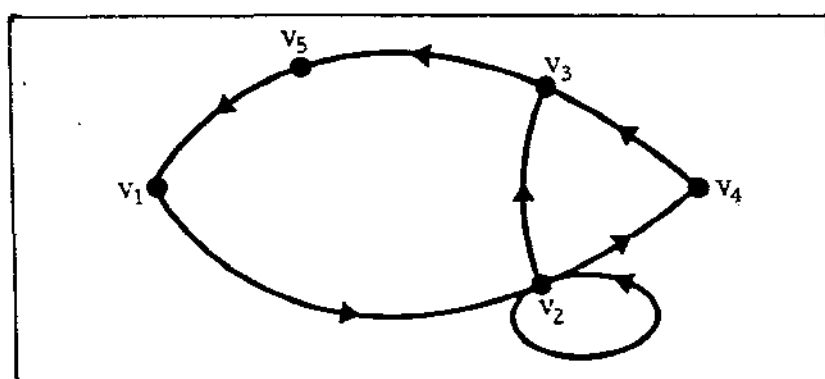


Figura 3.21 - Forma ilustrada de um gráfico.

Um percurso elementar contém cada vértice uma única vez.

Um circuito elementar é um percurso elementar com a diferença de que o primeiro e o último vértice são o mesmo ponto.

O algoritmo é chamado de EC (elementary circuit) e utiliza três matrizes para descrever o diagrama. A primeira matriz denominada de G , é obtida aplicando o operador $\sqrt{(\cdot)}$ sobre cada elemento da matriz de adjacências. A segunda matriz, P , é unidimensional e contém os vértices de um percurso elementar. A última matriz, H , tem duas dimensões e é inicialmente nula.

O primeiro percurso é iniciado no vértice 1, sendo que em cada arco percorrido as seguintes condições são verificadas:

- 1 - O vértice pesquisado não pode estar em P
- 2 - O valor do vértice pesquisado precisa ser maior que o do primeiro vértice em P
- 3 - O vértice pesquisado não pode ser fechado no último vértice de P

A condição 1 assegura que um percurso elementar está sendo formado. A condição 2 assegura que cada circuito será considerado somente uma vez e a condição 3 assegura que o percurso elementar não é considerado mais de uma vez.

A Figura 3.22 mostra o fluxograma de Tiernan. A Figura 3.23 mostra o fluxograma para o cálculo da matriz G a partir da matriz de adjacências.

Concluída a execução do algoritmo de Tiernan, o sistema terá identificado todos os ciclos existentes e quais as unidades que fazem parte de cada ciclo.

Após a determinação das unidades que compõem os ciclos, é possível também, a determinação das correntes que fazem parte do ciclo. O conhecimento das correntes de cada ciclo torna-se imprescindível para as demais etapas do programa.

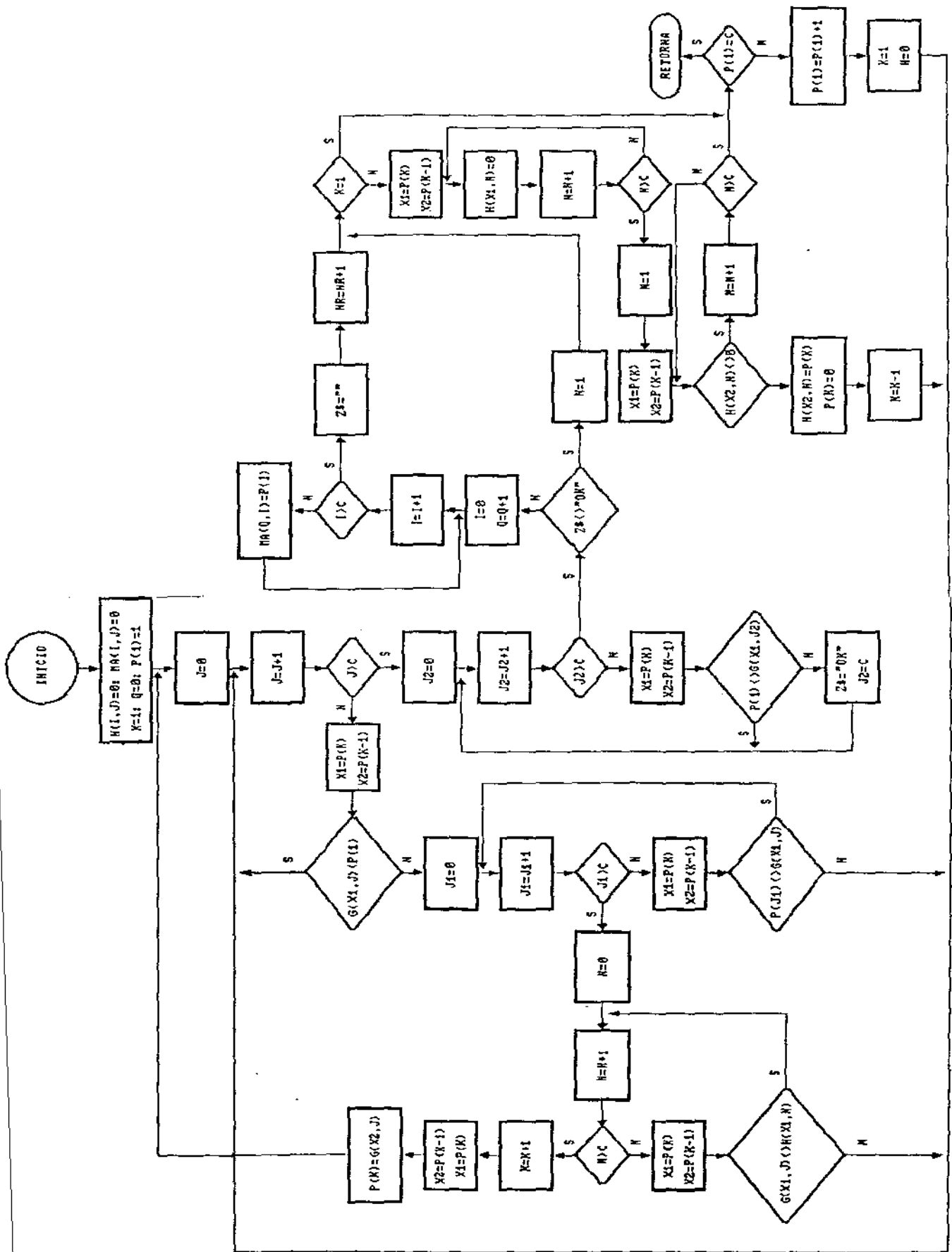


Figura 3.22 - Fluxograma de Tiernan para identificação dos ciclos

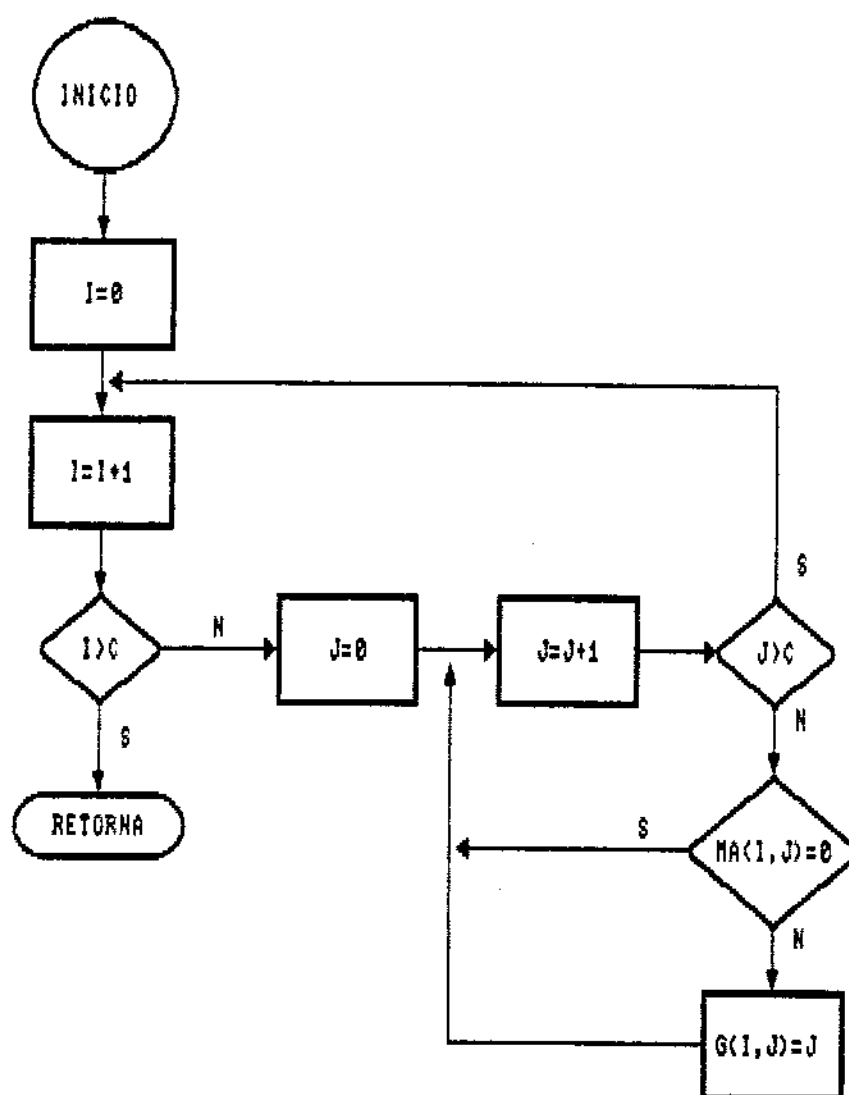


Figura 3.23 - Fluxograma para o cálculo da matriz G

O fluxograma mostrado na figura 3.24, foi o mecanismo utilizado para obtermos a representação dos reciclos através das correntes. As variáveis têm os seguintes significados: $MA(I,J)$, matriz de adjacências; $MC(i,j)$, matriz conexão das correntes e $G(i,j)$, matriz acumuladora.

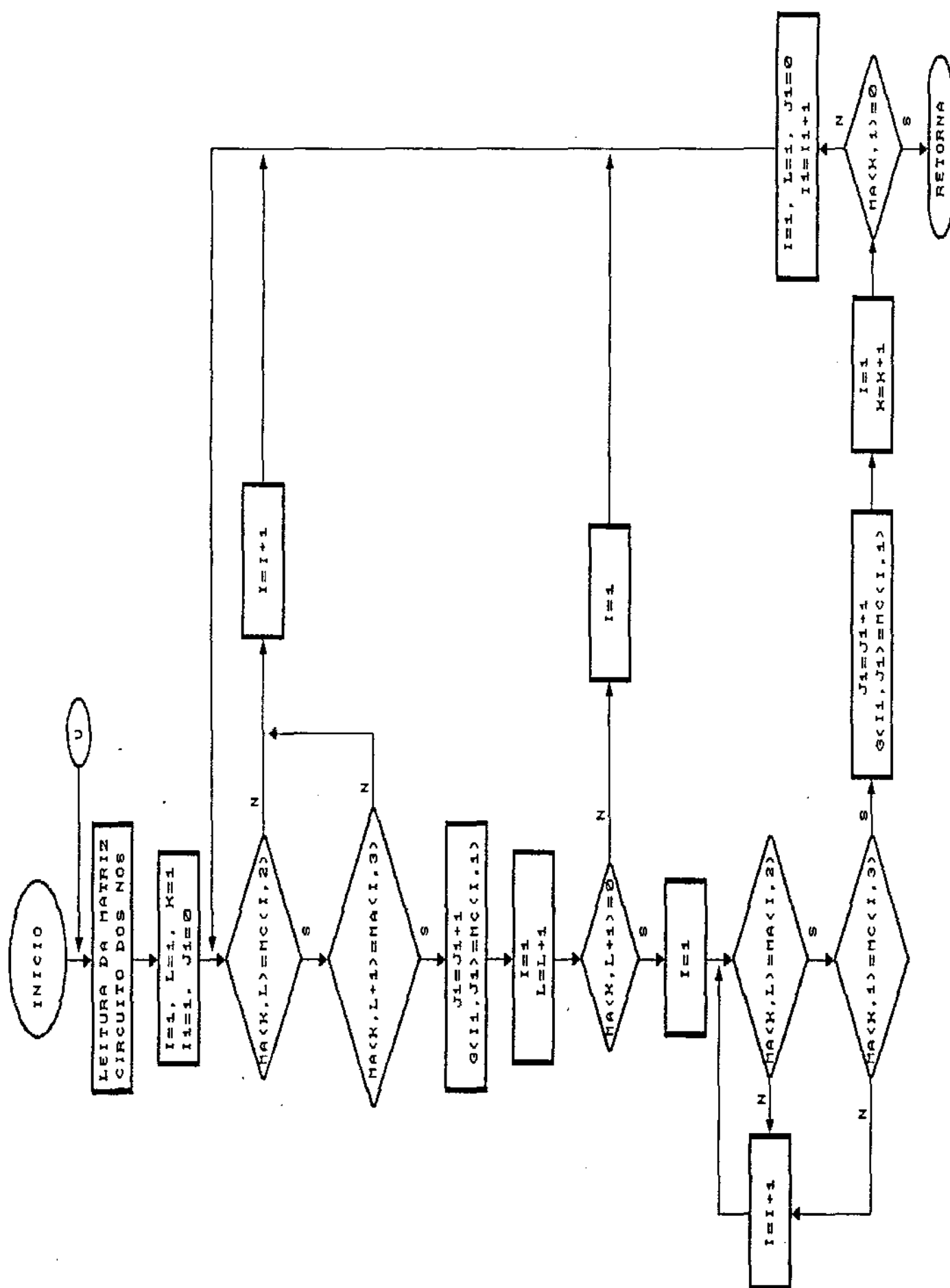
A partir do momento em que o sistema está analisando a sequência de cálculos e identificando os reciclos, uma mensagem é mostrada no monitor "**** AGUARDE UM MOMENTO ****", o operador deve aguardar a conclusão desta etapa do programa. Terminada a análise uma nova mensagem é emitida "DESEJA IMPRIMIR AS MATRIZES CIRCUITOS S/N".

As matrizes circuitos são formadas a partir da identificação dos reciclos. A primeira, denomina-se Matriz Circuito dos Nós e registra os reciclos através das unidades do processo, cada linha da matriz corresponde a um reciclo e cada coluna a uma unidade pertencente ao reciclo. A segunda matriz, denomina-se Matriz Circuito das Correntes, registra os reciclos através das correntes do processo, cada linha da matriz corresponde a um reciclo e cada coluna a uma corrente pertencente ao reciclo.

3.12 DETERMINAÇÃO DAS CORRENTES DE CORTE

Na seção anterior foi feita uma discursão a respeito do processos em série e dos processos com reciclos, colocando de forma clara as dificuldades existentes quando se quer calcular as unidades que fazem parte de um reciclo.

A literatura mostra duas formas diferentes de resolver o problema. A primeira delas consiste em calcular todas as unidades envolvidas no reciclo conjuntamente, através de um sistema de equações, sendo que, para cada reciclo um sistema de equações é

[illegible]

construído. A segunda forma consiste no corte de um número mínimo de correntes do processo, de modo a abrir todas as malhas dos reciclos.

A nossa preferência recai na segunda opção, devido a estrutura do sistema desenvolvido ser para a solução dos módulos individualmente.

A Figura 3.25 mostra o fluxograma referente à determinação das correntes de corte, no qual as seguintes variáveis são utilizadas: NR, número de reciclos; $G(i1,j)$, matriz circuito corrente; MZ, número de correntes do processo; $MC(k,i)$, frequência da corrente; FR, frequência; $A(i)$, matriz unidimensional que acumula o número das correntes de corte.

A cada corrente de corte determinada, é necessário atribuir valores iniciais da vazão, temperatura, pressão e composição.

O sistema apresenta três formas diferentes para a introdução dos dados para as correntes de corte, ver Figura 3.26. A primeira opção "ESTIMADA PELO COMPUTADOR", o sistema procura a corrente de entrada mais próxima da corrente de corte e atribui os valores da corrente de entrada à corrente de corte. Se acontecer do sistema não ter correntes de entrada, uma sub-rotina é acionada e o seguinte comunicado é apresentado no vídeo: "INFELIZMENTE NÃO VAI SER POSSÍVEL ESTIMAR PELO COMPUTADOR OS VALORES DAS CORRENTES DE CORTE, EM VIRTUDE DE NÃO EXISTIREM CORRENTES DE ENTRADA", e novamente é mostrada a Figura 3.26. A segunda opção "FORNECIDAS PELO OPERADOR", todos os dados referente as correntes de corte são fornecidos pelo operador, com a orientação da sub-rotina entrada de dados para as correntes de entrada. A terceira e última opção "SISTEMA MISTO", parte das correntes de corte será estimada via sistema (opção 1), e a outra parte pelo operador

(opção 2). Quando a opção "SISTEMA MISTO" for preferida, o sistema solicita do operador quais as correntes de corte que vão ser fornecidas pelo operador.

