

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA DE CAMPINAS  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

*Este exemplar original é  
pedido Financeiramente  
por Antônio Augusto Ulson de Souza /  
aprovado pela Comissão de Pós-graduação  
em 29/08/85*

*Ulson*

DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA EXECUTIVO  
PARA SIMULAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Autor: Antônio Augusto Ulson de Souza  
Orientador: Prof. Dr. João A.F.R. Pereira

076/85

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 Quí-  
mica.

Campinas - SP - Brasil

Agosto - 1985

UNICAMP  
BIBLIOTECA CENTRAL

A meus pais e irmãos

A Sê e ao Gustinho

A proposta de um novo problema constitui-se no desafio de resolvê-lo e na proposta de um novo problema.

## AGRADECIMENTOS

Ao Professor Doutor João A.F. da Rocha Pereira, o meu sincero agradecimento pela dedicada orientação e intenso incentivo ao desenvolvimento desta pesquisa.

Aos Professores, Colegas e Funcionários do DEQ.

Ao Alfredo Ulson de Souza, pela elaboração dos desenhos das figuras.

A Odette Ropello, pelo excelente trabalho datilográfico.

Ao CNPq, pelo auxílio financeiro concedido durante o desenvolvimento deste trabalho.

INDICE

	pag.
CAPÍTULO I - Introdução . . . . .	1
CAPÍTULO II- Revisão da Literatura . . . . .	4
II.1 - Introdução . . . . .	5
II.2 - Estrutura dos programas executivos . . . . .	8
II.3 - Fases principais de um programa executivo . . . . .	10
II.3.1 - Fase de entrada de dados . . . . .	10
II.3.2 - Fase de processamento . . . . .	13
II.3.3 - Fase de saída de dados . . . . .	15
II.4 - Matrizes do Processo, de Adjacências, de Incidência e Conexão das Correntes . . . . .	16
II.4.1 - Representação matricial do fluxograma de informação . . . . .	16
II.4.1.1 - Matriz do Processo . . . . .	16
II.4.1.2 - Matriz Conexão das Correntes . . . . .	18
II.4.1.3 - Matriz de Incidência . . . . .	19
II.4.1.4 - Matriz de Adjacências . . . . .	20
II.5 - Conclusões . . . . .	21
CAPÍTULO III - Programa executivo - Estrutura principal . . . . .	22
III.1 - Introdução . . . . .	23
III.2 - Estruturação do programa principal . . . . .	25
III.3 - Entrada de dados . . . . .	26
III.4 - Matrizes de Incidência, Conexão das Correntes e de Adjacências . . . . .	29
III.5 - Identificação das correntes de entrada . . . . .	33
III.6 - Informações das correntes de entrada . . . . .	33

	pag.
III.7 - Determinação da seqüência de cálculos . . . . .	35
III.8 - Identificação dos recírclos . . . . .	36
III.9 - Determinação das correntes de corte . . . . .	39
III.10- Características das unidades modulares . . . . .	45
III.10.1 - Área em comum e setor chave . . . . .	49
III.10.2 - Admissão de parâmetros . . . . .	50
III.11- Convergência dos resultados . . . . .	54
CAPÍTULO IV - Programa executivo - Estrutura auxiliar . . . . .	57
IV.1 - Introdução . . . . .	58
IV.2 - Estruturação do programa auxiliar . . . . .	58
IV.3 - Simulação do processo . . . . .	60
IV.4 - Informações sobre o último processo simulado . . . . .	60
IV.5 - Arquivos de dados . . . . .	60
CAPÍTULO V - Desenvolvimento de unidade modulares . . . . .	75
V.1 - Introdução . . . . .	76
V.2 - Misturador adiabático - MAD . . . . .	76
V.3 - Divisor de correntes - DIV . . . . .	78
V.4 - Separador - SEP . . . . .	79
V.5 - Termostato - TER . . . . .	81
CAPÍTULO VI - Simulação de processos utilizando o programa executivo proposto . . . . .	83
VI.1 - Introdução . . . . .	84
VI.2 - Unidade para separação dos produtos da reação de pirólise termo-oxidativa do metano . . . . .	84

VI.3 - Processo I: Misturador - Divisor de Correntes . . . . .	91
VI.4 - Processo II: Misturador - Divisor - Misturador - Divisor de Correntes . . . . .	91
VI.5 - Processo III: Misturador - Separador - Divisor de Correntes . . . . .	97
VI.6 - Processo IV: Misturador - Divisor - Separador . . . . .	106
VI.7 - Processo V: Misturador - Divisor - Termostato - Separador . . . . .	117
CAPÍTULO VII - Conclusões e Sugestões . . . . .	123
VII.1 - Conclusões . . . . .	124
VII.2 - Sugestões . . . . .	125
APÊNDICE A - Relação entre código, nome, conteúdo e tipo dos arquivos pertencentes ao sistema . . . . .	127
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .	128

## RESUMO

A simulação de processos por computadores é uma das mais importantes ferramentas ao dispor do Engenheiro Químico, para projeto ou acompanhamento dos processos químicos. Embora existam na literatura referências a programas para simulação de processos, desde 1958, estes programas foram desenvolvidos fundamentalmente para computadores de grande porte e os seus custos os tornam inacessíveis a pequenos usuários.

O rápido avanço tecnológico no desenvolvimento de computadores, especialmente os microcomputadores, permitindo a sua aquisição por pequenos usuários, denota a necessidade de desenvolvimento de programas de simulação e especialmente de um programa executivo capaz de operar em microcomputadores.

No presente trabalho foi desenvolvido um programa executivo para a simulação de processos químicos, no estado estacionário, utilizando microcomputadores, sendo também descritas as diversas fases de sua operação e efetuados testes de operacionalidade.

Através da análise da matriz do processo, o programa executivo orienta a entrada de dados das correntes do processo, determina os ciclos existentes, a sequência de cálculo, o acesso de parâmetros às unidades modulares, gerenciando a execução dos cálculos até que a tolerância admitida como critério de convergência seja alcançada.

Durante a fase de processamento, o programa executivo cria vários arquivos, havendo troca de informações entre os arquivos e entre as unidades modulares, através de um sis

tema encadeado, permitindo deste modo a otimização do uso da memória da unidade central de processamento (CPU), viabilizando a utilização de microcomputadores.

São apresentados exemplos de teste que permitem avaliar o desempenho do programa proposto.

ABSTRACT

Process and plant simulation is nowadays one of the most important aspects of Chemical Engineers tasks, both in the design of new processes and in the improving of existing ones. Although references to simulation programs can be traced to the late fifteen (1958), these programs have been especially developed to be implemented in large computer systems and their costs make them impossible to the use of small companies.

The fast technical advances in computer science and the advent of microcomputer systems making them available to small companies and users denote the need for the development of simulation programs and especially executive programs ready for implementation in microcomputers.

In the present work, an executive program for the steady state simulation of chemical processes was developed to be implemented in a microcomputer UNITRON II (an Apple Computer)! A detailed study of the operational phase and testing of the executive program is presented.

The executive program, through the analysis of the process matrix, directs the data input of the process streams, plans the sequence in which calculation are to be done, identifies the existing recycles, and parameter input for the Unit Computation of modular type. The executive program supervises calculations till convergence with strict limits is attained.

During the process simulation, the executive program

creates several data files, occurring exchange of information between these files and the Unit Computation. The exchange of information is chained in such a way that it permits the optimization of RAM memory of the CPU, thus permitting the use of small microcomputers (RAM memory of 48 Kbytes).

Testing of the executive program was carried out, using "black box" type of Unit Computation, which permits to evaluate its performance.

CAPÍTULO I  
INTRODUÇÃO

## INTRODUÇÃO

A utilização da simulação de processos químicos pela indústria tem sido uma tendência que se acentua no presente, constituindo-se em um meio imprescindível para a análise e otimização de novos processos e processos já existentes.

Inúmeras referências a programas executivos, para simulação de processos químicos, no estado estacionário, têm sido feitas pela literatura internacional, demonstrando não apenas sua presença nas atuais linhas de pesquisas acadêmicas, como também o crescente interesse de sua aplicação pela indústria química.

O interesse pela indústria também tem-se verificado no Brasil, muito embora a carência de estudos e programas que visam a atender a esta área, tenha levado o país a uma dependência tecnológica do setor. Por outro lado, a maioria dos programas executivos para simulação de processos químicos, no estado estacionário, foram desenvolvidos para computadores de grande porte, cujo uso fica limitado às grandes empresas.