Os valores iniciais das correntes de corte, além de serem armazenadas nos arquivos QTPNCOMP.ALE, NOMECOMP.ALE e FRAMOL.ALE, são também armazenadas nos arquivos VICTPNC.ALE, VICCOMP.ALE e VICFRAM.ALE.

Após a determinação das correntes de corte, a matriz de adjacências é modificada no sentido de vir a representar o processo com a malha de reciclos aberta.

OS VALORES INICIAIS DAS CORRENTES
DE CORTE DEVEM SER:

F1 ESTIMADAS PELO COMPUTADOR?
F2 ... FORNECIDAS PELO OPERADOR?
F3 SISTEMA MISTO?

Figura 3.26 - Opções para a introdução dos dados iniciais das correntes de corte.

O fluxograma referente à adequação da matriz de adjacência à abertura dos reciclos é mostrado pela Figura 3.27, na qual as seguintes variáveis são utilizadas: $MC(i,j)$, Matriz de Conexão das correntes; $MA(i,j)$, Matriz de Adjacências e $A2(i)$, vetor corrente de corte.

Uma vez adequada a matriz de adjacências para representar o processo com a malha de reciclos aberta, a sequência de cálculos pode então ser obtida. O fluxograma da sub-rotina para a determinação da sequência de cálculo é mostrado na Figura 3.28

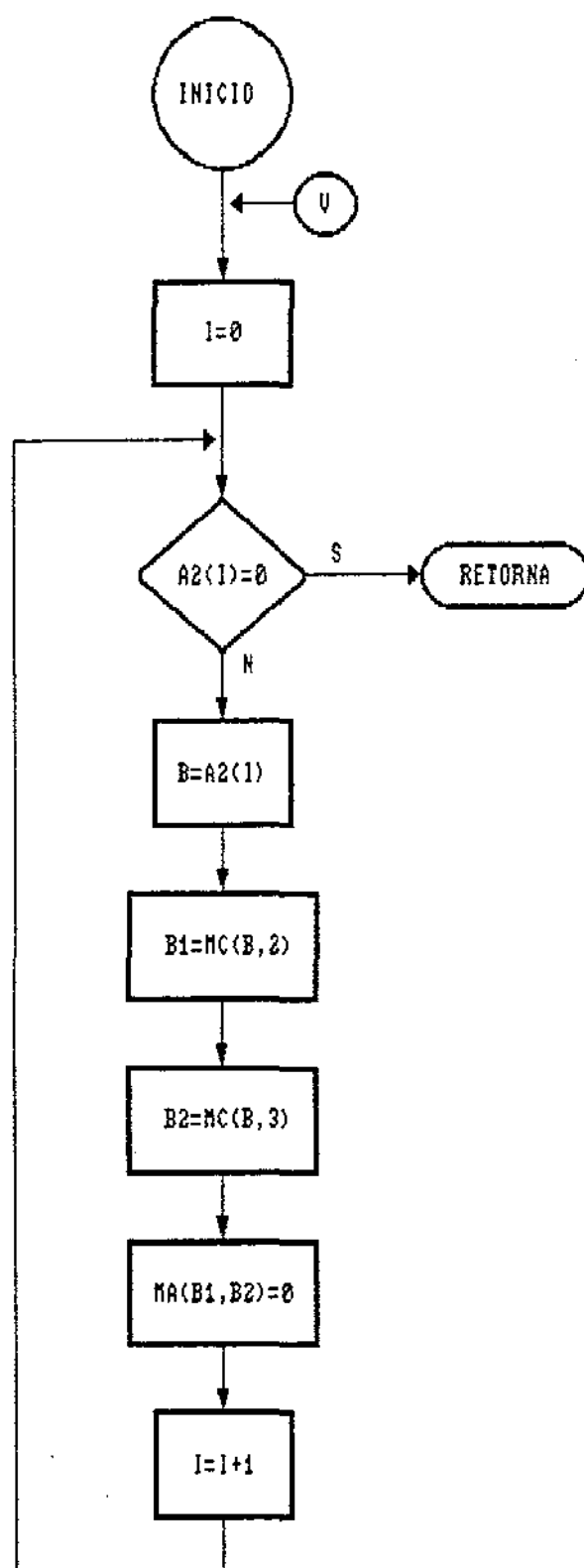


Figura 3.27 - Fluxograma para a adequação da matriz de adjacências a arbitrariedade de reciclos.

3.13 GERENCIAMENTO DOS MÓDULOS

As diversas seções anteriores, têm como objetivo final a determinação da sequência de cálculos. Após determinar e arquivar a sequência de cálculo, o programa que reside a CPU não tem mais nenhuma utilidade, e o sistema automaticamente se encarrega de apagar todas as linhas do programa e um novo programa que se encontra nos discos flexíveis ou no Winchester será transferido para a CPU.

A etapa em que se apaga o programa que está na CPU e requisita um outro para substituí-lo, é uma fase que exige cuidados especiais e comandos muito específicos. Dois comandos do BASIC foram utilizados: COMMON que faz a transferência dos valores de NU, NC, NM, C e G para a nova fase do programa e o comando CHAIN que efetua exatamente a substituição do programa.

A Figura 3.28 mostra o fluxograma utilizado na etapa de gerenciamento. Logo no início as informações oriundas da fase anterior do programa, ou seja, número de unidades do processo, número de correntes do processo e número máximo de correntes associada a cada unidade, são arquivados em uma área na memória RAM, em comum com as unidades. Apesar de reduzir a memória RAM, usando parte dela para arquivar dados, em contrapartida, o acesso a estes dados pelos subprogramas das unidades modulares é instantâneo. Isto torna o sistema bem mais ágil, pois dispensa as consultas a discos flexíveis ou winchester, que geralmente são mais demoradas.

Os dados na memória RAM são arquivados e resgatados através de dois comandos básicos: PEEK E POKE. Para arquivar, arbitra-se um endereço e através do comando POKE o dado é armazenado no endereço especificado. Para resgatar, utiliza-se o comando PEEK in-

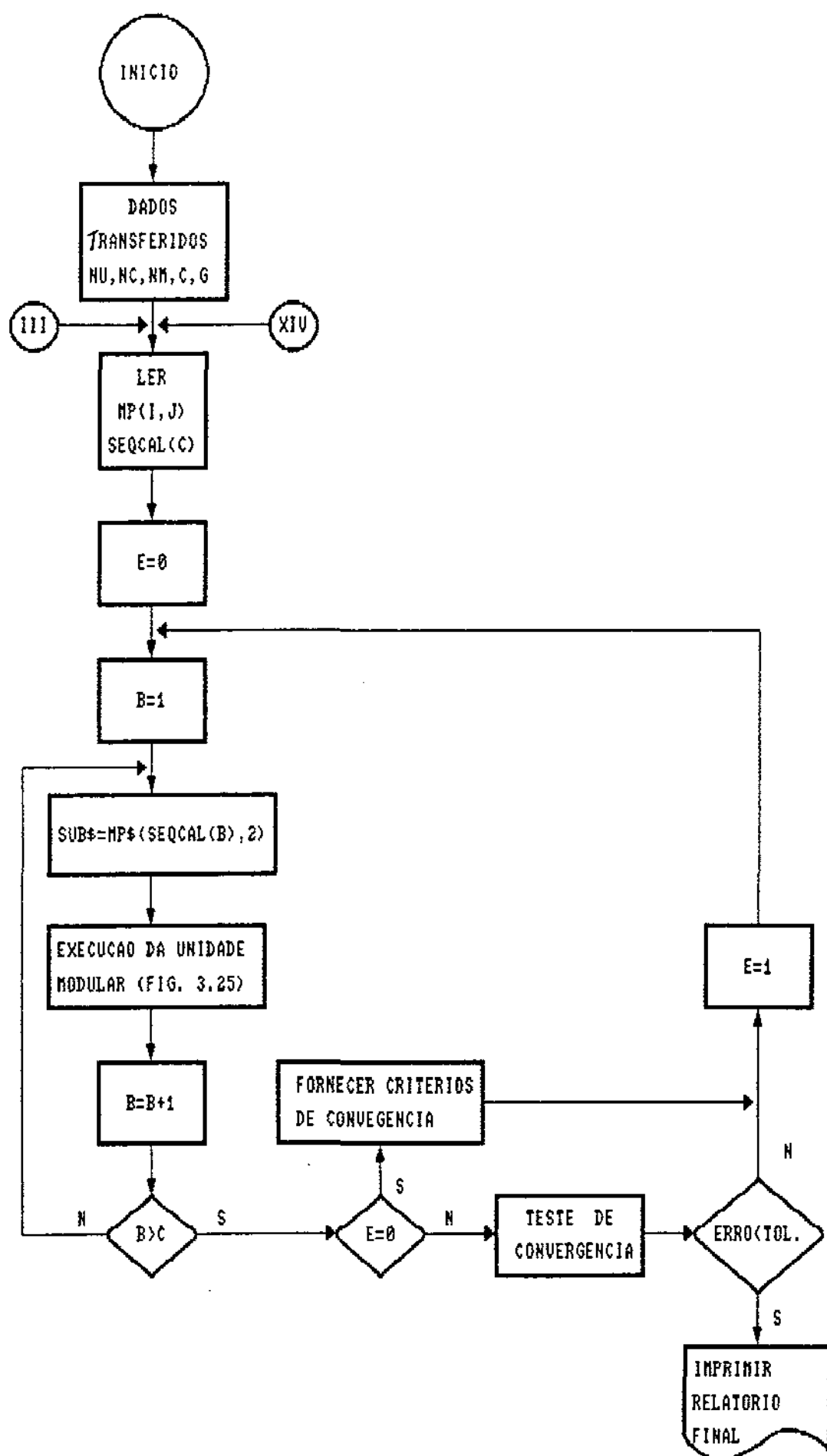


Figura 3.28 - Fluxograma do programa gerenciador.

formando a este o endereço no qual o dado foi arquivado.

Na etapa seguinte, o sistema lê os arquivos MATPROCS.ALE (Matriz do Processo) e SEQCAL.SEQ (Sequência de Cálculo).

O gerenciamento propriamente dito, começa quando o sistema lê o número da primeira unidade registrada na sequência de cálculo. A partir deste número e utilizando-se da segunda coluna da matriz do processo, é identificado o nome da unidade modular e qual o seu subprograma correspondente. Na etapa seguinte, o subprograma que está arquivado na biblioteca de módulos é transferido para o interior do programa gerenciador, sendo também feita a transferência dos valores das variáveis do programa gerenciador para o subprograma.

As diversas fases de execução dos subprogramas que representam as unidades modulares, são mostrados na Figura 3.29

Terminada a execução do subprograma (unidade modular), o sistema computacional retorna ao programa gerenciador e o procedimento descrito anteriormente para a primeira unidade, será repetido para as demais unidades do processo.

Após o término do cálculo da última unidade registrada na sequência de cálculo, é feito um teste de convergência, se o critério adotado foi atingido, o sistema procederá a impressão dos resultados, caso contrário, retorna-se ao início da sequência de cálculo e uma nova iteração será executada.

3.14 CÁLCULO DAS UNIDADES MODULARES

A unidade modular, na realidade, é o modelo matemático que representa o equipamento existente no processo, escrito cada um deles através de um subprograma. Para cada equipamento existente nos processos químicos, pode se ajustar uma equação matemática

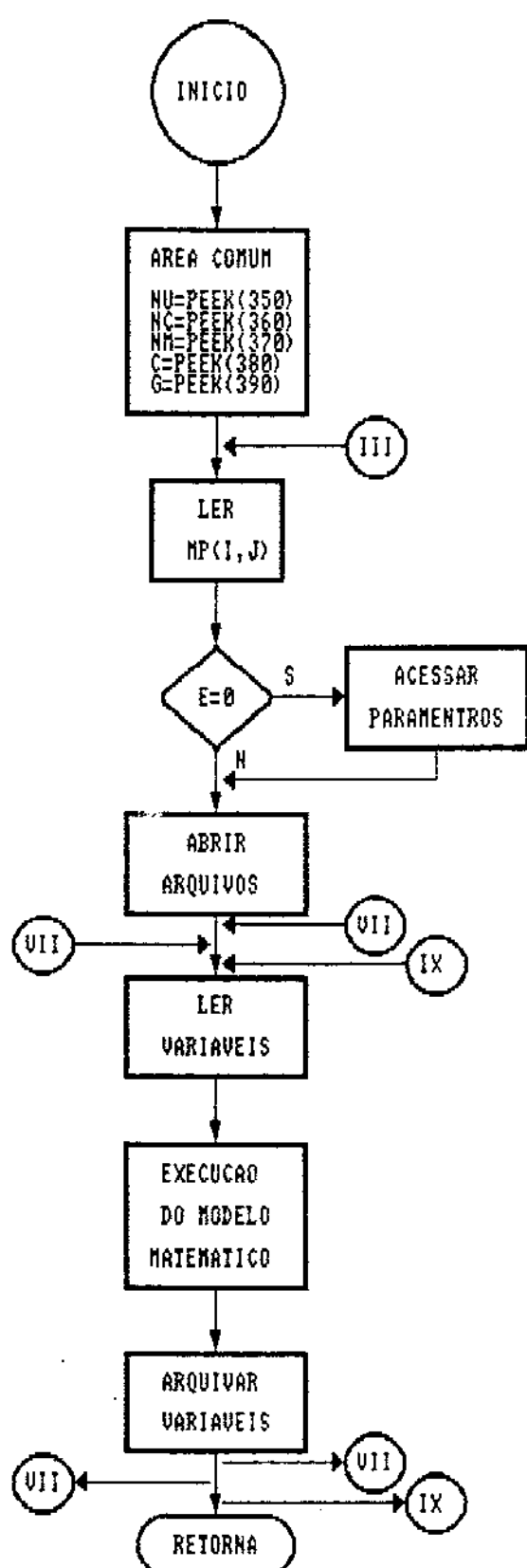


Figura 3.29 - Fluxograma para a execucao da unidade modular.

para representa-lo, e quanto mais representativa for a equação, mais será a aproximação dos resultados obtidos via programa simulador e os dados experimentais colhidos junto a planta.

No capítulo 04 foram desenvolvidas várias unidades modulares, mostrando os modelos matemáticos e os parâmetros que representam cada equipamento.

O fluxograma das etapas de execução da unidades modulares é apresentado na Figura 3.29. Para um melhor entendimento, discutiremos a seguir algumas etapas do fluxograma.

3.14.1 ÁREA EM COMUM

Anteriormente já mencionamos qual o objetivo de se criar uma área em comum, tanto para o programa gerenciador, quanto para os subprogramas que representam as unidades modulares. Na execução do módulo, a área em comum é consultada através do comando PEEK, e os dados NU, NC, NM, C e G são inseridos no subprograma.

3.14.2 ADMISSÃO DOS PARÂMENTROS

A admissão dos parâmetros é uma das fases do programa, onde o operador precisa dedicar cuidados especiais. Na entrada de dados da matriz do processo, sempre é possível se fazer uma correção, porém na introdução dos parâmetros nem sempre isto é possível.

Os parâmetros intrínsecos a cada unidade modular são definidos convenientemente na construção das mesmas, sendo inerente a modelagem matemática do equipamento, podendo no entanto, ser fornecidos pelo operador, por subrotinas de predição de propriedades físicas ou banco de dados existentes no sistema.

Neste trabalho, o sistema computacional foi desenvolvido apenas para estabelecer o balanço de massa global das unidades. Os parâmetros intrínsecos relacionam a transferência de massa entre as correntes de saída, caracterizando qual percentual de massa da corrente ou o percentual da massa de cada componente em relação a cada corrente. Os percentuais de saída são relacionados, evidentemente, com as correntes de entrada.

No capítulo 04 são descritos os parâmetros que devem ser fornecidos para cada unidade modular.

A introdução dos parâmetros é feita durante a primeira iteração. A cada unidade modular que for sendo executada, o sistema solicita ao operador os parâmetros inerentes aquela unidade específica. Após a introdução, os parâmetros são arquivados para posterior uso nas iterações subsequentes. No apêndice B, estão registrados os nomes e as funções dos diversos arquivos criados para armazenar parâmetros.

Para um melhor esclarecimento da definição de parâmetros intrínsecos, a seguir mostraremos dois exemplos representando duas unidades modulares: DIV (Divisor de Corrente Isotérmico) e a SEP (Separador de Componentes).

A Figura 3.30 mostra a representação esquemática da unidade modular Divisor de Corrente Isotérmico (DIV).

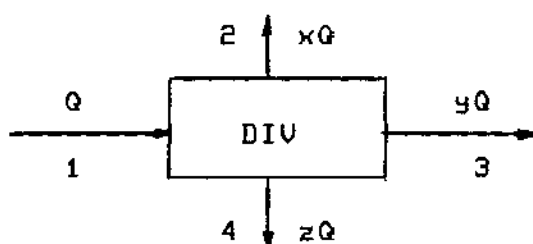


Figura 3.30 - Representação Esquemática da Unidade DIV.

No exemplo acima, existem três correntes de saída e uma de entrada. Para efetivar a execução do módulo DIV, o sistema lê nos

arquivos QTPNCOMP.ALE, NOMECOMP.ALE e FRAMOL.ALE, todas as informações inerentes à corrente de entrada. Para calcular os valores das correntes de saída, ele necessita conhecer quais os valores dos parâmetros x , y , z . Na tela do monitor de vídeo aparece a seguinte mensagem:

QUAL E O FATOR DE DIVISÃO DA CORRENTE Nº

O operador deve informar o fator de divisão do fluxo para cada corrente de saída à medida em que esta informação for solicitada.

A Figura 3.31 mostra a representação esquemática da unidade modular de separação SEP.

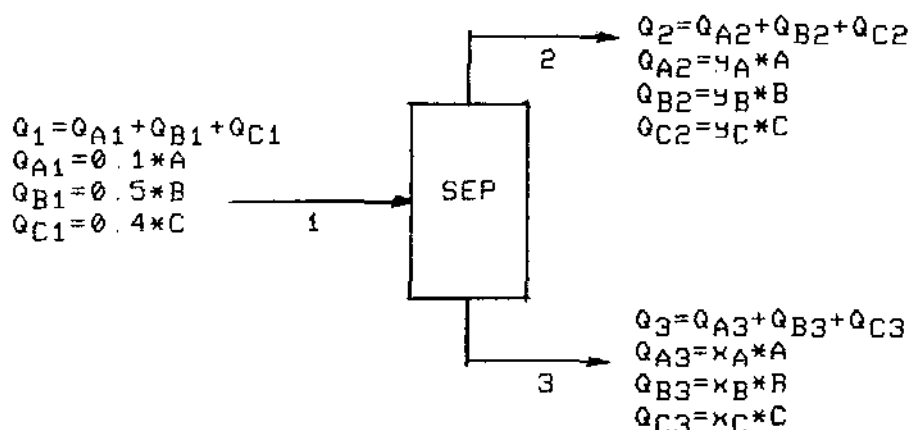


Figura 3.31 - Representação Esquemática da Unidade SEP.

A figura acima representa uma coluna de destilação, onde uma amostra líquida de três componentes vai ser separada.

Neste exemplo, o sistema solicitará como parâmetros os valores de $y_A, y_B, y_C, x_A, x_B, x_C$. As constantes y_A e x_A representam qual é o percentual da massa do componente A nas correntes 2 e 3, respectivamente. A soma de y_A e x_A é obrigatoriamente igual a unidade. Para os demais componentes, seguir raciocínio análogo.

A Figura 3.32 mostra aspecto da tela do monitor de vídeo, quando os dados do módulo SEP estão sendo introduzidos.

```
**** CALCULANDO MODULO SEP ****  
  
ITERACAO No 1 **** MODULO No 2  
  
QUAL FATOR DE SEPARACAO NA CORRENTE... 3  
  
      A      0.8  
      B      0.7  
      C      0.1  
  
ESTAS INFORMACOES ESTAO CORRETAS..(S/N)
```

Figura 3.32 - Aspecto da tela do monitor de vídeo durante a introdução dos parâmetros referente à unidade modular SEP.

Na introdução dos parâmetros relacionados com valores percentuais, independente da unidade modular, o valor do parâmetro deve estar obrigatoriamente compreendido entre "0" e "1". Por exemplo: se o parâmetro tem valor de 80%, o número digitado deve ser 0.8.

3.15 TESTE DE CONVERGÊNCIA DOS RESULTADOS

A grande maioria dos processos químicos envolve reciclo de massa em suas plantas, isto dificulta consideravelmente o cálculo do balanço de massa global das unidades do processo industrial.

Conforme análise feita na seção 3.10, uma maneira de calcular as unidades pertencentes aos reciclos é através da abertura dos próprios reciclos, determinando uma corrente de corte para cada reciclo, atribuindo valores iniciais para estas correntes e realizando um cálculo iterativo.

O teste de convergência é feito ao término da sequência de cálculo. A análise é realizada através dos cálculos dos desvios relativos das variáveis vazão, temperatura, pressão e fração mássica de cada componente, em cada corrente de corte.

A equação a seguir ilustra como o desvio relativo é calculado.

$$Dr_i = \frac{U(i-1) - U(i)}{U(i-1)} * 100$$

onde: Dr, desvio relativo; U, valor da variável; i, nº da iteração.

Se o desvio relativo entre a iteração "i" e "i-1" for menor que o critério de tolerância admitido, o sistema convergiu e é feita a impressão do relatório final. Caso contrário, o sistema computacional realiza uma nova iteração.

A rotina de cálculo geralmente é demorada e envolve um grande número de iterações, torna-se sensato procurar meios que possam minimizar o tempo de execução da simulação.

A maioria dos métodos apresentados na literatura como um meio de acelerar a convergência, foram desenvolvidos a partir dos valores das funções e de suas derivadas, conseqüentemente, o uso destes métodos são impraticáveis quando se trabalha com valores algébricos, como é o caso deste estudo.

O método de Wegstein foi desenvolvido objetivando a aceleração da convergência algébrica, e foi o único encontrado na literatura por nós consultada para este fim. A Figura 3.33 mostra o fluxograma deste método, onde: $x^{(0)}$, valor arbitrado inicialmente; $x^{(1)}$, valor obtido após a primeira iteração; $x^{(2)}$, valor obtido após a segunda iteração.

Foram feitos diversos testes no intuito de verificar a eficiência de método de Wegstein. Em alguns casos observou-se uma redução de até 40% do número de iterações, quando comparada com o método da substituição sucessiva. Porém, em outros exemplos, observou-se que o método auxiliava a convergência de algumas variáveis, entretanto, aumentava o desvio para as demais variáveis, várias iterações foram executadas e a convergência não foi atin-

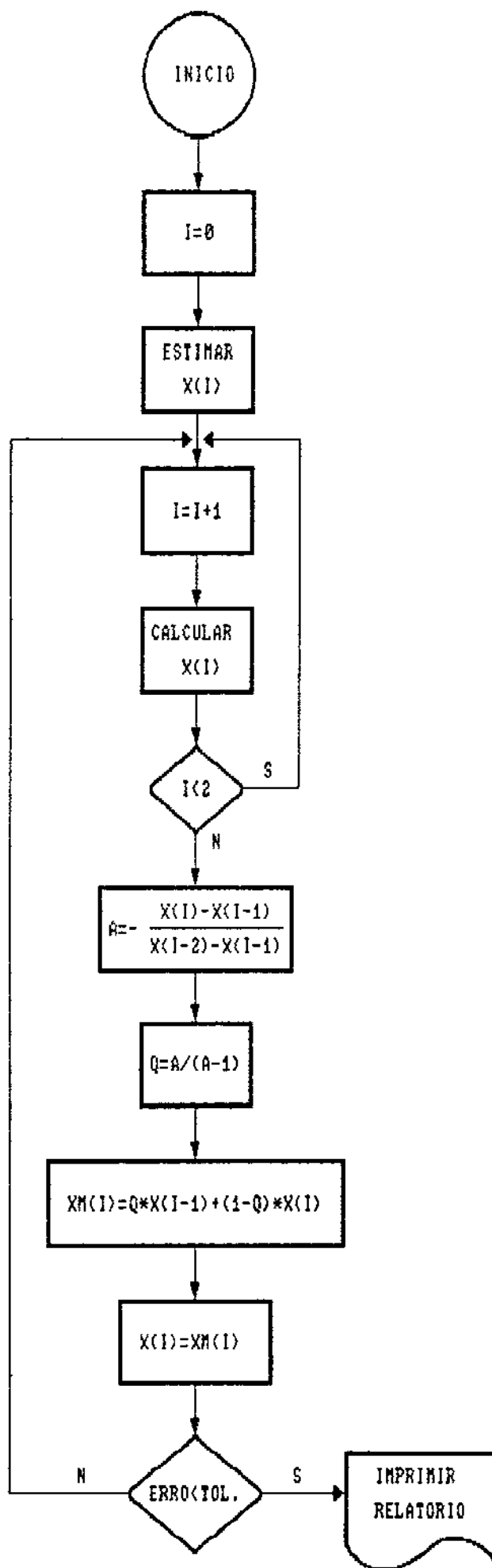


Figura 3.33 - Fluxograma do Metodo de Wegstein.

gida. Nestes casos, mesmo que demoradamente, a substituição sucessiva convergiu.

Em artigo publicado em 1986, Milani e Findely apresentam uma rápida discursão a respeito da aplicação do método da substituição sucessiva e do método de Wegstein. Eles analisaram a relação existente entre a taxa de reciclo e a alimentação do módulo, e dependendo do valor obtido nesta relação, pode-se prever qual dos métodos convergirá mais rapidamente. No entanto, esta análise é difícil de fazer na prática, e por isto, deixamos a critério da sensibilidade do operador, quanto ao uso do método de Wegstein ou da substituição sucessiva.

3.16 IMPRESSÃO DO RESULTADOS

A impressão dos resultados é efetuado de duas formas diferentes. Primeiro ao término de cada iteração é expedido um relatório para cada corrente de corte existente, no qual são apresentados os valores das variáveis na iteração vigente e na iteração anterior, além de imprimir o desvio relativo para cada variável. Após atingir a convergência, é emitido um relatório final, contendo todas as correntes do processo, seus respectivos valores de vazão, temperatura, pressão e composição.

4. DESENVOLVIMENTO DAS UNIDADES MODULARES

4.1 INTRODUÇÃO

A versatilidade e a importância de um programa executivo de estrutura modular, está diretamente condicionado à sua biblioteca de módulos, quanto maior for o número de equipamentos industriais representados através das unidades modulares, também maior será o número de processos químicos que poderão ser simulados.

A denominação "black-box", consiste em um mecanismo capaz de simplificar a modelagem matemática de cada equipamento. De tal forma que sabendo-se os dados das correntes de entrada e os parâmetros básicos do equipamento, pode-se calcular os valores das correntes de saída.

Neste capítulo é descrito o conjunto de unidades modulares simplificadas por nós elaboradas e representativas de equipamentos mais frequentes na indústria química. Para cada unidade foi feito uma representação esquemática, mostrando as equações utilizadas e quais os parâmetros que o operador precisa fornecer.

As unidades modulares desenvolvidas referem-se aos seguintes equipamentos: misturador adiabático, divisor de corrente, termostato, reator, bomba, compressor, flash, absorvedor isotérmico e separador.

4.2 MISTURADOR ADIABÁTICO

É frequente o uso pela indústria da operação de mistura de correntes de fluidos, com o objetivo de se obter uma corrente produto homogênea, com vazão equivalente a soma das vazões das correntes de entrada. Além do conhecimento da vazão, é também de grande interesse nos processos estacionários o cálculo da temperatura e composição da corrente resultante.

A unidade modular Misturador Adiabático (MIT) foi desenvolvida com o intuito de modelar um misturador de corrente de fluidos. No desenvolvimento desta unidade modular as seguintes simplificações foram adotadas: processo de mistura adiabática, temperatura da corrente de saída (s) igual à média ponderada das temperaturas das correntes de entrada e ($i=1,n$).

O número de correntes de entrada da unidade MIT é variável, sendo as correntes especificadas através da Matriz do Processo, dispensando deste modo o uso de parâmetros.

A representação esquemática da unidade modular MIT é apresentada pela Figura 4.1.

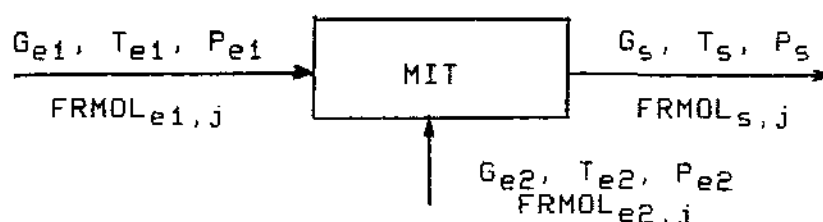


Figura 4.1 - Misturador Adiabático

Na elaboração do modelo, as seguintes equações de balanço foram utilizadas:

$$G_s = \sum_{i=1}^n G_{ei}$$

$$T_s = \frac{\sum_{i=1}^n G_{ei} * T_{ei}}{\sum_{i=1}^n G_{ei}}$$

$$FRMOL_{s,j} = \frac{\sum_{i=1}^n G_{ei} * FRMOL_{ei,j}}{\sum_{i=1}^n G_{ei}}$$

onde G_i é vazão mássica da corrente i , T_i a temperatura da corrente i e $FRMOL_{i,j}$ a fração mássica do componente j na corrente

i. G_s, T_s , e $FRMOL_{s,j}$ são respectivamente, a vazão, temperatura e fração mássica do componente j na corrente de saída, "e" e "s" identificam as correntes de entrada e saída, respectivamente.

4.3 DIVISOR DE CORRENTES - DIV

A divisão da vazão mássica de uma corrente de fluido em uma série de correntes de mesma temperatura e composição, constitui-se da operação realizada pelo divisor de correntes.

A unidade modular DIV contém as equações da modelagem do divisor de correntes, admitindo um número variável de correntes de saída, as quais são especificadas através da Matriz de Processo. Os fatores de divisão das correntes resultantes deverão ser fornecidos como parâmetros da unidade DIV, sendo obrigatoriamente a soma destes parâmetros igual à unidade.

A representação esquemática da unidade modular DIV é apresentada pela Figura 4.2.

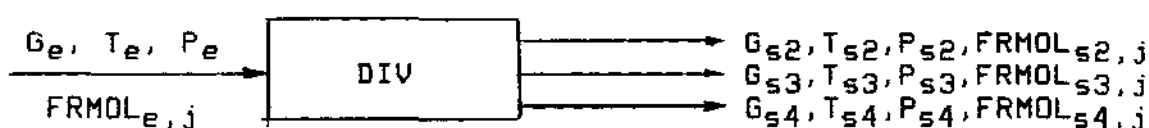


Figura 4.2 - Representação Esquemática da Unidade Modular DIV

onde $G_i, T_i, P_i, FRMOL_{i,j}$ correspondem a vazão mássica, temperatura, pressão e fração mássica do componente j na corrente saída i , respectivamente ($i=1,n$).

Na modelagem, as seguintes equações de balanço foram utilizadas:

$$G_e = \sum_{i=1}^n G_{si}$$

$$T_e = T_{s1} = T_{s2} = \dots T_{sn}$$

$$P_e = P_{s1} = P_{s2} = \dots P_{sn}$$

$$FRMOL_{e,j} = FRMOL_{s1,j} = FRMOL_{s2,j} = \dots FRMOL_{sn,j}$$

$$G_{si} = \alpha_i * G_e$$

onde α_i corresponde ao fator de divisão da corrente i , "s" e "e" identificam as correntes de saída e entrada, respectivamente.

4.4 SEPARADOR - SEP

É comum nos processos químicos a existência de mistura contendo diversos componentes, principalmente quando há transformação química no decorrer do processo. Geralmente as reações originam componentes que contaminam o produto principal, tornando-se necessário realizar etapas de purificação com objetivo de se obter um produto final isento de impureza.

A separação de uma solução ou de uma mistura fisicamente homogênea, exige que haja uma transferência preferencial de um constituinte para a segunda fase que passa a ser fisicamente separada da mistura residual.

O processo de separação mais amplamente usado na indústria química é a destilação. A separação dos constituintes está baseada nas diferenças de volatilidade. Na destilação, uma fase vapor entra em contato com uma fase líquida, e há transferência de massa do líquido para o vapor e este para aquele.