A década de 80 é caracterizada pelo aparecimento e desenvolvimento dos microcomputadores. Embora estes equipamentos tenham capacidade de processamento inferior aos computadores de grande porte, a sua flexibilidade, associada ao baixo custo, permite a sua aquisição e utilização por um maior número de usuários, notadamente os da pequena empresa.

Os objetivos principais da presente pesquisa são os estudos das diversas fases de operação dos programas executivos existentes na literatura, desenvolvendo a partir destes

estudos, um novo programa para simulação de processos químicos no estado estacionário, apropriado ao uso em microcomputadores. Pretende-se ainda desenvolver um conjunto de unidades modulares simplificadas, de modo a permitir a avaliação do programa proposto.

CAPÍTULO II  
REVISÃO DA LITERATURA

## II.1. INTRODUÇÃO

Nos dias atuais, a simulação de processos tem se tornado um instrumento de uso crescente para o projeto, análise, controle e otimização de processos químicos, bem como para aplicação ao ensino da Engenharia Química. Este interesse pode ser verificado pelo grande número de trabalhos de pesquisa desenvolvidos e em desenvolvimento neste campo, assim como pelo grande número de programas executivos oferecidos para uso da indústria.

O uso de computadores para a simulação de processos químicos, no estado estacionário, é citado na literatura já na década de 1950. A análise da evolução histórica dos programas de simulação foram feitas por Kehat e Shacham (1973 a, b), Flower e Whiteheart (1973 a, b), Mah (1974), citados por Motard et al. (1975) e por Evans et al. (1976).

A revisão da literatura sobre a simulação de processos químicos foi feita por Evans et al. (1976) e Motard et al. (1975).

O primeiro simulador, "Flexible Flowsheet", surgiu em 1958, citado por Motard e Shacham. Alguns dos programas executivos mais conhecidos são descritos por Motard et al. (1968) (CHESS), citado por Seader (1972), Crowe et al. (1971) (PACER), Seader et al. (1972) (PACER), Rosen et al. (1977) (FLOWTRAN), Brannock et al. (1979) (ASPEN) e por Russel (1980) (GMB). Castier e Rajagopal (1984) descrevem a primeira tentativa de desenvolvimento de um programa executivo no Brasil.

Kehat e Shacham (1973 a) 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.

Na estrutura modular, cada etapa do processo é descrita por um modelo matemático, denominado de unidade modular. As unidades modulares são conectadas através dos conjuntos de informações representativa das correntes materiais e do fluxo energético do processo, cabendo, ao programa executivo, supervisionar o fluxo de informações entre as unidades. Esta estrutura é a mais difundida entre os programas de simulação já desenvolvidos.

O fluxo de informação através do programa de simulação ocorre na mesma direção do fluxo mássico e energético do processo, muito embora, idealmente, em projeto, os dados de entrada e/ou os parâmetros de projeto sejam calculados a partir das especificações de saída, ocasionando neste caso, uma maior complexidade computacional para o desenvolvimento do programa e ocasionando problemas de instabilidade numérica.

As principais interações entre o operador e o programa executivo podem ser vistas na Tabela II.1.

No presente capítulo serão descritas as principais estruturas e fases de operação dos programas executivos para simulação de processos químicos, no estado estacionário.

Tabela II.1 - Interação entre o operador e o programa executivo

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

## II.2. ESTRUTURA DOS PROGRAMAS EXECUTIVOS

O elemento inicial do programa executivo é a subrotina de aquisição de informações, através da qual são fornecidas, ao programa executivo, as informações acerca da topologia do processo, parâmetros de projeto e operação das unidades, assim como os dados referentes às correntes de alimentação. Estas informações são verificadas por subrotinas do programa executivo, advertindo o operador quanto a erros ou inconsistência de dados.

As informações básicas do processo são então transferidas às unidades modulares, sendo estas executadas, na sequência determinada pela ordem de cálculo. Se a presença de correntes de reciclo é verificada, então, uma estimativa inicial da composição e propriedades físicas destas correntes é feita pelo programa ou operador e através de métodos iterativos são obtidos valores dentro de tolerâncias desejadas.

Durante a fase de processamento das unidades modulares, dados de propriedades físicas são necessários para os cálculos. Estes dados podem ser fornecidos através de subrotinas que contenham um conjunto de correlações que permitem a predição destas propriedades, ou ainda pela consulta a bancos de dados, quando disponíveis no sistema. Por exemplo, as propriedades críticas, massas atômicas e densidades de um conjunto de substâncias poderiam constituir-se em bancos de dados, enquanto que dados de pressão de vapor poderiam ser estimados pela equação de Antoine, através de uma subrotina.

Não obstante ao fato dos programas executivos serem

constituídos de unidades modulares para seus cálculos básicos, a sua estrutura interna pode ser classificada em estrutura fixa e estrutura variável.

Na estrutura fixa, o programa executivo é exatamente o mesmo, independente do processo a ser simulado, sendo que, nesta estrutura, a correspondência entre as correntes e as unidades modulares e os passos de cálculo são determinados pelos dados das correntes de alimentação, enquanto que, na estrutura variável, um programa executivo diferente é escrito ou gerado para cada processo a ser simulado.

Os programas de estrutura fixa apresentam uma vantagem significativa quanto ao menor tempo de processamento exigido para a simulação do processo. Entretanto, apresentam uma série de desvantagens quanto à dificuldade de implementação de novas unidades devido à complexidade da sua estrutura. Esta estrutura exige que todas as unidades modulares estejam presentes na memória do computador, mesmo numa simulação trivial.

A estrutura variável permite que somente as unidades envolvidas no cálculo do processo estejam presentes na memória do computador, resultando num uso racional da capacidade da memória disponível no computador.

Independentemente da estrutura usada, podemos distinguir três fases principais nos modernos programas de simulação: a entrada, processamento e saída de dados, as quais se não discutidas, em seus principais aspectos, na seção seguinte.

Pelo exposto, verifica-se que o projeto de um programa para simulação de processos químicos envolve fundamentalmente os conhecimentos de três áreas. As operações de gerenciamento de banco de dados, possibilitando o armazenamento, resgate e a modificação de dados por processos iterativos, bem como a utilização e otimização do uso da memória principal e auxiliares do computador, são pertencentes à área de processamento de dados. A preparação de modelos matemáticos precisos, representativos das unidades e a elaboração de correlações para a predição de propriedades físicas, requerem um elevado conhecimento dos processos ligados à Engenharia Química. A utilização de métodos matemáticos para os cálculos iterativos, assim como o desenvolvimento de algoritmos utilizados em diversas etapas do programa, exigem a aplicação do cálculo numérico.

### II.3. FASES PRINCIPAIS DE UM PROGRAMA EXECUTIVO

#### II.3.1. FASE DE ENTRADA DE DADOS

Nesta fase ocorre a principal interação entre o usuário e o programa de simulação, sendo portanto susceptível a erros de entrada de dados, cometidos pelo usuário. Muitos programas são dotados de subrotinas para verificação de inconsistência de dados, advertindo o operador, emitindo um diagnóstico do erro e, na maioria das vezes, possibilitando a correção.

Entre os dados de entrada comumente requeridos por todos os programas, estão aqueles que fornecem informações

acerca da topologia do processo, correntes de alimentação, incluindo dados de propriedades físicas, parâmetros de projeto das unidades, critérios de convergência e seqüência 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.

As informações básicas, contidas no fluxograma do processo químico Figura II.1, não se encontram numa forma apropriada para serem usadas pelo programa de simulação. Para tanto, este fluxograma é traduzido para um fluxograma de informações, Figura II.2.

No fluxograma de informações, são utilizados os nomes das unidades 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.

As informações contidas no fluxograma de informações podem ainda ser apresentadas sob uma forma matricial, denominada Matriz do Processo. Esta matriz, bem como três outras derivadas dela, Matriz de Adjacências, Matriz de Incidências e Matriz de Conexão das Correntes, são descritas na seção III.5 deste capítulo.

Quanto à estrutura de entrada de dados, os programas de simulação podem ser divididos em estrutura fixa e estrutura variável.