A modelagem de unidade modular SEP foi desenvolvida simplificadamente, considerou-se apenas o fator de separação de cada componente da mistura em relação a cada uma das correntes de saída.

A unidade modular SEP admite um número variável de correntes de entrada e de saída, as quais são especificadas através da Ma-

triz de Processo. Os fatores de separação deverão ser fornecidos pelo operador como parâmetros da unidade SEP. Para cada componente a soma dos fatores de separação é obrigatoriamente igual a unidade.

A representação esquemática da unidade modular SEP é apresentada na Figura 4.3.

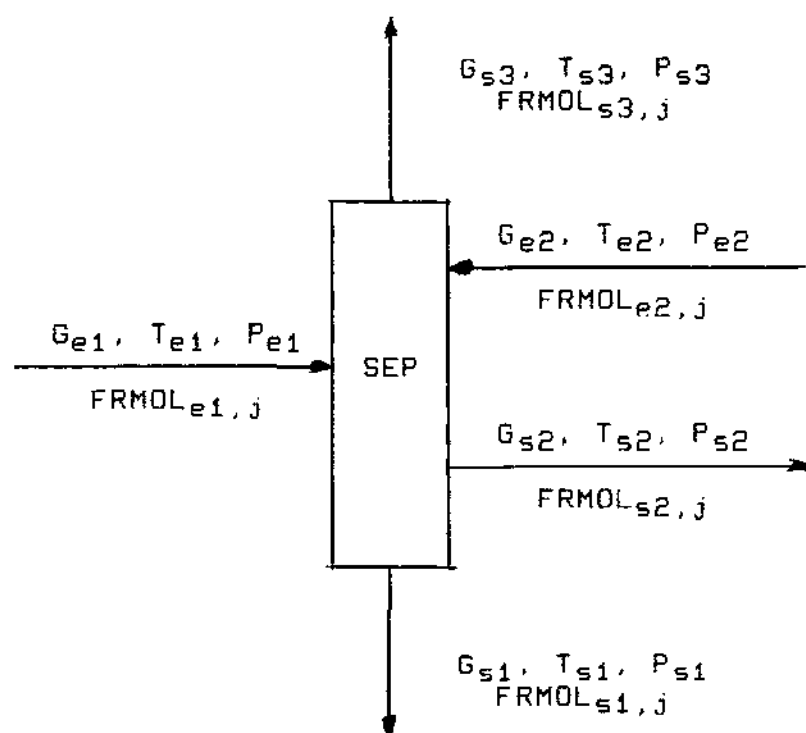


Figura 4.3 - Representação Esquemática da Unidade Modular SEP

As seguintes equações de balanço foram utilizadas para a modelagem de unidade SEP:

$$\begin{aligned}
 G_{Re} &= \sum_{i=1}^N G_{ei} \\
 T_{Re} &= \frac{\sum_{i=1}^N G_{ei} * T_{ei}}{\sum_{i=1}^N G_{ei}} \\
 FRMOL_{Re,j} &= \frac{\sum_{i=1}^N G_{ei} * FRMOL_{ei,j}}{\sum_{i=1}^N G_{ei}} \\
 G_{s1} &= \sum_{i=1}^N F_{si,j} * FRMOL_{Re,j} * G_{Re} \\
 FRMOL_{si,j} &= \frac{F_{si,j} * FRMOL_{ei,j} * G_{ei}}{G_{s1}}
 \end{aligned}$$

onde:

G_{Re} -- Vazão mássica resultante das correntes de entrada

G_{ei} -- Vazão mássica da corrente de entrada de número i

G_{si} -- Vazão mássica da corrente de saída de número i

T_{Ri} -- Temperatura resultante das correntes de entrada

T_{ei} -- Temperatura da corrente de entrada de número i

$FRMOL_{Re,j}$ -- Fração mássica resultante do componente j das correntes de entrada

$FRMOL_{ei,j}$ -- Fração mássica do componente j na corrente de entrada de número i

$FRMOL_{si,j}$ -- Fração mássica do componente j na corrente de saída de número i

$F_{si,j}$ -- Fator de separação do componente j na corrente de saída de número i

4.5 FLASH - FLASH

A vaporização por flash ou destilação em equilíbrio como é por alguns chamada, é uma operação em simples estágio onde uma mistura líquida é vaporizada parcialmente, o vapor estabelece o equilíbrio com o líquido residual, resultando na separação da fase líquida da fase vapor. O equipamento utilizada para estes fins é denominada de tanque flash, podendo ser contínuo ou de batelada.

No tanque flash a transferência de massa ocorre quando uma mistura líquida a uma determinada temperatura e pressão, entra em contato com um ambiente a uma pressão inferior, esta diferença de pressão proporciona a evaporação espontânea dos componentes da mistura líquida que possuem a pressão de vapor superior a pressão do ambiente

Para efeito de modelagem, não levamos em consideração a análise do equilíbrio líquido-vapor, enfocaremos simplificadaamente os parâmetros de separação de cada componente.

Após o operador definir qual é a corrente de vapor entre as duas correntes de saída da unidade FLASH, deverá fornecer a temperatura, a pressão e os fatores de separação de cada componente em relação a corrente de vapor.

A representação esquemática desta unidade pode ser vista na Figura 4.4.

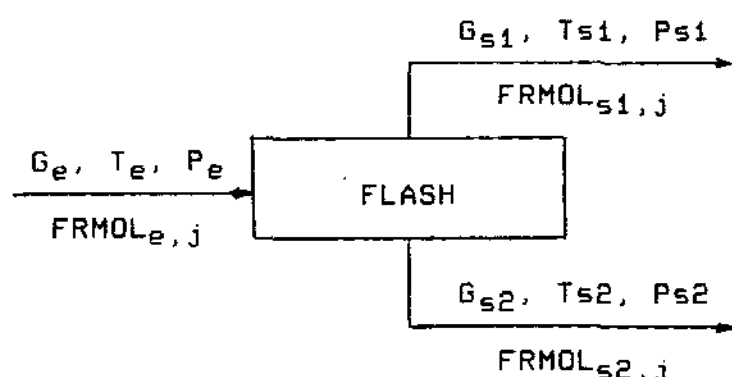


Figura 4.4 - Representação Esquemática da Unidade Modular FLASH

As seguintes equações de balanço foram utilizadas para a modelagem da unidade FLASH:

$$G_e = \sum_{i=1}^n G_{si}$$

$$G_{si} = \sum_{j=1}^n F_{si,j} \cdot \text{FRMOL}_{e,j} \cdot G_e$$

$$\text{FRMOL}_{si,j} = \frac{F_{si,j} \cdot \text{FRMOL}_{e,j} \cdot G_e}{G_{si}}$$

onde G_e corresponde à vazão mássica da corrente de entrada e G_{si} corresponde à vazão mássica da corrente de saída de número i , $F_{si,j}$ refere-se ao fator de separação do componente j na corrente i e $\text{FRMOL}_{i,j}$ é a fração mássica do componente j na corrente i .

4.6 REATOR - REA

A maioria dos processos químicos em operação, têm em suas plantas no mínimo a presença de um reator, isto ressalta a importância da existência de uma unidade que represente o reator na biblioteca de módulos de um programa executivo. Este módulo representa as alterações químicas sofridas no decorrer das várias etapas do processo.

A unidade modular REA foi desenvolvida com o intuito de modelar um reator. Algumas restrições foram feitas e são tidas como corretas, pois a nossa intenção é de apenas quantificar as alterações ocorridas nas concentrações dos componentes, na entrada e saída do reator.

As simplificações adotadas na unidade modular REA foram as seguintes:

- Reação isotérmica
- Reator adiabático
- O reator pode ser, tanto homogêneo como heterogêneo
- É indiferente quanto a sua classificação, reator descontínuo(batch reactor), reator tubular(plug flow reactor) ou reator de mistura(mixed flow reactor)
- Não há necessidade de se conhecer a equação da taxa e a constante de velocidade da reação

Para a execução do módulo é necessário que se forneça as seguintes informações:

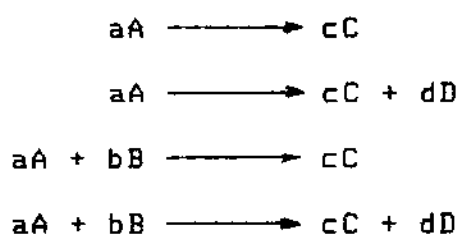
- Número de reagentes
- Nome dos reagentes
- Peso molecular dos reagentes
- Coeficiente estequiométrico dos reagentes
- Taxa de conversão do reagente limitante

- Número de produtos
- Nome dos produtos
- Peso molecular dos produtos
- Coeficiente estequiométrico dos produtos

obs1: reagente limitante é aquele que se encontra em menor proporção estequiométrica.

obs2: em função da estrutura computacional, o nome do reagente limitante da reação deve ser fornecido antes dos demais reagentes.

O módulo é compatível para os quatro tipos de reações descritas abaixo.



A representação esquemática da unidade modular REA é apresentada pela Figura 4.5.



Figura 4.5 - Representação Esquemática da Unidade Modular REA

onde G , T , P , $FRMOL_{i,j}$ correspondem a vazão mássica, temperatura, pressão e fração mássica de componente j , respectivamente, "e" e "s" representam a entrada e saída.

As equações usadas na modelagem são as seguintes:

$$\begin{array}{l}
 G_e = G_s \\
 T_e = T_s \\
 P_e = P_s
 \end{array}$$

Para os reagentes:

$$FRMOL_{s,j} = (FRMOL_{e,j}/M_j - (v_j/v_i) * X * (FRMOL_{e,j}/M_j)) * M_j$$

Para os produtos:

$$FRMOL_{s,j} = (FRMOL_{e,j}/M_j + (v_j/v_i) * X * (FRMOL_{e,j}/M_j)) * M_j$$

- M_j --- Peso molecular do componente j
- v_j --- Coeficiente estequiométrico do componente j
- v_i --- Coeficiente estequiométrico do componente i
- X --- Taxa de conversão em relação ao reagente limitante

4.7 ABSORVEDOR ISOTÉRMICO - ABSI

Existem processos industriais que possuem matéria prima, sub-produto ou produto final sob a forma de mistura de gases. Às vezes por obrigatoriedade processual ou até mesmo operacional, torna-se necessário fazer a separação desses gases, o equipamento destinado a esta finalidade denomina-se absorvedor. Com objetivo de representar um absorvedor foi desenvolvida a unidade modular ABSI.

Absorção de um gás é uma operação em que uma mistura de gases é contactada com um líquido, com a intenção de dissolver um ou mais componentes da mistura gasosa na fase líquida. Esta operação requer uma transferência de massa da corrente gasosa para a fase líquida.

Na modelagem do absorvedor algumas considerações foram necessárias, por exemplo, a taxa de absorção não é calculada através dos dados referente ao equilíbrio do sistema gás-líquido, curva de solubilidade do gás no líquido, temperatura ou pressão.

A taxa de absorção é introduzida via parâmetro, ou seja, o operador fornece o percentual em massa que cada componente transfere da fase gasosa para a fase líquida.

A representação esquemática da unidade modular ABSI é apresentada na Figura 4.6.

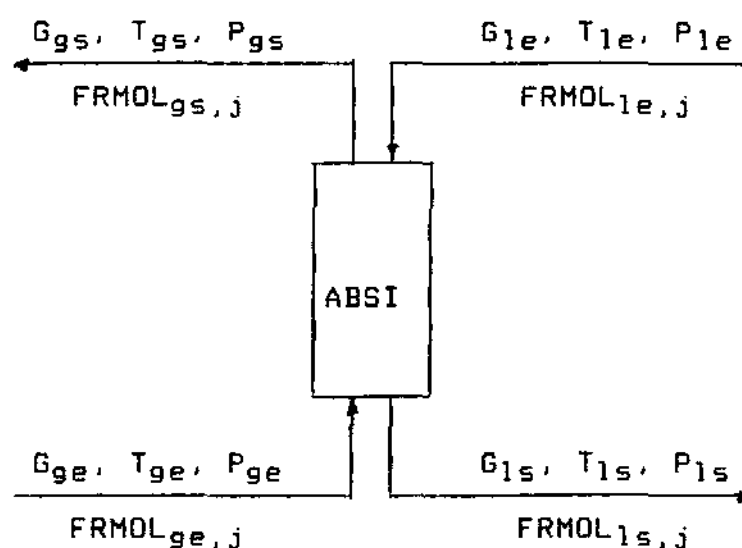


Figura 4.6 - Representação Esquemática da Unidade Modular ABSI

As equações que estabelecem o balanço de massa no módulo ABSI, são as seguintes:

$$\begin{aligned}
 T_e &= T_s \quad ; \quad P_e = P_s \\
 M_{le,j} &= FRMOL_{le,j} * G_{le} \\
 M_{ge,j} &= FRMOL_{ge,j} * G_{ge} \\
 M_{ls,j} &= M_{ge,j} * X_j + M_{le,j} \\
 G_{ls} &= G_{le} + \sum_{j=1}^{N_{COMP}} M_{ge,j} * X_j \\
 G_{gs} &= G_{le} - \sum_{j=1}^{N_{COMP}} M_{ge,j} * X_j \\
 FRMOL_{ls,j} &= M_{ls,j} / G_{ls} \\
 FRMOL_{gs,j} &= M_{ge,j} / G_{gs}
 \end{aligned}$$

onde os índices "e" e "s" indicam as correntes de entrada e saída da unidade modular, "l" e "g" indicam fase líquida e fase gasosa e o índice "j" especifica o componente. M, G, T, P e FRMOL representam à massa, vazão mássica, temperatura, pressão e fração mássica respectivamente.

4.8 TERMOSTATO - TER

Um termostato é utilizado quando se pretende manter constante a temperatura de uma corrente, por exemplo, quando a temperatura de entrada de um reator deve ser mantida num valor constante.

Na modelagem da unidade TER, a temperatura da corrente de saída foi considerada como uma constante, sendo esta, atribuída pelo operador, como um parâmetro da unidade TER.

A representação esquemática da unidade TER é apresentada na Figura 4.7.



Figura 4.7 - Representação Esquemática da Unidade termostato TER onde os índices "e" e "s" indicam as correntes de entrada e saída da unidade TER.

As seguintes equações de balanço foram usadas na modelagem da unidade TER:

$$G_e = G_s ; P_e = P_s ; FRMOL_{e,j} = FRMOL_{s,j}$$

onde G , P , T e $FRMOL_{i,j}$ representam a vazão mássica, pressão, temperatura e fração mássica do componente j na corrente i , respectivamente.

4.9 BOMBA - BOMBA E COMPRESSOR - COMP

Os fluidos que participam de processos químicos podem ser, gases, líquidos ou combinação de ambos, há necessidade frequente de deslocar fluidos de um ponto a um outro dentro da fábrica, para esta finalidade usa-se equipamento que eleva a pressão. É convencional falar em bombeamento quando estão envolvidos líquidos, e o equipamento é usualmente denominado de uma bomba. Os gases têm densidade e viscosidade mais baixas, além de maior compressibilidade de modo que usam dispositivos diferentes para movimentá-los. Dependendo do aumento de pressão que se deseja efetivar usam-se ventiladores, sopradores e compressores.

Logo, para transporte de fluidos na fase líquida ou no estado de uma suspensão, usaremos a unidade modular BOMBA, já para os fluidos na fase gasosa, utilizaremos a unidade modular COMP.

Na modelagem das unidades BOMBA e COMP, a pressão na corrente de saída foi considerada como uma constante, sendo esta, atribuída pelo operador como um parâmetro.

A representação esquemática das unidades BOMBA E COMP esta apresentada na Figura 4.8.



Figura 4.8 - Representação Esquemática da Unidade BOMBA ou COMP

onde os índices "e" e "s" indicam as correntes de entrada e saída da unidade modular.

As seguintes equações de balanço foram usadas na modelagem das unidades:

$$G_e = G_s ; T_e = T_s ; FRMOL_{e,j} = FRMOL_{s,j}$$

onde G , T , P e $FRMOL_{i,j}$ representam a vazão mássica, temperatura, pressão e fração mássica do componente j , respectivamente.

4.10 VÁLVULA - VALV

Os processos químicos envolvem, frequentemente, o estado fluido. O fluido é, em geral, transferido de uma parte do processo para outra através de canos. Para atender determinadas características do processo, torna-se necessário realizar um controle sobre o escoamento do fluido, para este fim, usa-se um tipo de acessório denominado de válvula.

As válvulas são usadas ou para controlar a vazão ou para interromper o escoamento do fluido, por consequência causa perda de carga, resultando numa diferença de pressão entre a entrada e a saída da válvula.

Na modelagem da unidade VALV, a pressão na corrente de saída foi considerada como uma constante, sendo esta, atribuída pelo operador como parâmetro.

A representação esquemática da unidade modular VALV está apresentada na Figura 4.9.



Figura 4.9 - Representação Esquemática da Unidade VALV

As seguintes equações de balanço foram usadas na modelagem das unidades:

$$G_e = G_s ; T_e = T_s ; FRMOL_{e,j} = FRMOL_{s,j}$$

onde os índices "e" e "s" indicam as correntes de entrada e saída da unidade modular, G, T, P e FRMOL_j representam a vazão mássica, temperatura, pressão e fração mássica do componente j, respectivamente.

**5. PROCESSOS SIMULADOS USANDO
O PROGRAMA PROPOSTO**

5.1 INTRODUÇÃO

Nos capítulos anteriores mostrou-se, o desenvolvimento das diversas unidades modulares que compõem o programa, a modelagem matemática de cada unidade, a forma estrutural e a sequência operacional do sistema computacional, e como deve ser a interação do operador com o programa durante as etapas de entrada dos dados e parâmetros.

Neste capítulo, foi testado a eficiência e a flexibilidade do programa proposto. Para isto, foram realizados diversos testes de simulação envolvendo diferentes tipos de processos químicos.

Os processos químicos testados como exemplos foram escolhidos mediante alguns critérios pré-estabelecidos:

- a - Processos que sofrem alterações em todas as suas variáveis
- b - Processos com ciclos de massa
- c - Processos com transformações físicas e reações químicas
- d - Processos em que uma mesma operação unitária pode ocorrer mais de uma vez

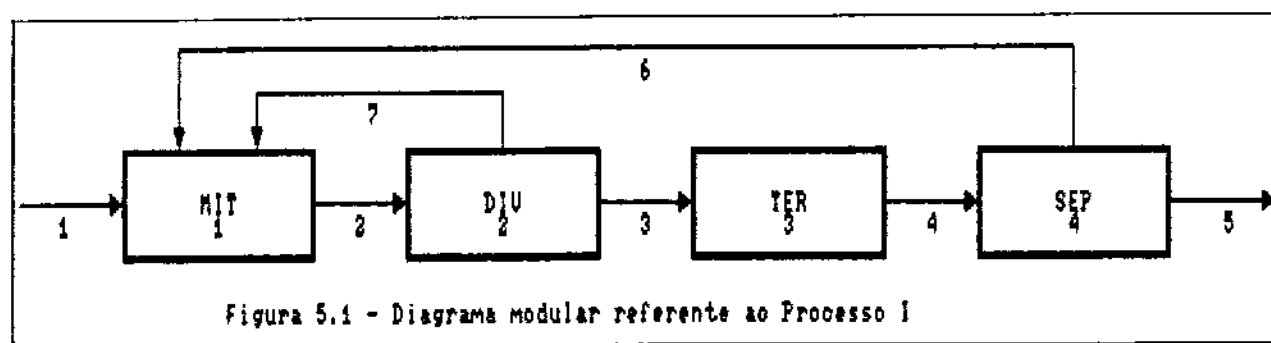
Estas condições nos asseguram não só a eficiência do programa, como também, a sua generalidade.

Durante a execução de cada exemplo simulado, é feita a impressão dos dados e parâmetros introduzidos, e das variáveis calculadas durante a execução da simulação. Por fim, é feita a impressão do relatório final com as seguintes informações: número de iterações em que o sistema convergiu, valores da vazão, temperatura, pressão e composição para cada corrente do processo, e uma conclusão relatando se foi usado o método de Wegstein para acelerar a convergência ou simplesmente o método da substituição sucessiva.

5.2 PROCESSO I - MISTURADOR - DIVISOR - TERMOSTATO - SEPARADOR

O Processo I é composto por quatro unidades modulares (MIT, DIV, TER, e SEP), onde são analisadas as variações da vazão, temperatura e composição das correntes do processo.

A Figura 5.1 apresenta o fluxograma do Processo I, sendo os resultados da simulação deste processo mostrado no Quadro 5.1



O processo I opera com uma alimentação de 100 Kg/s, onde 70% é do componente A e 30% do componente B. O divisor de fluxo DIV (2) recicla para a unidade de mistura MIT (1) 20% da vazão mássica. A unidade de aquecimento TER (3) mantém a temperatura do fluxo de saída em 400 K. A fração destilada (corrente 5) da unidade de separação SEP (4) contém 70% do componente A e 30% do componente B.

Quadro 5.1 - Relatórios da simulação do Processo I

**** MATRIZ DO PROCESSO ****						
UNIDADE		MODULO		CORRENTES ASSOCIADAS		
1		MIT		1	6	7 -2
2		DIV		2	-3	-7
3		TER		3	-4	
4		SEP		4	-5	-6

**** MATRIZ INCIDENTE ****								
UNIDADE	CORRENTE							
	1	1	2	3	4	5	6	7
1	1	1	-1	0	0	0	1	1
2	1	0	1	-1	0	0	0	-1
3	1	0	0	1	-1	0	0	0
4	1	0	0	0	1	-1	-1	0

**** MATRIZ CONEXAO DAS CORRENTES ****				
CORRENTE	DA UNIDADE		PARA UNIDADE	
1	1	0	1	1
2	1	1	2	2
3	1	2	3	3
4	1	3	4	4
5	1	4	0	0
6	1	4	1	1
7	1	2	1	1

**** MATRIZ ADJACENCIA ****					
DA UNIDADE	PARA UNIDADE				
	1	1	2	3	4
1	1	0	1	0	0
2	1	1	0	1	0
3	1	0	0	0	1
4	1	1	0	0	0

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 1

Vazao Massica (kg/s) = 100

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 2

Nome do Componente	Fracao Massica
--------------------	----------------

A	.7
B	.3

MATRIZ CIRCUITO (NOS)

* 1 * 2 * 3 * 4 *

* 1 * 2 *

MATRIZ CIRCUITO (CORRENTE)

* 2 * 3 * 4 * 6 *

* 2 * 7 *

CORRENTES DE CORTE

* 2 *

CORRENTE NUMERO = 2

Vazao Massica (kg/s) = 100

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 2

Nome do Componente	Fracao Massica
--------------------	----------------

A	.8
B	.2

**** SEQUENCIA DE CALCULO ****		
Ordem de Calculo	Unidade Numero	Unidade Modular
1	2	DIV
2	3	TER
3	4	SEP
4	1	MIT

Introdução dos parâmetros

**** CALCULANDO MODULO DIV ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 2

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -3
 ALFA (-3) = 0.8

**** CALCULANDO MODULO DIV ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 2

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -7
 ALFA (-7) = 0.2

**** CALCULANDO MODULO TER ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 3

QUAL A TEMPERATURA NA CORRENTE -4
 TEMPERATURA= 400

**** CALCULANDO MODULO SEP ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 4

QUAL FATOR DE SEPARACAO NA CORRENTE... 5

A	0.6
B	0.7

**** CALCULANDO MODULO SEP ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 4

QUAL FATOR DE SEPARACAO NA CORRENTE... 6

A	0.4
B	0.3

**** CALCULANDO MODULO MIT ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 1

NAO NECESSITA DE PARAMETROS

TOLERANCIA (%) NA CONVERGENCIA

VAZAO	1
TEMPERATURA	1
PRESSAO	1
COMPOSICAO	1

ITERACAO No 2

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VA	VC	$((VA-VC)/VA)*100$
VAZAO	150.40	175.10	%-16.426
TEMPERATURA	320.2	329.2	-2.802
PRESSAO	1.00	1.00	0.000
A	0.742	0.731	1.461
B	0.258	0.269	-4.204

**** RELATORIO FINAL ****

**** PROCESSO I ****

**** ITERACAO No 3 ****

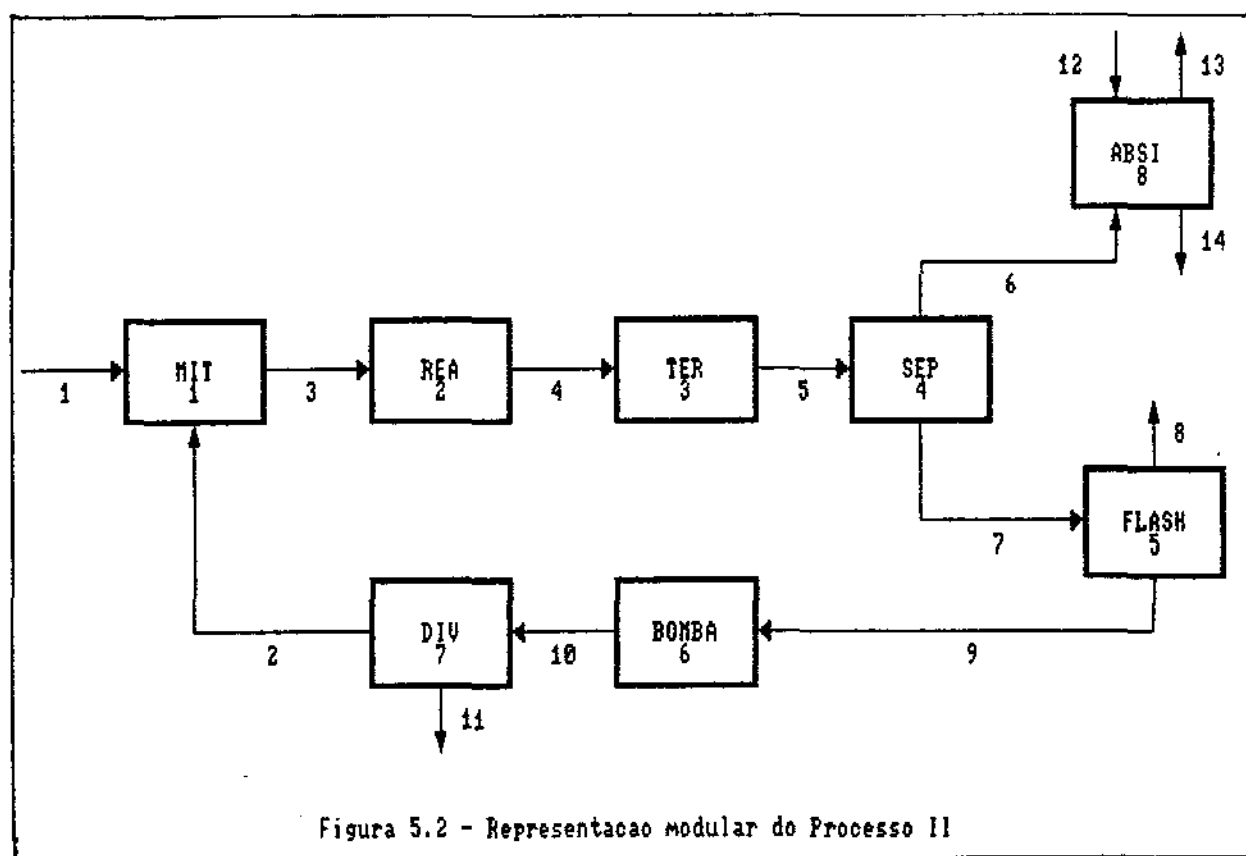
Corrente	Vazao	Temperatura	Pressao	Composicao (%)	
n	(Kg/s)	(K)	(Kgf/m2)	A	B
1	100.00	300.0	1.00	0.700	0.300
2	199.09	337.1	1.00	0.730	0.270
3	159.08	336.3	1.00	0.729	0.271
4	159.08	400.0	1.00	0.729	0.271
5	99.77	400.0	1.00	0.697	0.303
6	39.32	400.0	1.00	0.782	0.218
7	39.77	336.3	1.00	0.729	0.271

Conclusão: O processo convergiu em 03 iterações com uma tolerância de erro de 1% e foi usado o método de Wegstein para acelerar a convergência.

5.3 PROCESSO II - MISTURADOR - REATOR - TERMOSTATO - SEPARADOR - FLASH - BOMBA - DIVISOR DE FLUXO ABSORVEDOR ISOTERMICO

O Processo II é composto por oito unidades modulares diferentes (MIT, REA, TER, SEP, FLASH, BOMBA, DIV, e ABSI). Este exemplo foi criado não só para analisar as variações da vazão, temperatura, pressão, e composição das correntes do processo, como também, para testar a operacionalidade da maioria das unidades modulares desenvolvidas.

A Figura 5.2 apresenta o fluxograma do Processo II, sendo os resultados da simulação deste processo mostrado no Quadro 5.2.



A alimentação do Processo II é feita pela corrente (1), a vazão mássica é de 100 Kg/s, com composição de 60% do componente A e 40% do componente D, temperatura de 300 K e pressão de 2 atm. A corrente (12) também é de alimentação e tem uma vazão mássica de 200 Kg/s do componente E, a uma temperatura de 400 K e uma

pressão de 2 atm. Na unidade REA (2) ocorre a reação $A \longrightarrow B + C$ com conversão de A de 80%. A unidade de aquecimento TER (3) mantém o fluxo da corrente de saída a uma temperatura de 400 K. Na unidade de separação SEP (4) a fração destilada (corrente 6) contém 80% da massa do componente B e 100% da massa do componente C em relação a corrente de entrada (5), o restante sai na corrente de fundo. No tanque FLASH (5) a temperatura é reduzida a 300 K e a pressão a 1 atm, 10% da massa do componente A e 100% da massa do componente B saem na corrente de vapor (8). No módulo BOMBA (6) a pressão é elevada para 2 atm. No divisor de fluxo DIV (7) 30% da massa é reciclada para a unidade de mistura MIT (1). Na unidade de absorção ABSI (8) 100% da massa do componente B e 10% da massa do componente C são absorvidos.

Quadro 5.2 - Relatório da simulação do Processo II

**** MATRIZ DO PROCESSO ****							
UNIDADE		MODULO		CORRENTES ASSOCADAS			
1		MIT		1	2	-3	
2		REA		3	-4		
3		TER		4	-5		
4		SEP		5	-6	-7	
5		FLASH		7	-8	-9	
6		BOMBA		9	-10		
7		DIV		10	-2	-11	
8		ABSI		6	12	-13	-14

**** MATRIZ INCIDENTE ****

UNIDADE

CORRENTE

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	1	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0
7	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0
8	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	-1	-1

UNIDADE	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	1	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0
7	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0
8	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	-1	-1

**** MATRIZ CONEXAO DAS CORRENTES ****

CORRENTE

DA UNIDADE

PARA UNIDADE

1	0	1
2	7	1
3	1	2
4	2	3
5	3	4
6	4	8
7	4	5
8	5	0
9	5	6
10	6	7
11	7	0
12	0	8
13	8	0
14	8	0

**** MATRIZ ADJACENCIA ****

DA
UNIDADEPARA
UNIDADE

	1	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1	0	1	0	0	0	0	0	0
2	1	0	0	1	0	0	0	0	0
3	1	0	0	0	1	0	0	0	0
4	1	0	0	0	0	1	0	0	1
5	1	0	0	0	0	0	1	0	0
6	1	0	0	0	0	0	0	1	0
7	1	1	0	0	0	0	0	0	0
8	1	0	0	0	0	0	0	0	0

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 1

Vazao Massica (kg/s) = 100

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 2

Numero de Componentes = 5

Nome do Componente Fracao Massica

A	.6
B	0
C	0
D	.4
E	0

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 12

Vazao Massica (kg/s) = 100

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m²) = 2

Numero de Componentes = 5

Nome do Componente	Fracao Massica
A	0
B	0
C	0
D	0
E	1

MATRIZ CIRCUITO (NOS)

* 1 * 2 * 3 * 4 * 5 * 6 * 7 *

MATRIZ CIRCUITO (CORRENTE)

* 3 * 4 * 5 * 7 * 9 * 10 * 2 *

CORRENTES DE CORTE

* 3 *

CORRENTE NUMERO = 3

Vazao Massica (kg/s) = 100

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m²) = 2

Numero de Componentes = 5

Nome do Componente	Fracao Massica
A	.6
B	0
C	0
D	.4
E	0

Introdução dos Parâmetros

**** CALCULANDO MODULO REA ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 2

A	B	C	D	E
QUAL E O NUMERO DE REAGENTES			1	
QUAL COMPONENTE VAI REAGIR	A			
PESO MOLECULAR DO REAGENTE			40	
COEFICIENTE ESTEQUIOMETRICO			1	
QUAL E A TAXA DE CONVERSAO			0.8	