Os programas de estrutura fixa são aqueles que utilizam, como dado de entrada, a Matriz do Processo. Nos programas

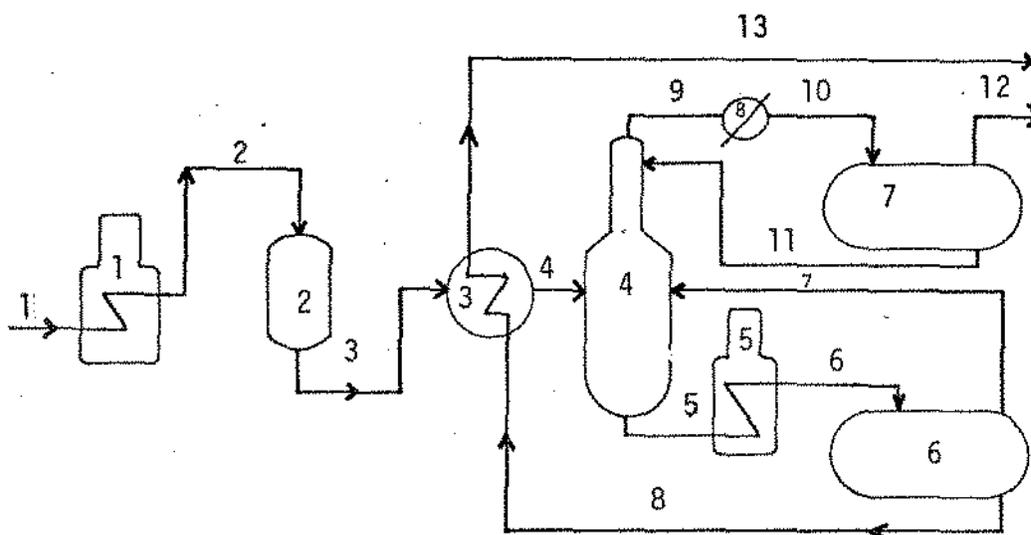


Figura II.1 - Fluxograma de um processo químico (1) e (5) fornalha, (2) reator, (3) e (8) trocador de calor, (4) coluna de destilação (6) e (7) divisor de corrente

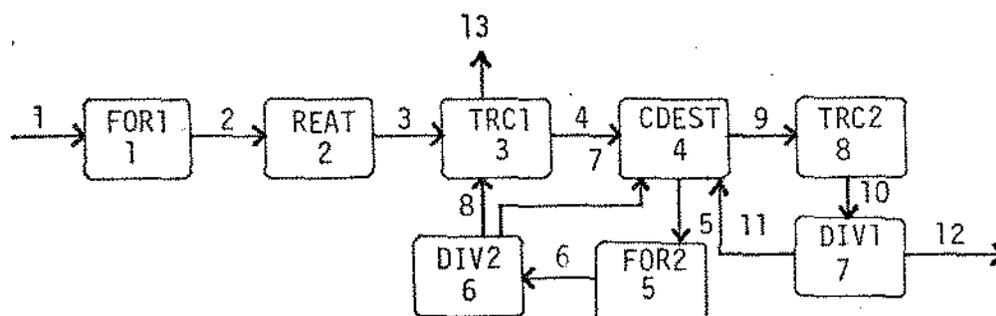


Figura II.2 - Fluxograma de informação

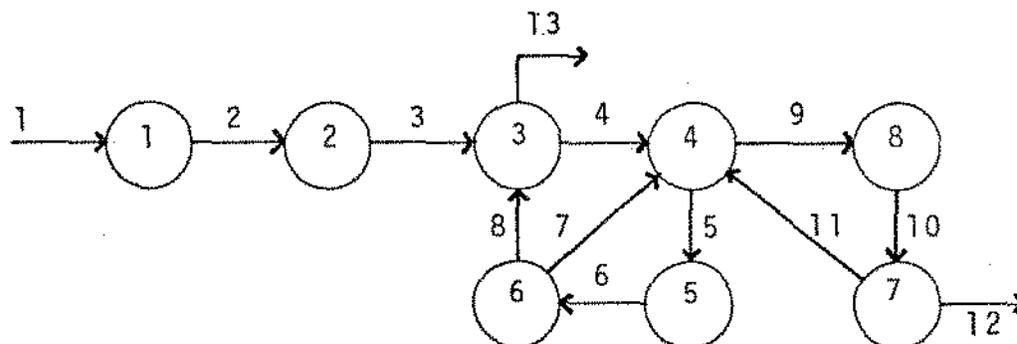


Figura II.3 - Diagrama de percursos

de estrutura variável, a topologia do processo pode ser fornecida através de sentenças do tipo: "Entrada 1 da coluna 4 e saída 2 do trocador de calor 3", sendo, nestes casos, necessário o uso de uma subrotina para a interpretação destas sentenças. A topologia do processo pode ainda ser fornecida através de vetores contendo a composição, vazão total, a temperatura da corrente, a pressão e em alguns casos a entalpia total.

Após o acesso dos dados de entrada e verificação quanto a sua consistência, estes são arquivados, normalmente sob a forma matricial. Nesta etapa, devido ao grande volume de informações gerado, é necessário a racionalização do uso da memória do CPU do computador. (O programa PACER 245 pode ser processado usando 36 Kbytes de memória). Neste sentido, os programas de simulação mais eficientes ocupam menos de 20% da capacidade da memória com os arquivos residentes, utilizando para tanto o intercâmbio de informações com memórias auxiliares e arquivos dinâmicos de dados.

### II.3.2. FASE DE PROCESSAMENTO

Serão abordados, nesta fase, os fatores que determinam a eficiência e alguns dos aspectos principais do processamento. Entre os principais fatores que determinam a eficiência da fase de processamento consideraremos os métodos utilizados para a determinação dos ciclos e o cálculo das correntes envolvidas nos mesmos.

O problema do cálculo de ciclos pode ser melhor

elucidado fazendo-se referência à Figura II.1. A composição e temperatura da corrente número 3 pode ser facilmente calculada, se todos os dados das correntes de alimentação e parâmetros de projeto e processo das unidades (1) e (2) forem conhecidos. Por outro lado, a temperatura da corrente número 4 não pode ser calculada, posto que não há informações sobre a corrente número 8. O mesmo problema ocorre com relação às correntes números 11 e 7.

O sub-sistema constituído pelas unidades números 3, 4, 5, 6, 7 e 8, as quais são conectadas pelas correntes de reciclo, é denominado de sistema de reciclo. Para o cálculo das correntes deste sistema, alguns valores destas correntes precisam ser arbitrados, obtendo-se então, através de cálculos iterativos, uma boa estimativa destes valores. As correntes que tiveram seus valores arbitrados, são denominadas de corrente de corte, sendo obtidas por meio de métodos de decomposição.

Para o propósito da decomposição das correntes de reciclos, o fluxograma de informações pode ser representado por um diagrama no qual as unidades são consideradas como nodos (vértices), enquanto que as correntes, como percursos. Figura II.3. Este tipo de representação é a representação formal utilizada na teoria dos grafos.

Já sob o ponto de vista computacional, este diagrama pode ser traduzido pela matriz de adjacências a qual será descrita na seção II.4.2.

Um grande número de artigos que propõem métodos para

minimizar os esforços necessários para a identificação dos re ciclos e determinação das correntes de corte tem sido propo-  
to nos últimos anos. Tiernan (1970) apresenta um dos mais  
eficientes algoritmos para a identificação de reciclos, en-  
quanto que uma descrição detalhada dos métodos de corte é  
realizada por Kehat e Shacham (1973 b) e Gianoto (1983), mui-  
to embora os estudos nesta área sejam ainda incipientes.

Após a abertura dos reciclos do processo pelas cor-  
rentes de corte, a seqüência de cálculos é determinada e se-  
guidamente através da execução iterativa das unidades modula-  
res, o processo é simulado. Diversas técnicas de aceleração  
da convergência são apresentadas pela literatura: Orbach e  
Crowe (1971), Shacham e Motard (1975), Kehat e Shacham (1973 c),  
permitindo uma maior eficiência computacional.

### II.3.3. FASE DE SAÍDA DE DADOS

Nos programas de simulação típicos, dois tipos de saí-  
da de resultados são possíveis: as intermediárias e os resul-  
tados finais. A forma final de apresentação dos resultados  
usualmente é fixa (Flower e Whitehead, 1973 a, b). O relatô-  
rio de apresentação dos resultados das correntes contém in-  
formações das composições, vazões, temperaturas, pressão, en-  
talpia, sendo que, em alguns casos, contém ainda informações  
da densidade e outras propriedades físicas.

Os dados referentes às correntes de alimentação, to-  
pologia do processo, parâmetros de projeto, identificação de  
reciclos, correntes de corte, seqüência de cálculos, bem como

os valores iniciais usados nos processos iterativos frequentemente são apresentados em relatórios impressos, assim como os dados referentes às tolerâncias admitidas para a convergência dos resultados, durante o cálculo das correntes de ciclos, o erro de cada iteração e os resultados intermediários gerados por cada unidade modular, facilitando desta maneira o acompanhamento da simulação, também o são.

Além dos dados referidos anteriormente, muitos programas oferecem ainda diagnósticos e mensagens de erro.

#### II.4. MATRIZES DO PROCESSO, DE ADJACÊNCIAS, DE INCIDÊNCIA E CONEXÃO DAS CORRENTES

Uma maneira bastante eficiente e compacta para o manuseio de dados é através de matrizes, sendo ainda um modo bastante apropriado ao uso de computadores e às operações de cálculos Booleanos.

As informações da topologia do processo usualmente são fornecidas aos programas de simulação através da Matriz do Processo .

##### II.4.1. REPRESENTAÇÃO MATRICIAL DO FLUXOGRAMA DE INFORMAÇÃO

###### II.4.1.1. Matriz do Processo

A Matriz do Processo Figura II.4, é uma forma numérica de informação de fluxo. A partir desta matriz, as informações do fluxo do processo podem ser totalmente reconstituídas. Cada unidade do fluxograma de informação é representada por

uma linha da Matriz do Processo, contendo as seguintes informações: número da unidade, nome da unidade computacional correspondente e as correntes de entrada e saída, sendo que as correntes de entrada são positivas e as de saída recebem o sinal negativo.

A ordem de entrada e saída das correntes é importante para se transferir as informações para a unidade computacional. Por exemplo, em um trocador de calor, a primeira corrente de entrada e saída se refere ao fluido do processo e a segunda entrada e saída ao fluido que trocará calor, enquanto que na destilação, a primeira corrente de saída se refere ao topo e a segunda à corrente de fundo.

A partir da Matriz do Processo três outras matrizes podem ser geradas: Matriz Conexão das Correntes, Matriz de Incidência e Matriz de Adjacências, as quais são descritas a seguir:

unidade número	nome da unidade molecular	correntes associadas
1	FOR 1	+1-2
2	REAT	+2-3
3	TRC 1	+3+8-4-13
4	DEST	+4+7+11-9-5
5	FOR 2	5-6
6	DIV 1	6-8
7	DIV 2	10-11-12
8	TRC 2	9-10

Figura II.4 - Matriz do Processo referente ao fluxograma de informações da Figura II.2.

#### II.4.1.2. Matriz Conexão das Correntes

A Matriz Conexão das Correntes informa qual a corrente que estabelece a conexão entre as unidades, não mencionando, entretanto, o tipo da unidade computacional, nem a ordem de entrada e saída das unidades. Esta matriz, Figura II.5, possui três colunas por linha, sendo que a primeira coluna se refere ao número da corrente em questão e, as segunda e terceira colunas se referem respectivamente ao número da unidade origem e ao número da unidade destino da corrente.

As correntes de alimentação e de saída originam-se e destinam-se, respectivamente, à unidade zero.

corrente número	da unidade número	para a unidade número
1	0	1
2	1	2
3	2	3
4	3	4
5	4	5
6	5	6
7	6	4
8	6	3
9	4	8
10	8	7
11	7	4
12	7	0

Figura II.5 - Matriz Conexão das Correntes referente ao fluxograma de informações da Figura II.2.

#### II.4.1.3. Matriz de Incidência

Um outro modo numérico de fornecer o fluxograma de informações é através da Matriz de Incidência Figura II.6. Esta matriz contém as mesmas informações que a matriz de conexão das correntes, portanto possui menos informações que a matriz do processo. Nesta matriz, a coluna mais à esquerda contém os números das unidades e as demais colunas da primeira linha contém os números das correntes envolvidas no processo em questão. No cruzamento da linha correspondente a uma dada unidade com a coluna correspondente a uma corrente associada a unidade receberá o elemento 1, se a corrente for de entrada, ou o elemento -1 se a corrente for de saída da unidade. No caso da corrente não ser nem de entrada e nem de saída da respectiva unidade, será atribuído espaço em branco ou zero.

Pela soma das colunas da matriz de incidência três conclusões podem ser tiradas, dependendo do valor obtido. A corrente faz a conexão de duas unidades se a soma das colunas for igual a zero, será uma corrente de alimentação ou de saída se a soma for igual a 1 ou -1 respectivamente.

Pode-se ainda, através desta matriz, concluir sobre a presença de correntes de reciclo sempre que o somatório da coluna for nulo e um elemento 1 ocorrer em uma linha inferior a do elemento -1.

unidade número	corrente número												
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	1	-1	0	0	0	1	0	0	0	0	-1
4	0	0	0	1	-1	0	1	0	-1	0	1	0	0
5	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	-1	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0

Figura II.6 - Matriz de Incidências referente ao fluxograma de informação da Figura II.2.

#### II.4.1.4. Matriz de Adjacências

A Matriz de Adjacências, Figura II.7, comparativamente às outras expostas, é a que possui o menor número de informações acerca do fluxograma de informações. Esta matriz é uma matriz quadrada na qual tanto a primeira linha quanto a primeira coluna contém os números das unidades envolvidas no processo. No cruzamento da linha da unidade referida pela coluna, recebe o elemento 1 e nos demais cruzamentos restantes recebe o elemento zero.

A Matriz de Adjacências é de grande utilidade para a manipulação matemática com o objetivo do reconhecimento de re ciclos (Crowe et al. 1971).

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

Figura II.7 - Matriz de Adjacências referente ao fluxograma de informações da Figura II.2.

## II.5. CONCLUSÕES

No presente capítulo, foi feita uma revisão da literatura sobre as estruturas e principais fases de um programa executivo, bem como sobre as matrizes normalmente utilizadas durante as etapas de cálculo, verificando-se que todos os programas citados utilizam computadores de grande porte e velocidade de processamento.

Considerando o grande desenvolvimento e aperfeiçoamento dos microcomputadores na década de 1980, bem como a sua acessibilidade a um grande número de usuários, fato este que também se verifica no Brasil, torna-se relevante portanto, o desenvolvimento de um programa executivo modular para a simulação de processos químicos, no estado estacionário, apropriado ao uso de microcomputadores.

CAPÍTULO III  
PROGRAMA EXECUTIVO  
ESTRUTURA PRINCIPAL

### III.1. INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de programas executivos para simulação de processos químicos no estado estacionário, usualmente tem-se efetuado em computadores de grande porte, com alta velocidade de processamento. Isto decorre basicamente devido aos programas de simulação manipularem um grande número de variáveis, ocasionando uma demanda de grande capacidade de memoria e ã utilização frequente, por estes programas, de mêtodos iterativos de cãlculos que requerem um grande tempo de processamento.

Por outro lado, a grande maioria dos programas executivos já desenvolvidos utiliza a linguagem "FORTRAN". A utilização desta linguagem, amplamente difundida no meio científico, permite que o acesso às subrotinas seja feito por meio de vetores, os quais contêm os parâmetros de entrada e saída das subrotinas, havendo uma correspondência entre os parâmetros utilizados pelo programa principal e os parâmetros utilizados pelas subrotinas. Este fato ocasiona facilidades no intercâmbio de subrotinas entre os programas existentes.

No presente trabalho, onde se propõe o desenvolvimento de um programa executivo para simulação de processos químicos no estado estacionário, apropriado ao uso em microcomputadores, alguns fatores inerentes ao equipamento devem ser considerados, tais como a limitação da capacidade de memoria (64 Kbytes para o microcomputador utilizado), a baixa velocidade de processamento e a linguagem mais apropriada ao seu uso, BASIC.

Uma maneira eficiente apresentada pela literatura para otimizar o uso da capacidade de memória, disponível pelos computadores, é através da utilização de subprogramas para cada uma das principais fases do processamento do programa executivo. A simulação do processo é então realizada pela execução encadeada dos subprogramas, onde os dados de saída de um subprograma é admitido como dados de entrada no subsequente. Deste modo somente a fração do programa efetivamente envolvida com uma dada etapa do processamento permanece residente na memória da CPU.

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

Enquanto que a linguagem "FORTRAN" é a mais utilizada nos programas executivos existentes, a linguagem "BASIC" é a mais difundida e aplicada em microcomputadores, sendo esta a escolhida para o desenvolvimento do trabalho. Esta linguagem não permite a definição de áreas reservadas da memória do microcomputador para uso em comum entre os subprogramas, muito embora isto seja possível através de instruções adicionais disponíveis em compiladores BASIC.