**** CALCULANDO MODULO REA ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 2

A	B	C	D	E
QUAL E O NUMERO DE PRODUTOS			2	
NOME DO COMPONENTE PRODUZIDO	B			
PESO MOLECULAR DO PRODUTO			15	
COEFICIENTE ESTEQUIOMETRICO			2	

**** CALCULANDO MODULO REA ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 2

A	B	C	D	E
QUAL E O NUMERO DE PRODUTOS			2	
NOME DO COMPONENTE PRODUZIDO	C			
PESO MOLECULAR DO PRODUTO			10	
COEFICIENTE ESTEQUIOMETRICO			1	

**** CALCULANDO MODULO TER ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 3

QUAL A TEMPERATURA NA CORRENTE -5
 TEMPERATURA= 400

**** CALCULANDO MODULO SEP ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 4
 QUAL FATOR DE SEPARACAO NA CORRENTE... 6

A	0.0
B	0.8
C	1.0
D	0.0
E	0.0

**** CALCULANDO MODULO SEP ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 4
 QUAL FATOR DE SEPARACAO NA CORRENTE... 7

A	1.0
B	0.2
C	0.0
D	1.0
E	0.0

**** CALCULANDO MODULO FLASH ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 5

QUAL E A CORRENTE DE VAPOR 8
 QUAL E A TEMPERATURA NO FLASH 300
 QUAL E A PRESSAO NO FLASH 1
 QUAL E A FRACAO VAPORIZADA DO COMPONENTE
 A 0.1
 B 1.0
 C 0.0
 D 0.0
 E 0.0

**** CALCULANDO MODULO ABSI ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 8

QUAL E A CORRENTE DE ENTRADA DO GAS 6
 QUAL E A CORRENTE DE SAIDA DO GAS 13
 A B C D E
 QUANTOS COMP. VAO SER ABSORVIDOS 2
 NOME DO COMPONENTE ABSORVIDO B
 QUAL E A TAXA DE ABSORCAO 1.0
 NOME DO COMPONENTE ABSORVIDO C
 QUAL E A TAXA DE ABSORCAO 0.1

**** CALCULANDO MODULO BOMBA ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 6

QUAL A PRESSAO NA CORRENTE -10
 PRESSAO= 2

**** CALCULANDO MODULO DIV ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 7

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -2
 ALFA (-2) = 0.3

**** CALCULANDO MODULO DIV ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 7

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -11
 ALFA (-11) = 0.7

**** CALCULANDO MODULO MIT ****
 ITERACAO No 1 **** MODULO No 1

NÃO NECESSITA DE PARÂMETROS

**** SEQUENCIA DE CALCULO ****

Ordem de calculo	Unidade Numero	Unidade Modular
1	2	REA
2	3	TER
3	4	SEP
4	5	FLASH
5	8	ABSI
6	6	BOMBA
7	7	DIV
8	1	MIT

TOLERANCIA (%) NA COVERGENCIA

VAZAO	1
TEMPERATURA	1
PRESSAO	1
COMPOSICAO	1

ITERACAO No 2

CORRENTE DE CORTE 3 SENDO ANALISADA

	UA	UC	$((UA-UC)/UA)*100$
VAZAO	115.24	119.01	-3.276
TEMPERATURA	300.0	300.0	0.000
PRESSAO	2.00	2.00	0.000
A	0.549	0.533	2.904
B	0.000	0.000	0.000
C	0.000	0.000	0.000
D	0.451	0.467	-3.532
E	0.000	0.000	0.000

**** RELATORIO FINAL ****

**** PROCESSO II ****

**** ITERACAO No 3 ****

Corrente n	Vazao (Kg/s)	Temperatura (K)	Pressao (Kgf/m2)	Composicao (%)				
				A	B	C	D	E
1	100.00	300.0	2.00	0.600	0.000	0.000	0.400	0.000
2	20.53	300.0	2.00	0.166	0.000	0.000	0.834	0.000
3	120.53	300.0	2.00	0.526	0.000	0.000	0.474	0.000
4	120.26	300.0	2.00	0.105	0.315	0.105	0.474	0.000
5	120.26	400.0	2.00	0.105	0.315	0.105	0.474	0.000
6	42.98	400.0	2.00	0.000	0.706	0.294	0.000	0.000
7	77.27	400.0	2.00	0.164	0.098	0.000	0.738	0.000
8	8.85	300.0	1.00	0.143	0.857	0.000	0.000	0.000
9	68.42	300.0	1.00	0.166	0.000	0.000	0.834	0.000
10	68.42	300.0	2.00	0.166	0.000	0.000	0.834	0.000
11	47.90	300.0	2.00	0.166	0.000	0.000	0.834	0.000
12	100.00	300.0	2.00	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000
13	11.38	400.0	2.00	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000
14	131.61	300.0	2.00	0.000	0.231	0.010	0.000	0.760

Conclusão: O processo convergiu em 03 iterações com uma tolerância de erro de 1% e foi usado o método de Wegstein para acelerar a convergência.

5.4 PROCESSO III - PLANTA PARA A DESTILAÇÃO DE ÁLCOOL

Uma planta para produzir álcool comercial por um processo de destilação é mostrada na Figura 5.3.a (15). O processo contém duas colunas de destilação, ambas com taxa de refluxo de 3 para 1. A alimentação é de 10.000 Kg/h, com composição de 80% de Água, 10% de álcool, e 10% de material orgânico. A fração destilada da primeira coluna contém 60% de álcool, na segunda coluna a fração destilada contém 95% de álcool. Na corrente de fundo da primeira coluna sai 80% do material orgânico que entra na corrente de alimentação, o restante do material orgânico é retirado na corrente de fundo da segunda coluna. As correntes de saída de fundo das colunas não contém álcool.

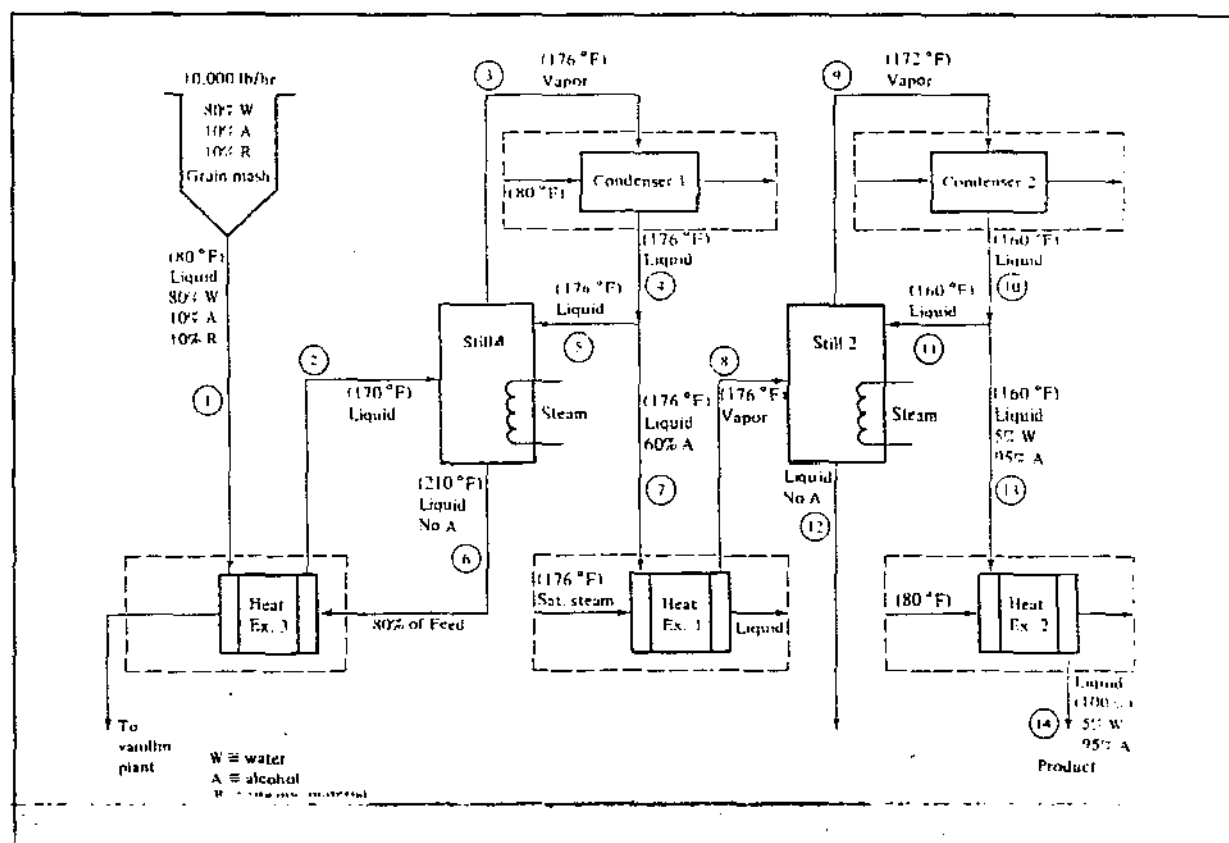
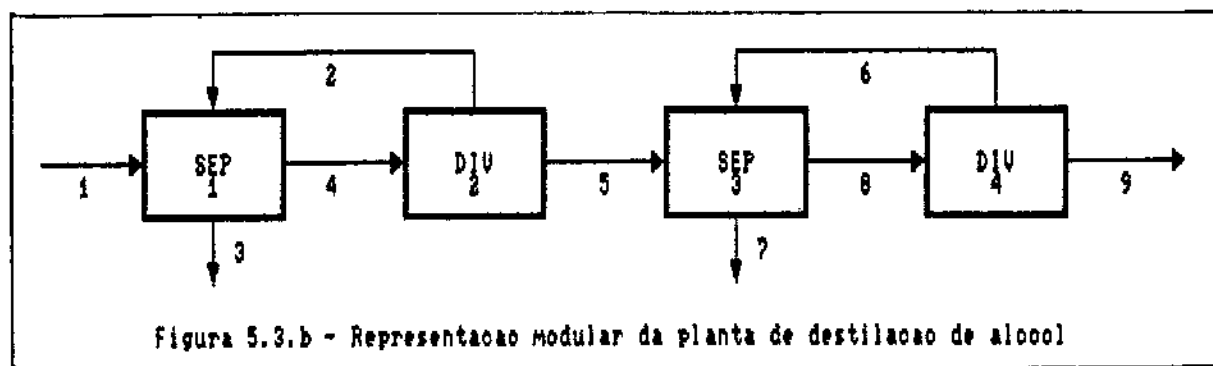


Figura 5.3.a - Planta para a produção de álcool (15).

Para efeito do cálculo do balanço de massa global, podemos adaptar o diagrama de fluxo mostrado na Figura 5.3.a em um diagrama de estrutura modular. A Figura 5.3.b mostra o diagrama modular

referente a Planta mostrada na Figura 5.3.a, onde os equipamentos do processo são representados por unidades modulares compatíveis com as unidades modulares existentes no programa.



Quadro 5.3 - Relatório da simulação do Processo III

**** MATRIZ DO PROCESSO ****						
UNIDADE		MODULO	CORRENTES ASSOCIADAS			
1		SEP		1	2	-3 -4
2		DIV		4	-2	-5
3		SEP		5	6	-7 -8
4		DIV		8	-6	-9

**** MATRIZ INCIDENTE ****										
UNIDADE	CORRENTE									
	1	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1		1	1	-1	-1	0	0	0	0	0
2		0	-1	0	1	-1	0	0	0	0
3		0	0	0	0	1	1	-1	-1	0
4		0	0	0	0	0	-1	0	1	-1

**** MATRIZ CONEXAO DAS CORRENTES ****

CORRENTE	DA UNIDADE	PARA UNIDADE
1	0	1
2	2	1
3	1	0
4	1	2
5	2	3
6	4	3
7	3	0
8	3	4
9	4	0

**** MATRIZ ADJACENCIA ****

DA UNIDADE	PARA UNIDADE				
	1	1	2	3	4
1	1	0	1	0	0
2	1	1	0	1	0
3	1	0	0	0	1
4	1	0	0	1	0

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 1

Vazao Massica (kg/s) = 10

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 3

Nome do Componente Fracao Massica

AGUA .8

ALCOOL .1

ORGANICO .1

MATRIZ CIRCUITO (NOS)

```

* 1 * 2 *
* 3 * 4 *

```

MATRIZ CIRCUITO (CORRENTE)

```

* 4 * 2 *
* 8 * 6 *

```

CORRENTES DE CORTE

```

* 4 * 8 *

```

CORRENTE NUMERO = 4

Vazao Massica (kg/s) = 5

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 3

Nome do Componente	Fracao Massica
--------------------	----------------

AGUA	.1
------	----

ALCOOL	.7
--------	----

ORGANICO	.2
----------	----

CORRENTE NUMERO = 8

Vazao Massica (kg/s) = 5

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 3

Nome do Componente	Fracao Massica
--------------------	----------------

AGUA	.2
------	----

ALCOOL	.8
--------	----

ORGANICO	0
----------	---

**** SEQUENCIA DE CALCULO ****

Ordem de calculo	Unidade Numero	Unidade Modular
1	2	DIV
2	4	DIV
3	1	SEP
4	3	SEP

TOLERANCIA (%) NA COVERGENCIA

VAZAO	1
TEMPERATURA	1
PRESSAO	1
COMPOSICAO	1

ITERACAO No 2

CORRENTE DE CORTE 4 SENDO ANALISADA

	VA	VC	$((VA-VC)/VA)*100$
VAZAO	6.17	6.40	-3.613
TEMPERATURA	300.0	300.0	0.000
PRESSAO	1.00	1.00	0.000
AGUA	0.271	0.289	-6.668
ALCOOL	0.587	0.581	0.991
ORGANICO	0.142	0.129	8.658

ITERACAO No 2

CORRENTE DE CORTE 8 SENDO ANALISADA

	VA	VC	$((VA-VC)/VA)*100$
VAZAO	4.17	4.03	3.398
TEMPERATURA	300.0	300.0	0.000
PRESSAO	1.00	1.00	0.000
AGUA	0.071	0.054	24.063
ALCOOL	0.929	0.946	-1.847
ORGANICO	0.000	0.000	0.000

ITERACAO No 3

CORRENTE DE CORTE 4 SENDO ANALISADA

	VA	VC	$((VA-VC)/VA)*100$
VAZAO	6.40	6.48	-1.237
TEMPERATURA	300.0	300.0	0.000
PRESSAO	1.00	1.00	0.000
AGUA	0.289	0.290	-0.188
ALCOOL	0.581	0.585	-0.645
ORGANICO	0.129	0.125	3.319

ITERACAO No 3

CORRENTE DE CORTE 8 SENDO ANALISADA

	VA	VC	$((VA-VC)/VA)*100$
VAZAO	4.03	4.00	0.711
TEMPERATURA	300.0	300.0	-0.000
PRESSAO	1.00	1.00	0.000
AGUA	0.054	0.053	1.698
ALCOOL	0.946	0.947	-0.097
ORGANICO	0.000	0.000	0.000

ITERACAO No 4

CORRENTE DE CORTE 4 SENDO ANALISADA

	VA	VC	$((VA-VC)/VA)*100$
VAZAO	6.48	6.53	-0.774
TEMPERATURA	300.0	300.0	0.000
PRESSAO	1.00	1.00	0.000
AGUA	0.290	0.288	0.558
ALCOOL	0.585	0.589	-0.613
ORGANICO	0.125	0.123	1.575

**** RELATORIO FINAL ****

**** PLANTA PARA A DESTILACAO DE ALCOOL ****

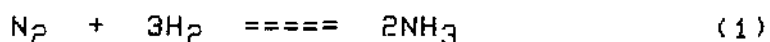
**** ITERACAO No 5 ****

Corrente n	Vazao (Kg/s)	Temperatura (K)	Pressao (Kgf/m ²)	Composicao (%)		
				AGUA	ALCOOL	ORGANICO
1	10.00	300.0	1.00	0.800	0.100	0.100
2	4.90	300.0	1.00	0.288	0.589	0.123
3	8.33	300.0	1.00	0.904	0.000	0.096
4	6.57	300.0	1.00	0.287	0.591	0.122
5	1.63	300.0	1.00	0.288	0.589	0.123
6	3.00	300.0	1.00	0.053	0.947	0.000
7	0.62	300.0	1.00	0.674	0.000	0.326
8	4.02	300.0	1.00	0.053	0.947	0.000
9	1.00	300.0	1.00	0.053	0.947	0.000

Conclusão: O sistema convergiu em 05 iterações com critérios de tolerância para o erro de 1%. Neste exemplo foi usado o método da substituição sucessiva, pois o método de Wegstein acelerava a convergência de algumas variáveis, e ao mesmo tempo contribuía de forma favorável para o aumento da divergência das demais variáveis. Neste caso o método de Wegstein não se mostrou conveniente.