A utilização do programa fonte compilado, programa objeto, além de permitir o acesso a áreas reservadas da memória comum aos subprogramas, traz maior facilidade para o encadeamento das diversas fases do processamento, bem como resulta

num aumento da velocidade de processamento.

Nestas condições, a estrutura modular foi escolhida para o desenvolvimento do programa, assim como a correspondência das correntes com as unidades modulares e os passos de cálculos através do programa são determinados pelos dados de entrada, permitindo deste modo que um novo processo seja simulado fazendo-se a recombinação das unidades modulares existentes.

No desenvolvimento deste trabalho, foi utilizado um microcomputador da família Apple, com capacidade de memória de 64 Kbytes acoplado a duas unidades de disco flexível de 5 1/4 polegada, face simples, com capacidade de armazenamento de 175 Kbytes por unidade, terminal de vídeo e impressora.

Atendendo a dois enfoques básicos: a) realização das principais etapas do processamento e b) supervisão das fases que possuem interação com o operador, que poderiam interferir na implementação ou execução do programa de simulação, bem como no acesso a informações do sistema, a estrutura do programa executivo foi dividida em duas partes, principal e auxiliar, respectivamente, as quais serão abordadas nas próximas seções e capítulos.

### III.2. ESTRUTURAÇÃO DO PROGRAMA PRINCIPAL

Na estrutura principal estão envolvidas as principais fases do processamento do programa de simulação. Nesta estrutura as seguintes operações são descritas: a) entrada de dados, b) cálculo das Matrizes do Processo, Incidências, Cone

xão das Correntes e de Adjacências, c) determinação das correntes de entrada, d) determinação da seqüência de cálculos, e) identificação de recíolos, f) determinação das correntes de corte, g) acesso dos parâmetros das unidades, h) execução da seqüência de cálculos, i) testes de convergência e j) apresentação dos relatórios.

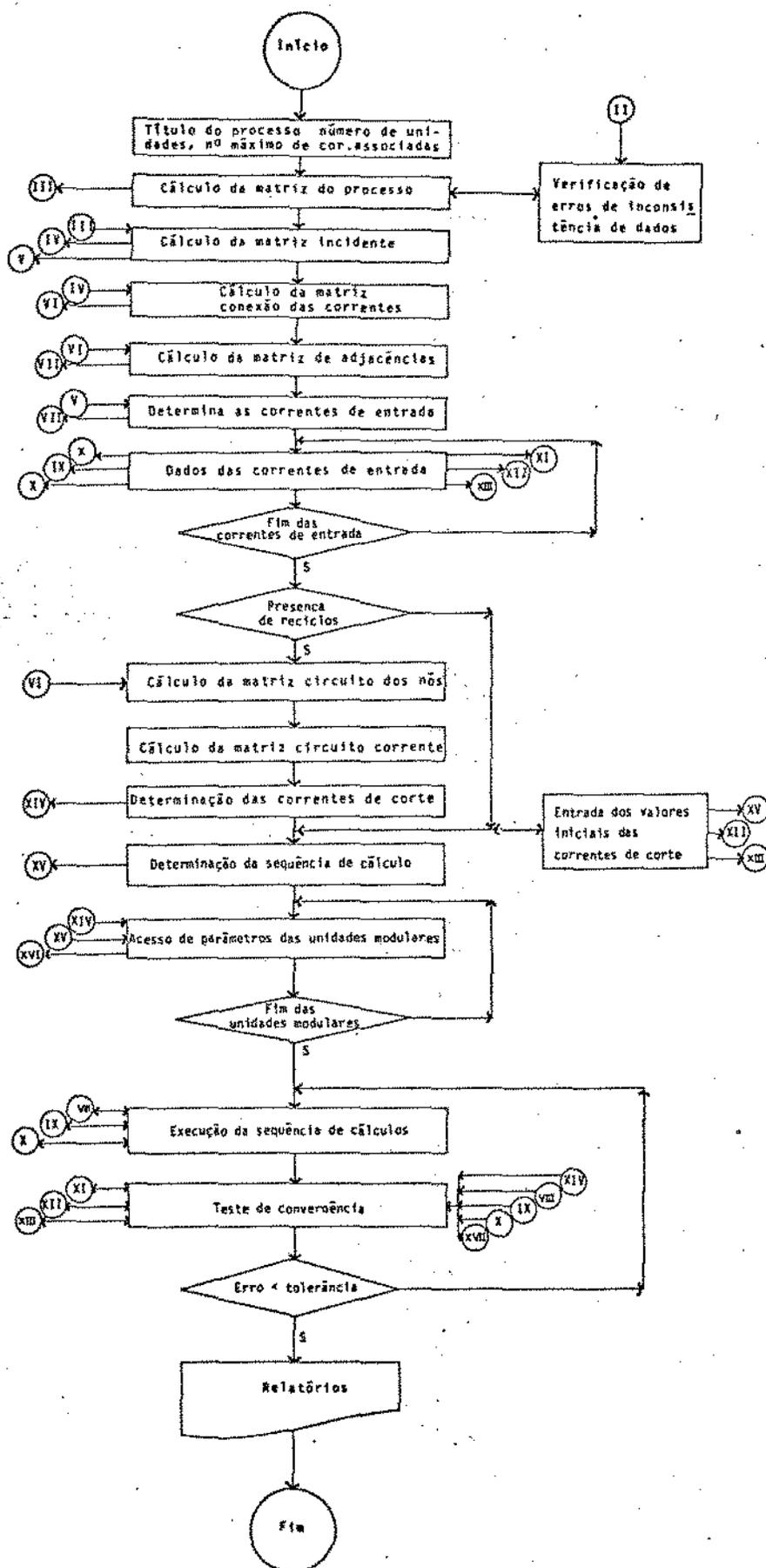
O fluxograma referente a esta estrutura é apresentado na Figura III.1, na qual os arquivos consultados e gerados são representados por algarismos romanos, sendo especificados no apêndice A. A seguir serão descritos cada uma destas operações.

### III.3. ENTRADA DE DADOS

A principal interação entre o operador e o programa executivo é realizada na fase de entrada de dados.

Para o programa executivo desenvolvido são necessários os seguintes dados de entrada: título do programa a ser simulado, número de unidades do processo, número de correntes, número máximo de correntes associadas às unidades e a Matriz do Processo..

A topologia do processo é admitida através de uma estrutura matricial dirigida (Matriz do Processo), com supervisão das subrotinas de verificação de erro de inconsistência de dados. Uma vez detectados estes erros, uma mensagem de advertência, seguida do diagnóstico do erro são apresentados ao operador, permitindo na maioria dos casos a correção imediata.



O diagnóstico de erros abrange os seguintes casos: acesso de dados alfanuméricos em campos exclusivamente numéricos, superação do campo delimitado no programa, por uma referência a unidades inexistentes, superação do número máximo especificado para a corrente ou unidade.

Para a introdução da matriz do processo, o número da unidade, o nome da unidade modular e as correntes associadas, devem ser precedidas de "return", assim como a seqüência de correntes associadas por unidade deve ser precedida de "/" (CHR\$(47)). Se ao invés do número da unidade for digitado o (.) (CHR\$(46)), ocorrerá a mudança de página, ou ainda se digitado o "//", será finalizada a entrada de dados.

Os números das unidades (N) e das correntes (M) devem ser inteiros e consecutivos no seguinte intervalo:  
 $0 < N < 20$  e  $0 < M < 50$ .

O nome da unidade modular, deve coincidir com o nome do subprograma presente no arquivo SUB-PROG. EXIST., com um número máximo de seis dígitos, podendo ser alfanuméricos, sendo o primeiro dígito necessariamente não numérico.

Uma subrotina de verificação dos dados da Matriz do Processo permite a apresentação dos dados da matriz no vídeo em páginas de dez linhas, facilitando a supervisão e correção pelo operador.

Após a introdução da Matriz do Processo e sua verificação, os dados são arquivados por linhas no arquivo MATPROCS 72.

A programação visual da fase de entrada da Matriz do

Processo pode ser vista na Figura III.2

#### MATRIZ DO PROCESSO

número da unidade	nome da unidade	correntes associadas
01	MIT	1-2 5 6
02	DIV	2-5-7
03	SEP	3-6-4

Figura III.2 Aspecto do vídeo na fase de entrada da Matriz do Processo.

#### III.4 - MATRIZES DE INCIDÊNCIA, CONEXÃO DAS CORRENTES E DE ADJACÊNCIAS

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 Incidência, Conexão das Correntes e de Adjacências. Estas matrizes constituem-se em importante ferramenta para as etapas de cálculos posteriores.

Os fluxogramas referentes à montagem das Matrizes de Incidências, Conexão das Correntes e de Adjacências estão apresentados nas Figuras III.3, III.4 e III.5 respectivamente, nas quais as seguintes variáveis são usadas:

MI(i,j), Matriz de Incidências, MP(i,j), Matriz do Processo, referentes à Figura III.3, MC(i,j), Matriz Conexão das Correntes, MP(i,j), Matriz do Processo, referentes à Figura III.4 e

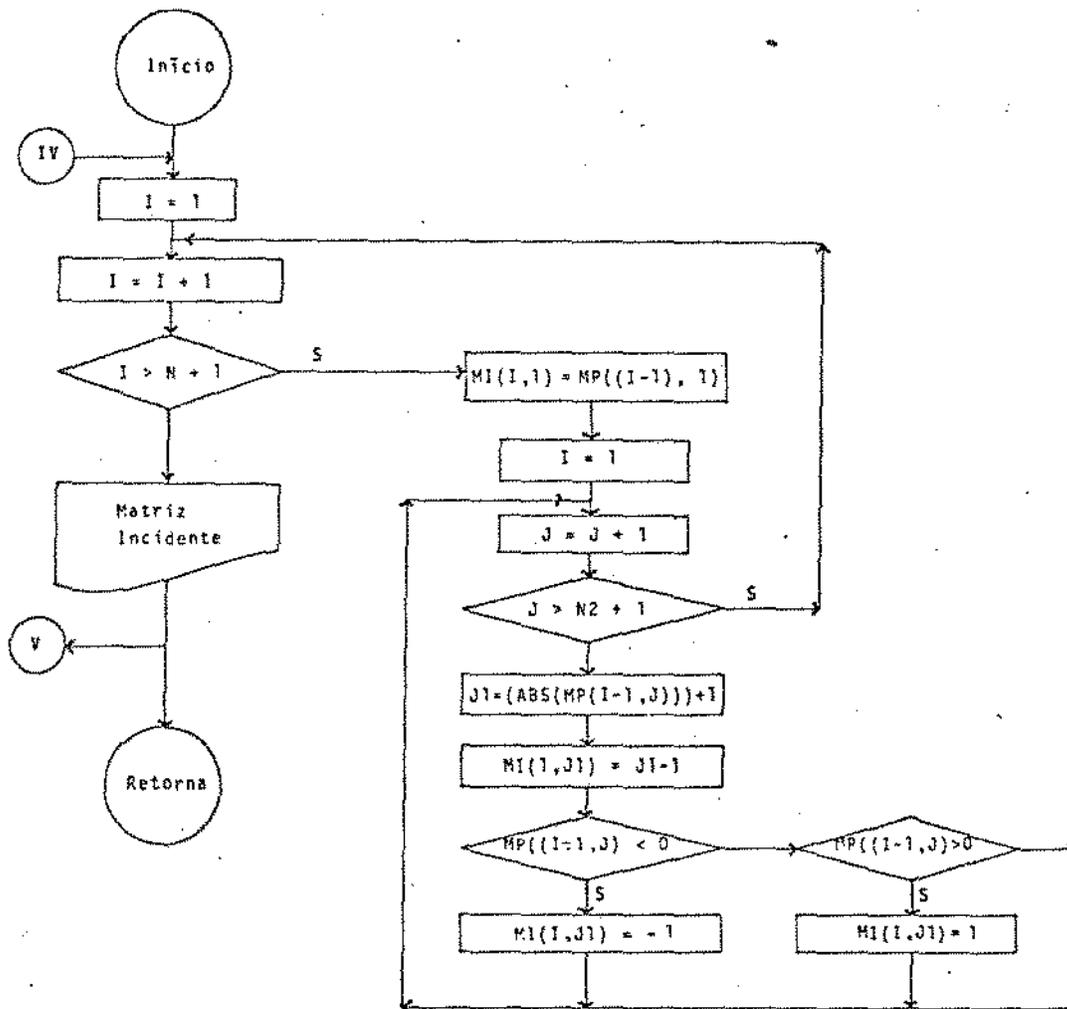


Figura III.3 - Fluxograma para o cálculo da Matriz de Incidências

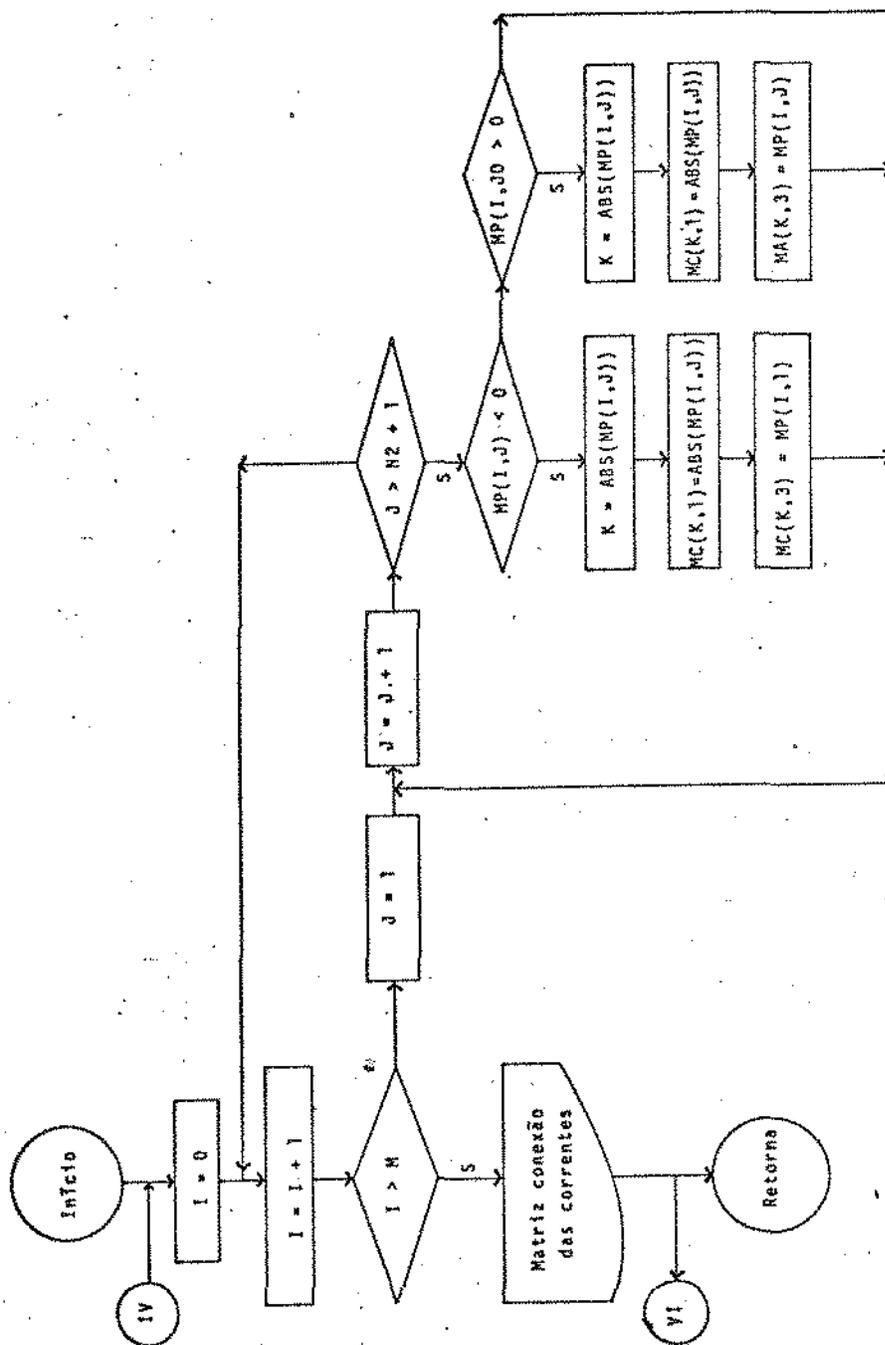


Figura III.4 - Fluxograma para o cálculo da Matriz  
Conexão das Correntes

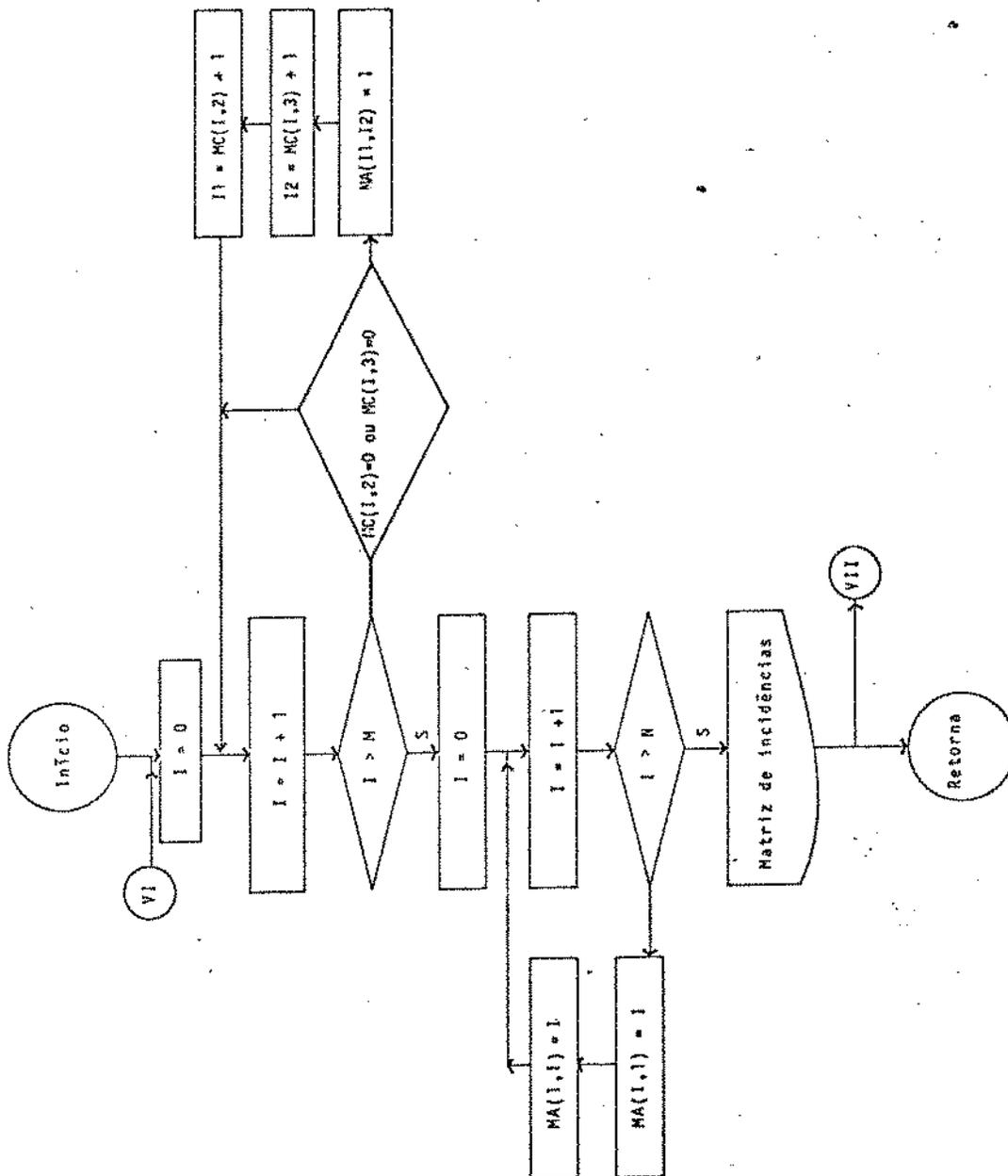


Figura III.5 - Fluxograma para o cálculo de Matriz de Adjacências

$MA(i,j)$ , Matriz de Adjacências e  $MC(i,j)$ , Matriz Conexão das Correntes, referentes à Figura III.5.