5.4 PROCESSO IV - PLANTA PARA A PRODUÇÃO DE ÁCIDO NÍTRICO

A Figura 5.4.a mostra o diagrama de fluxo para uma planta de ácido nítrico conforme Reklaites(16). Primeiro ocorre a produção de amônia:



onde a conversão da reação é de 25% em relação ao componente H_2 .

As duas reações seguintes ocorrem no queimador, onde o NH_3 será totalmente consumido:



A conversão de cada reação no queimador é a seguinte: a reação (2) converte 87% do NH_3 , na reação (3) o restante do NH_3 é consumido. Cinco por cento da corrente gasosa é purgada no divisor de fluxo e 93% do nitrogênio é removido no separador.

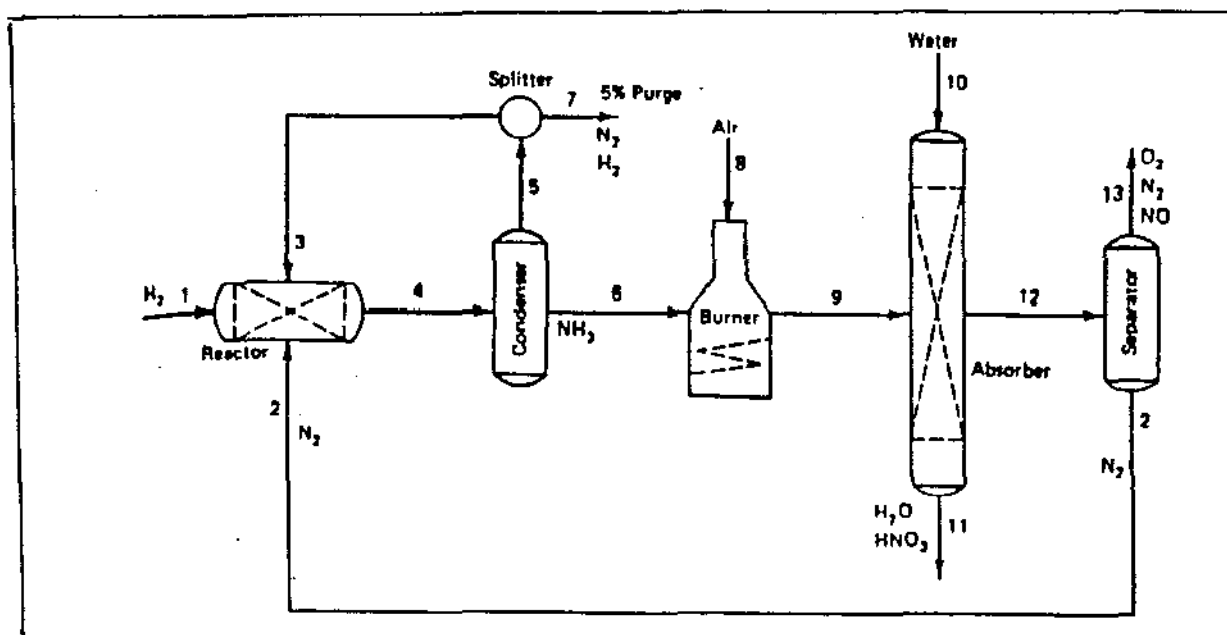


Figura 5.4.a - Diagrama de fluxo para a planta de ácido nítrico (16).

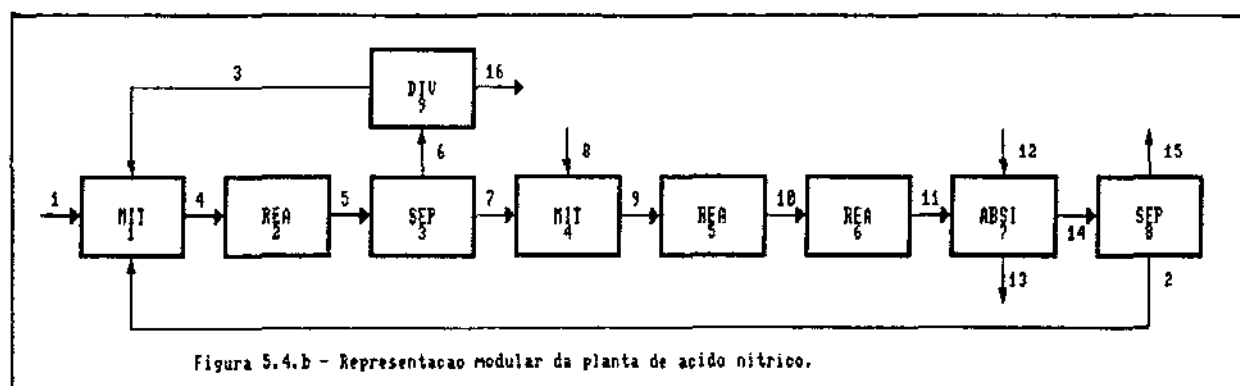
Para que se possa executar a simulação da planta de ácido nítrico, algumas adaptações serão necessárias. Primeiro deve se fazer a transformação do diagrama de fluxo em um diagrama de es-

estrutura modular, depois adaptar os módulos do diagrama de forma que eles fiquem compatíveis com as unidades modulares desenvolvidas no programa.

O reator mostrado na Figura 5.4.a, apresenta 3 correntes de entrada. A unidade modular REA foi desenvolvida apenas com uma entrada e uma saída. Neste caso, o reator para ser representado no diagrama de módulos, necessita de duas unidades modulares; primeiro a unidade modular MIT onde se processa a mistura das três correntes, e depois a unidade modular REA onde se processa a reação.

No queimador ocorre a mistura com o ar e duas reações simultâneas. Para representar o queimador são necessárias três unidades: a unidade modular MIT onde será feita a mistura, e duas unidades modulares REA, sendo cada uma delas responsável por uma das reações.

A Figura 5.4.b mostra a representação modular do diagrama de fluxo mostrado na Figura 5.4.a.



A entrada do H_2 no processo é feito pela corrente (1) a uma vazão de 0.44 Kg/s, temperatura de 300 K e pressão de 1 atm. Na unidade modular REA (2) ocorre a reação (1) e 25% do H_2 é consumido. Na unidade modular SEP (3), o NH_3 oriundo da unidade REA (2) é separado dos componentes gasosos N_2 e H_2 . Na unidade de mistura MIT (4) ocorre a mistura do NH_3 com o ar que entra pela corrente (8), a uma vazão de 49.03 kg/s. Na unidade modular REA

(5) ocorre a reação (2) e na unidade modular REA (6) a reação (3). Na unidade ABSI (7) o H_2SO_4 produzido na unidade REA (6) é absorvido pela corrente de água (12), a corrente (12) tem vazão de 1.98 Kg/s, temperatura de 300 K e pressão de 1 atm; a fração gasosa sai na corrente (14). Na unidade de separação SEP (8) 7% de N_2 é reciclado para unidade de mistura MIT (1), o restante do N_2 com os demais componentes saem na corrente de topo (corrente 15). No divisor de fluxo DIV (9) é feita a purga de 5% da corrente gasosa.

Quadro 5.4 - Relatório da simulação do Processo IV

**** MATRIZ DO PROCESSO ****							
UNIDADE		MODULO		CORRENTES ASSOCADAS			
1		MIT		1	2	3	-4
2		REA		4	-5		
3		SEP		5	-6	-7	
4		MIT		7	8	-9	
5		REA		9	-10		
6		REA		10	-11		
7		ABSI		11	12	-13	-14
8		SEP		14	-2	-15	
9		DIV		6	-3	-16	

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 1

Vazao Massica (kg/s) = .44

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 7

Nome do Componente	Fracao Massica
N2	0
H2	1
NH3	0
O2	0
HNO3	0
H2O	0
NO	0

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 8

Vazao Massica (kg/s) = 49.03

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 7

Nome do Componente	Fracao Massica
--------------------	----------------

N2	.77
H2	0
NH3	0
O2	.23
HNO3	0
H2O	0
NO	0

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 12

Vazao Massica (kg/s) = 1.98

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 7

Nome do Componente	Fracao Massica
--------------------	----------------

N2	0
H2	0
NH3	0
O2	0
HNO3	0
H2O	1
NO	0

MATRIZ CIRCUITO (NDS)

```

* 1 * 2 * 3 * 4 * 5 * 6 * 7 * 8 *
* 1 * 2 * 3 * 9 *

```

MATRIZ CIRCUITO (CORRENTE)

```

* 4 * 5 * 7 * 9 * 10 * 11 * 14 * 2 *
* 4 * 5 * 6 * 3 *

```

CORRENTES DE CORTE

```

* 4 *

```

CORRENTE NUMERO = 4

Vazao Massica (kg/s) = 16

Temperatura (K) = 300

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 7

Nome do Componente

Fracao Massica

N2	.9
H2	.1
NH3	0
O2	0
HNO3	0
H2O	0
NO	0

**** SEQUENCIA DE CALCULO ****

Ordem de calculo	Unidade Numero	Unidade Modular
1	2	REA
2	3	SEP
3	4	MIT
4	9	DIV
5	5	REA
6	6	REA
7	7	ABSI
8	8	SEP
9	1	MIT

**** RELATORIO FINAL ****

**** PLANTA DE ACIDO NITRICO ****

**** ITERACAO No 9 ****

Corrente	Vazao	Temperatura	Pressao	Composicao (X)						
n	(Kg/s)	(K)	(Kgf/cm2)	N2	H2	NH3	O2	HNO3	H2O	NO
1	0.44	300.0	1.00	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	2.64	300.0	1.00	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
3	14.34	300.0	1.00	0.9237	0.0763	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
4	17.42	300.0	1.00	0.9120	0.0880	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5	17.27	300.0	1.00	0.8074	0.0667	0.1260	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
6	15.09	300.0	1.00	0.9237	0.0763	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
7	2.17	300.0	1.00	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
8	49.03	300.0	1.00	0.7700	0.0000	0.0000	0.2300	0.0000	0.0000	0.0000
9	51.20	300.0	1.00	0.7373	0.0000	0.0425	0.2202	0.0000	0.0000	0.0000
10	51.20	300.0	1.00	0.7373	0.0000	0.0055	0.0811	0.1369	0.0391	0.0000
11	51.20	300.0	1.00	0.7373	0.0000	0.0000	0.0681	0.1369	0.0479	0.0097
12	1.98	300.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000
13	11.44	300.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.6127	0.3873	0.0000
14	41.74	300.0	1.00	0.9045	0.0000	0.0000	0.0836	0.0000	0.0000	0.0120
15	39.10	300.0	1.00	0.8980	0.0000	0.0000	0.0892	0.0000	0.0000	0.0128
16	0.75	300.0	1.00	0.9237	0.0763	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Conclusão: O sistema convergiu em 09 iterações com critérios de tolerância para o erro de 1%. Neste exemplo foi usado o método da substituição sucessiva, pois o método de Wegstein acelerava a convergência de algumas variáveis, e ao mesmo tempo contribuía de forma favorável para o aumento da divergência das demais variáveis. Neste caso o método de Wegstein não se mostrou conveniente.

5.6 PROCESSO V - PLANTA DE ACIDO SULFÚRICO

A Figura 5.5.a mostra o diagrama de fluxo de três seções da planta de ácido sulfúrico (1).

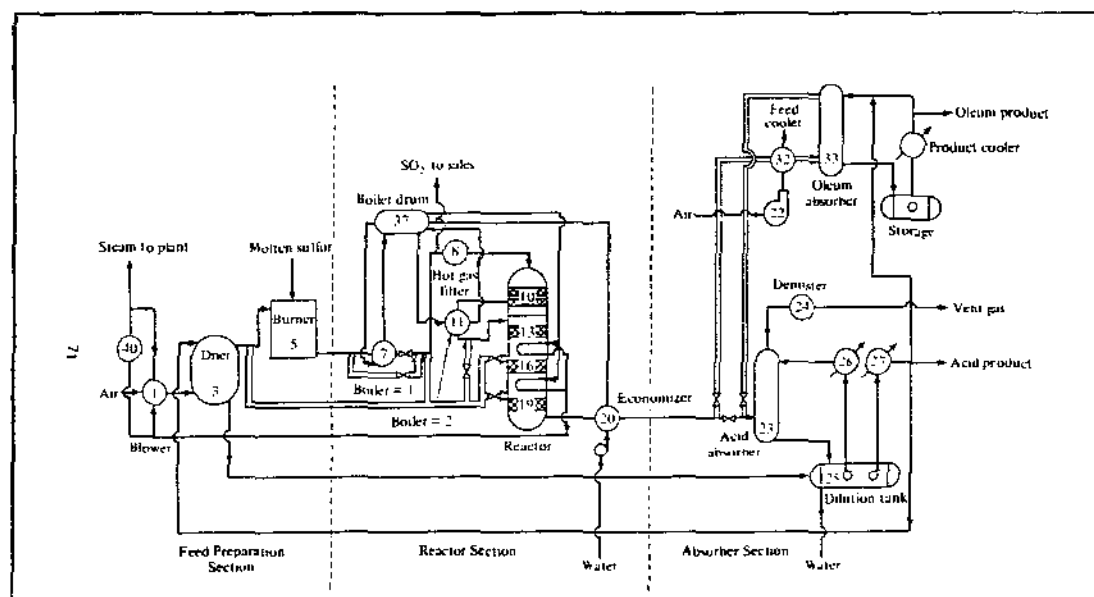
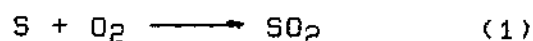


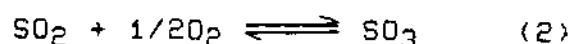
Figura 5.5.a - Diagrama de fluxo para a planta de ácido sulfúrico (1).

A seção de preparação inclui a secagem do ar e a etapa onde ocorre a queima do enxofre para a produção de SO₂:

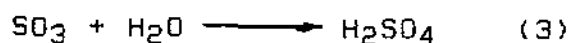


A conversão é de 100% em relação ao componente S.

Na segunda seção ocorre a reação para a formação do SO₃.



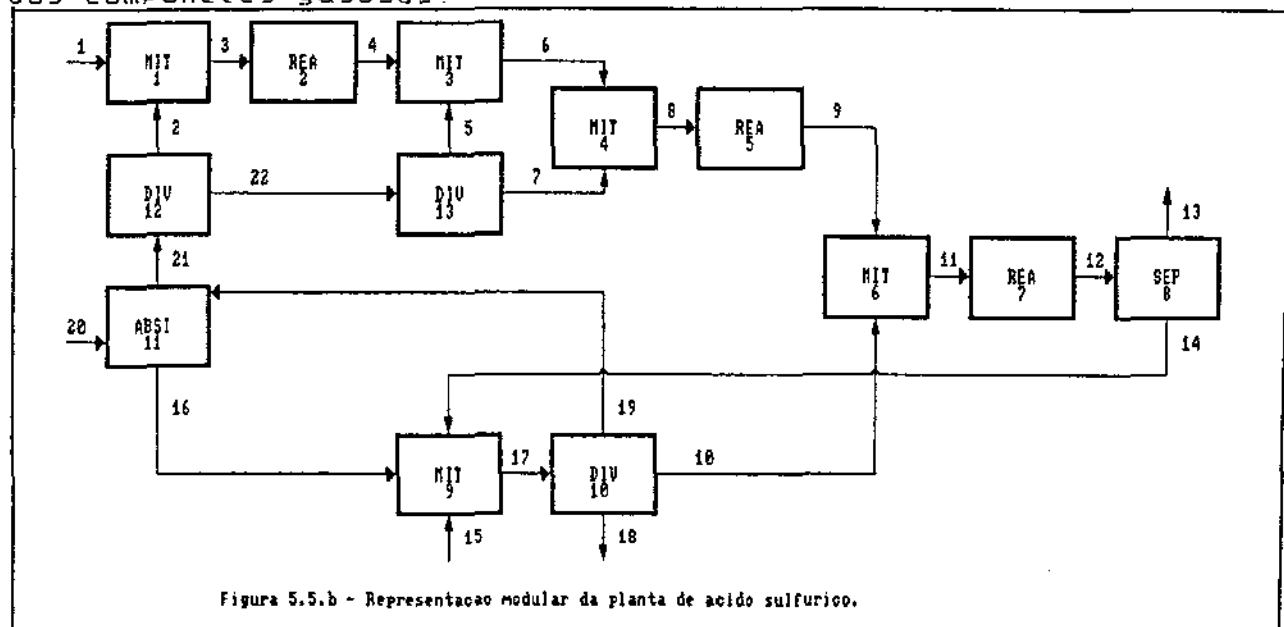
Por último na seção de absorção, há a formação do H₂SO₄.