### III.5. IDENTIFICAÇÃO DAS CORRENTES DE ENTRADA

As correntes de entrada são identificadas a partir da Matriz de Incidência. Através do somatório das colunas desta matriz, três resultados são possíveis: -1, 0 e 1, correspondendo (-1) às correntes de saída do processo, (0) às correntes que estabelecem a conexão entre duas unidades modulares e (1) às correntes de entrada do processo.

O fluxograma referente à determinação das correntes de entrada pode ser visto na Figura III.6, no qual as seguintes variáveis são usadas:

$H(i,j)$ , Matriz de Incidência e  $SMI(j)$ , acumula o somatório das colunas da Matriz de Incidência.

### III.6. INFORMAÇÕES DAS CORRENTES DE ENTRADA

As informações das correntes de entrada devem ser fornecidas ao programa executivo pelo operador. Para facilitar o acesso destas informações, uma subrotina de entrada de dados foi desenvolvida, informando o operador sobre o número da corrente cujos dados devem ser acessados na seguinte ordem: número da corrente de entrada, vazão (Kg/s), temperatura (K), pressão ( $N/m^2$ ), número de componentes, nome dos componentes, concentrações (% mássica).

Após o acesso dos dados das correntes de entrada, estes são arquivados nos arquivos QTPNC#900, COMPONENTES#200 e

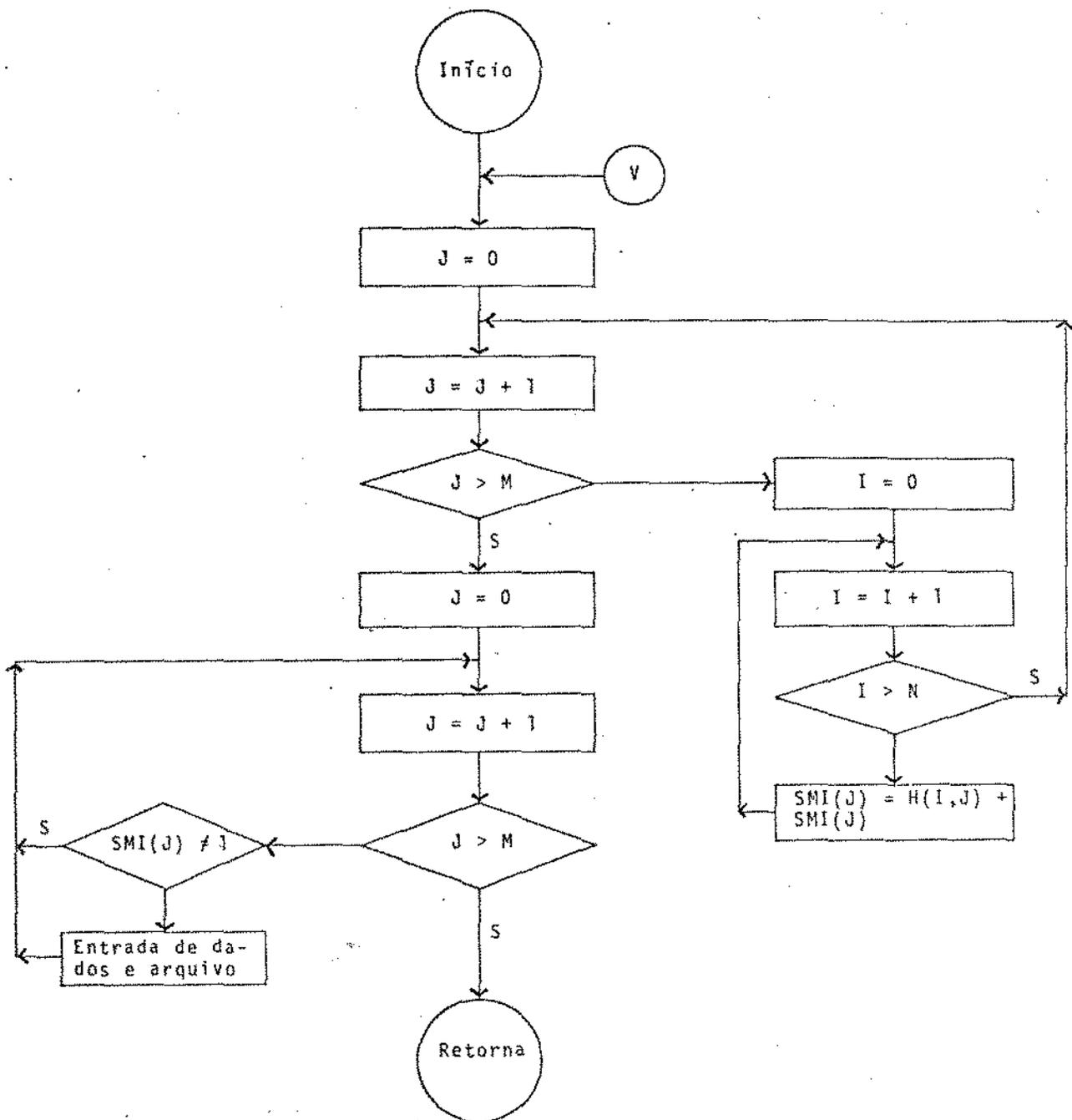


Figura III.6 - Fluxograma para determinação das Correntes de Entrada

FRAMOL#500, respectivamente.