Nas reações (2) e (3) se considera também conversão de 100%.

A transformação do diagrama de fluxo para o diagrama de estrutura modular, é feita da seguinte forma: Na secagem do ar como não existe reação, foi usado a unidade modular ABSI (absorvedor isotérmico) onde a umidade do ar é absorvida pela corrente de ácido sulfúrico. Na etapa da queima do enxofre adotou-se os mes-

mos critérios usados no exemplo anterior (Processo IV). Por último na seção de absorção, como ocorre absorção e reação química simultaneamente, para representar a coluna de absorção foram necessárias três unidades modulares: uma unidade de mistura (MIT), onde ocorre a mistura dos componentes SO_2 , N_2 e SO_3 (corrente 9) com a corrente (10) contendo H_2O e H_2SO_4 ; a unidade modular REA, onde ocorre a reação (3) para a formação do H_2SO_4 , e por último a unidade modular SEP para realizar a separação do H_2SO_4 e do H_2O dos componentes gasosos.



Na Figura 5.5.b o ar entra no processo através da corrente (20) a uma vazão de 48.10 Kg/s , temperatura de 250 K , pressão de 1 atm e uma umidade de 1% ; é seco no absorvedor isotérmico ABSI (11) saindo pela corrente (21). No divisor de fluxo DIV (12) 81% do ar vai para a unidade de mistura MIT (1) e 19% para unidade DIV (13). A unidade DIV (13) divide o fluxo de ar 42% para a unidade MIT (3) e 58% para a unidade MIT (4). Na unidade MIT (1) ocorre a mistura do enxofre que entra na corrente (1), a uma vazão de 4.45 Kg/s , temperatura de 250 K e pressão de 1 atm , com a corrente de ar (2). Na unidade REA (2) ocorre a reação (1), na unidade REA (5) a reação (2) e na unidade REA (7) a reação (3). Na unidade de separação (8) os componentes gasosos O_2 e N_2 são

separados dos componentes líquidos H_2O e H_2SO_4 . O misturador MIT (9) faz a diluição do H_2SO_4 oriundo da unidade de separação SEP (8) e da unidade de absorção ABSI (11), a vazão de água da corrente (15) é de 1.90 Kg/s, temperatura de 250 K e pressão de 1 atm, No divisor de fluxo DIV (10) 70% da massa recicla para unidade MIT (6), 28% para a unidade de secagem do ar ABSI (11) e 2% é retirado na corrente (18) como produto final.

Quadro 5.5 - Relatório da simulação do Processo V

**** MATRIZ DO PROCESSO ****				
UNIDADE	MODULO	CORRENTES ASSOCIADAS		
1	MIT	1	2	-3
2	REA	3	-4	
3	MIT	4	5	-6
4	MIT	6	7	-8
5	REA	8	-9	
6	MIT	9	10	-11
7	REA	11	-12	
8	SEP	12	-13	-14
9	MIT	14	15	16 -17
10	DIV	17	-10	-18 -19
11	ABSI	19	20	-21 -16
12	DIV	21	-2	-22
13	DIV	22	-5	-7

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 1

Vazao Massica (kg/s) = 4.45

Temperatura (K) = 250

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 7

Nome do Componente	Fracao Massica
--------------------	----------------

S	1
O2	0
N2	0
H2O	0
SO2	0
SO3	0
H2SO4	0

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 15

Vazao Massica (kg/s) = 1.9

Temperatura (K) = 250

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 7

Nome do Componente	Fracao Massica
S	0
O2	0
N2	0
H2O	1
SO2	0
SO3	0
H2SO4	0

*** CORRENTES DE ENTRADA ***

CORRENTE NUMERO = 20

Vazao Massica (kg/s) = 48.1

Temperatura (K) = 250

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 7

Nome do Componente	Fracao Massica
S	0
O2	.23
N2	.76
H2O	.01
SO2	0
SO3	0
H2SO4	0

CORRENTES DE CORTE

* 17 *

CORRENTE NUMERO = 17

Vazao Massica (kg/s) = 610

Temperatura (K) = 250

Pressao (Kgf/m2) = 1

Numero de Componentes = 7

Nome do Componente	Fracao Massica
S	0
O2	0
N2	0
H2O	.05
SO2	0
SO3	0
H2SO4	.95

**** SEQUENCIA DE CALCULO ****

Ordem de calculo	Unidade Numero	Unidade Modular
1	10	DIV
2	11	ABSI
3	12	DIV
4	1	MIT
5	13	DIV
6	2	REA
7	3	MIT
8	4	MIT
9	5	REA
10	6	MIT
11	7	REA
12	8	SEP
13	9	MIT

TOLERANCIA (%) NA COVERGENCIA

VAZAO	2
TEMPERATURA	2
PRESSAO	2
COMPOSICAO	2

**** RELATORIO FINAL ****

**** PLANTA DE ACIDO SULFURICO ****

**** ITERACAO No 11 ****

Corrente	Vazao	Temperatura	Pressao	Composicao (%)						
n	(Kg/s)	(K)	(Kgf/m2)	S	O2	N2	H2O	SO2	SO3	H2SO4
1	4.45	250.0	1.00	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	38.57	250.0	1.00	0.0000	0.2323	0.7677	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
3	43.02	250.0	1.00	0.1034	0.2083	0.6883	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
4	43.02	250.0	1.00	0.0000	0.1049	0.6883	0.0000	0.2069	0.0000	0.0000
5	3.80	250.0	1.00	0.0000	0.2323	0.7677	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
6	46.02	250.0	1.00	0.0000	0.1152	0.6947	0.0000	0.1901	0.0000	0.0000
7	5.25	250.0	1.00	0.0000	0.2323	0.7677	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
8	52.07	250.0	1.00	0.0000	0.1270	0.7021	0.0000	0.1709	0.0000	0.0000
9	52.07	250.0	1.00	0.0000	0.0843	0.7021	0.0000	0.0000	0.2137	0.0000
10	427.00	250.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0340	0.0000	0.0000	0.9660
11	479.07	250.0	1.00	0.0000	0.0092	0.0763	0.0303	0.0000	0.0232	0.8610
12	479.07	250.0	1.00	0.0000	0.0092	0.0763	0.0251	0.0000	0.0000	0.8895
13	40.94	250.0	1.00	0.0000	0.1072	0.8928	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
14	438.13	250.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0274	0.0000	0.0000	0.9726
15	1.90	250.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000
16	171.28	250.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0367	0.0000	0.0000	0.9633
17	611.31	250.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0330	0.0000	0.0000	0.9670
18	12.20	250.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0340	0.0000	0.0000	0.9660
19	170.80	250.0	1.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0340	0.0000	0.0000	0.9660
20	48.10	250.0	1.00	0.0000	0.2300	0.7600	0.0100	0.0000	0.0000	0.0000
21	47.62	250.0	1.00	0.0000	0.2323	0.7677	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
22	9.05	250.0	1.00	0.0000	0.2323	0.7677	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Conclusão: O sistema convergiu em 11 iterações com critérios de tolerância para o erro de 2%. Neste exemplo foi usado o método da substituição sucessiva, pois o método de Wegstein acelerava a convergência de algumas variáveis, e ao mesmo tempo contribuía de forma favorável para o aumento da divergência das demais variáveis. Neste caso o método de Wegstein não se mostrou conveniente.

5.7 Conclusão

Nos diversos testes realizados neste capítulo, mostrou-se de forma bem clara a eficiência, a flexibilidade e a generalidade do programa proposto. Em cada exemplo simulado foram apresentados vários detalhes e características intrínsecas do programa, como também, a atuação do operador em cada uma das etapas do sistema computacional.

A fase que exige maiores cuidados é a etapa de adaptação do diagrama de fluxo para o diagrama de estrutura modular. Para que o programa possa desempenhar suas funções de forma satisfatória, é prudente que o operador conheça todo o processo. O ajuste entre o diagrama de fluxo e o diagrama modular, tem que ser compatível com as unidades modulares existentes na biblioteca de módulos do programa.

Vários relatórios foram impressos, mostrando etapa por etapa, com a finalidade de elucidar qualquer espécie de dúvida que possa persistir.

A estratégia adotada pelo sistema computacional na execução do programa, pode ser analisada através dos relatórios que fornecem: a sequência de cálculo, correntes de corte e valores iniciais estimados para cada corrente de corte. No relatório final é mostrado o número de iterações necessárias a convergência de cada processo, os valores das variáveis para cada corrente do processo, e ainda informa se o sistema computacional utilizou o método de Wegstein ou da substituição sucessiva.

Os resultados finais obtidos são idênticos aos valores existentes nas publicações.

6 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

6.1 CONCLUSÕES

O objetivo deste trabalho foi o desenvolvimento de um programa executivo de simulação, capaz de calcular o balanço de massa global de processos químicos complexos com reciclos.

O sistema computacional do programa foi desenvolvido em microcomputador compatível com o IBM-PC, de fácil aquisição e de grande disponibilidade no mercado nacional. A linguagem utilizada foi o BASIC.

A estrutura do programa é do tipo modular. Pois este tipo de estrutura permite uma ampla flexibilidade no uso do programa, podendo simular diferentes processos químicos, como também, facilita a criação e incorporação de novos módulos ao programa caso seja necessário.

O modelo "caixa-preta" permite a simplificação dos modelos matemáticos sem comprometer a precisão dos resultados.

Na fase de entrada de dados, foram criados aspectos na tela do monitor de vídeo, mostrando ao operador através de mensagens os nomes dos dados a serem fornecidos e os locais onde devem ser digitados. Também foram desenvolvidos mecanismos que verificam cada dado introduzido, caso haja erro de digitação ou inconsistência do dado, o sistema computacional emite um diagnóstico alertando ao operador sobre o erro cometido, e mostra qual a forma de proceder para corrigir.

A topologia do processo é fornecida ao programa executivo através de uma forma matricial, Matriz do Processo, a partir desta novas matrizes são formadas, Matriz de Incidência, Matriz de Adjacências e Matriz Conexão das Correntes, permitindo, juntamente com os algoritmos desenvolvidos, a determinação das correntes de entradas, identificação dos reciclos, abertura dos reciclos

para a determinação das correntes de corte e a sequência ótima de cálculo das unidades.

O programa proposto fornece ao operador a sequência automática de cálculo das unidades, esta é uma característica muito importante na análise e acompanhamento da simulação. Os programas executivos existentes no mercado não fornecem a ordem na qual as unidades estão sendo calculadas.

Ao término de cada etapa de cálculo, o sistema computacional emite uma mensagem perguntado se o operador deseja a impressão da última etapa realizada, isto permite ao operador obter relatórios das etapas que ele julgar importante para uma futura análise do processo. Os relatórios intermediários emitidos durante a execução dos módulos, também é outra forma de acompanhamento da simulação.

Vários testes foram realizados e propositadamente foram escolhidos exemplos bem variados e de características diferenciadas, priorizando os exemplos existentes na literatura e já simulados por outros programas. Em todos os testes o programa apresentou resultados idênticos aos existentes na literatura, logo pode-se afirmar que o programa atende aos objetivos para o qual ele foi proposto.

6.2 SUGESTÕES

Usando o programa proposto neste trabalho, desenvolver um novo programa baseado na malha térmica do processo, de tal forma que permita a integração energética de processos, o cálculo do balanço de massa global e o balanço energético global.

A construção de banco de dados de propriedade físicas e químicas, bem como o desenvolvimento de sub-rotinas de predição das

demais propriedades.

APÊNDICE A

Relação entre código, nome, conteúdo e tipo dos arquivos

CÓDIGO	NOME DO ARQUIVO	CONTEÚDO	TIPO
I	MODULO.SEQ	Nome das Unidade Modulares Existentes	Sequencial
II	MATPROCS.SEQ	Matriz do Processo	Sequencial
III	MATPROCS.ALE	Matriz do Processo	Aleatório
IV	MATINCID.SEQ	Matriz de Incidência	Sequencial
V	MATCONX.SEQ	Matriz Connção das Correntes	Sequencial
VI	MATADJ.SEQ	Matriz de Adjacências	Sequencial
VII	QTPNCOMP.ALE	Vazão, Temperatura, Pressão, nº Componentes	Aleatório
VIII	NOMECOMP.ALE	Nome dos Componentes	Aleatório
IX	FRAMOL.ALE	Fração Mássica	Aleatório
X	CORCORTE.SEQ	Correntes de Corte	Sequencial
XI	VICQTPNC.ALE	Valor Inicial da corrente de corte: Vazão, Temperatura, Pressão e Número de componentes	Aleatório
XII	VICCOMP.ALE	Nome dos componentes	Aleatório
XIII	VICFRAM.ALE	Fração Mássica	Aleatório
XIV	SEQCAL.SEQ	Sequência de Cálculo	Sequencial
XV	TPC-COR.SEQ		Sequencial

APÊNDICE B

Relação dos arquivos criados para armazenar os parâmetros das unidades modulares

NOME DO ARQUIVO	UNIDADE MODULAR	TIPO
SEPARA.ALE	SEP	Aleatório
ABSORI1.ALE	ABSI	Aleatório
ABSOOR2.ALE	ABSI	Aleatório
REATOR01.ALE	REA	Aleatório
REATOR02.ALE	REA	Aleatório
REATOR03.ALE	REA	Aleatório
FLASHARQ.ALE	FLASH	Aleatório
COMP.ALE	COMP	Aleatório

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. CROWE, C.M., HAMIELEC, A.E., HOFFMAN, T.W., JOHNSON, A.I., SHANNON, P.T. e WOODS, D.R. - Chemical Plant Simulation. Englewood cliffs, N.J., Prentice-Hall, 1971.
2. FOUST, A.S., WENZEL, L.A., CLUMP, C.W., MANS, L. e ANDERSON, L.B., - Princípios das Operações Unitárias. Horácio Macedo, Rio de Janeiro, Guanabara Dois S.A., 1982.
3. HUSAIN, Asghar - Chemical Process Simulation. New Delhi, Wiley Eastern, 1986.
4. ULSON DE SOUZA, A.A., Desenvolvimento de um Programa Executivo para Simulação de Processos Químicos, Tese de Mestrado, UNICAMP, 1985.
5. LAPIDUS, Leon, - Digital Computation for Chemical Engineers. McGraw-Hill.
6. TREYBAL, Robert E., - Mass Transfer Operations, Tóquio, McGraw-Hill, 1968.
7. TIERNAN, James C., An Efficient Search Algorithm to Find the Elementary Circuits of a Graph. Communications of the ACM, California, 13(12) : 722-727, 1970.
8. REKLAITS, G.V., SOOD, M.K. e WOODS, J.M. - Solution of Material Balances for Flowsheets Modelled with Elementary Modules: the Unconstrained Case, AIChE J., 25(2), 209, 1979.
9. MILANI, S.M. e FINDLEY, M.E. - Linear Process Calculations as Convergence Accelerations in flowsheet Sequenced Programs, AIChE J., 32(4), 624, 1986.

10. RUSSELL, R.A. - Chemical Process Simulation - the GMB System, Computers and Chemical Engineering, 4, 167-190, 1980.
11. MONTAGNA, J.M. e IRIBARREN, D.A. - Optimal Computation Sequence in the Simulation of Chemical Plants, Computers and Chemical Engineering, 12(1), 71-79, 1988.
12. MOTARD, R.L., WESTERBERG, A.W., HUTCHISON, H.P. e WINTER, P. - Process Flowsheeting. New York, Crown Copyright, 1979.
13. BENEDEK, P. - Steady-state Flowsheeting of Chemical Plants. Budapeste, Elsevier Scientific Publishing Company, 1980.
14. VASEK, Vladimir e KLEMES, Jiri, Simulation Programming System SIPRO-Version for DESK-Top Computer COMPUDEC 625 in BASIC language, Computers and Chemical Engineering, 2(3), 175-182, 1983.
15. RAMIREZ, W. Fred - Process Simulation. Toronto, Lexington Books.
16. REKLAITIS, G.V. - Introduction to Material and Energy Balances. New York, Wiley, 1983.

ERRATA

- Onde se lê Kgf/m^2 , deve ser lido kgf/cm^2 .
- Os autores citados no texto cujo nome não foi creditado nas referências bibliográficas, seus respectivos trabalhos foram mencionados nas referências (3) e (4).