### III.7. DETERMINAÇÃO DA SEQUÊNCIA DE CÁLCULOS

No presente trabalho, a solução individual dos módulos foi escolhido, devido à simplificação da simulação do processo.

Nos processos onde não estão envolvidos reciclos, a seqüência de cálculos é coincidente com o sentido do fluxo mássico. Nos processos onde ocorre a presença de reciclos, a seqüência de cálculos não necessariamente obedece ao sentido do fluxo mássico, como será discutido nas seções III.8 e III.9.

O algoritmo desenvolvido para a determinação da seqüência de cálculos foi elaborado de forma a também detectar a presença de reciclos, cuja identificação é apresentada na seção III.8.

A determinação da seqüência de cálculo é feita a partir da Matriz de Adjacências, pela eliminação sucessiva das linhas correspondentes ao número da coluna cujo somatório é nulo.

O processo se repete N vezes, onde N é o número de unidades do processo, sendo a primeira unidade, na seqüência de cálculo, aquela associada à primeira coluna cujo somatório é nulo e assim sucessivamente.

Após a n-ésima execução do algoritmo para a determinação da seqüência de cálculo, a Matriz de Adjacências deve resultar em uma matriz nula, caso contrário está confirmada a

presença de reciclo.

O fluxograma para a determinação da seqüência de cálculo está apresentado na Figura III.7, 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.

### III.8. IDENTIFICAÇÃO DOS RECICLOS

A identificação dos reciclos envolvidos nos processos químicos a serem simulados é realizada através do algoritmo de Tiernan (1970), o qual é apresentado pela literatura como um dos mais eficientes.

Três matrizes são utilizadas pelo algoritmo de Tiernan (Figura III.8), a matriz G, P e a H. A matriz G é obtida pelo operador  $\tau(\cdot)$  sobre cada elemento da Matriz Percurso. A matriz P contém os vértices dos percursos elementares, enquanto que a matriz H é inicialmente uma matriz 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

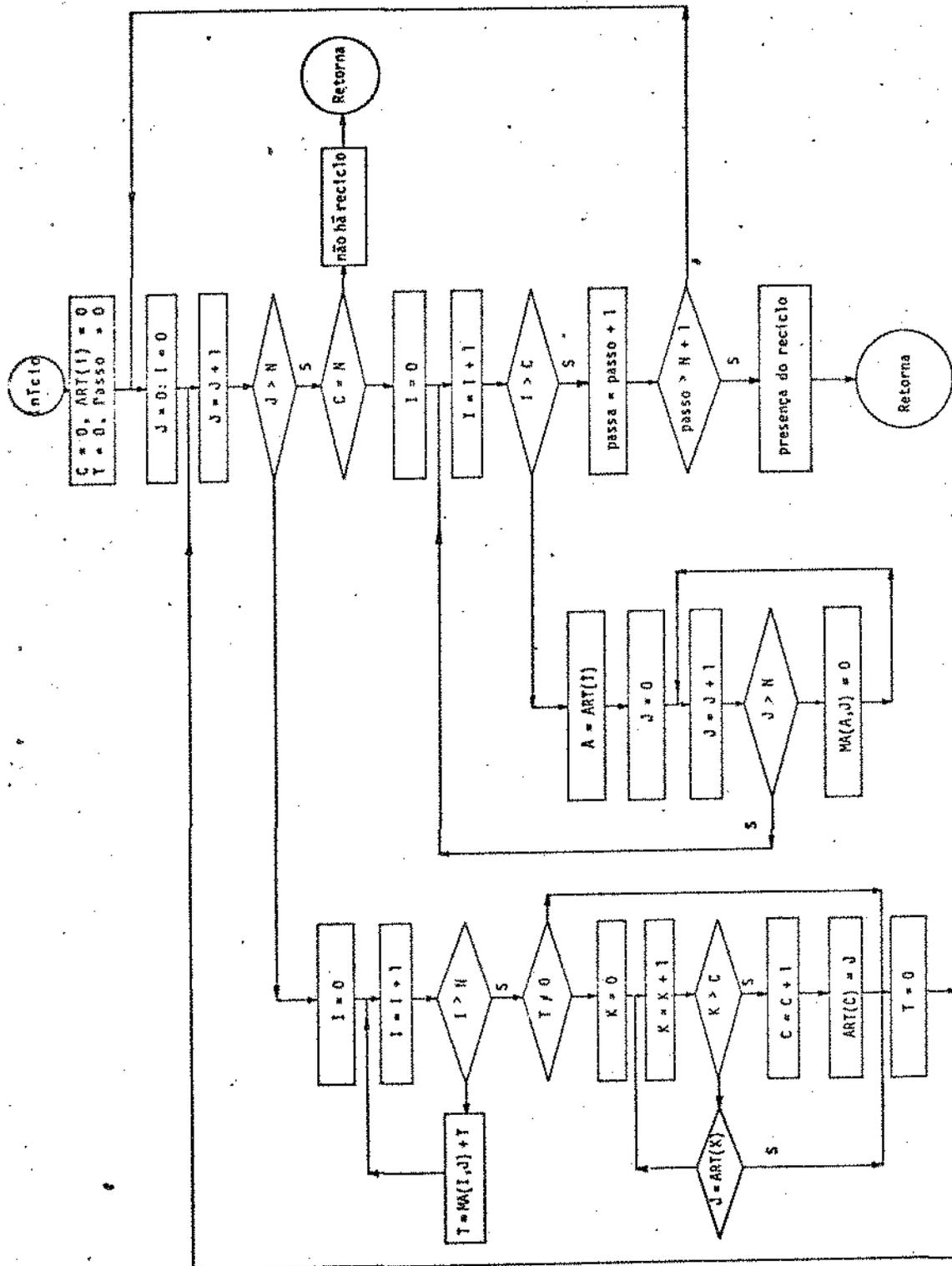


Figura III.7 - Fluxograma para determinação da sequência de cálculos

EC1: (Inicição)

1: Leitura de N e G

$P \leftarrow 0$

$H \leftarrow 0$

$K \leftarrow 1$

$P\{1\} \leftarrow 1$

EC2: (Extensão do Processo)

Pesquisa de  $G\{P(K), j\}$  para  $j=1, 2, \dots, N$  de maneira que as seguintes condições sejam satisfeitas:

(1)  $G\{P(K), j\} > P\{1\}$

(2)  $G\{P(K), j\} \notin P$

(3)  $G\{P(K), j\} \notin H\{P(K), m\}$   $m=1, 2, \dots, N$

Se  $j$  é encontrado, extensão do percurso:

$K \leftarrow K + 1$

$P\{K\} \leftarrow G\{P(K-1), j\}$

Vã para EC2

Se  $j$  não é encontrado satisfazendo as condições acima o percurso não pode ser estendido.

EC3: (Confirmação do Circuito)

Se  $P\{1\} \notin G\{P(K), j\}$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  então não foi formado um circuito, vã para EC4

Caso contrário o circuito é reportado

Escreva P.

EC4: (Incremento do Vértice)

Se  $K=1$ , então todos os circuitos contendo vértices  $P\{1\}$  foram considerados.

Vã para EC5.

Caso contrário,

$H\{P(K), m\} \leftarrow 0, m=1, 2, \dots, N$

$H\{P(K-1), m\} \leftarrow P\{K\}$

$P\{K\} \leftarrow 0$

$K \leftarrow K - 1$

Vã para EC2

EC5: (Avanço do Vértice Inicial)

Se  $P\{1\} = N$  então vã para EC6

Caso contrário,

$P\{1\} \leftarrow P\{1\} + 1$

$K \leftarrow 1$

$H \leftarrow 0$

Vã para EC2

EC6: (Término)

Figura III.8 - Algoritmo de Tiernan para identificação de recírclos

considerado somente uma vez e a condição 3 assegura que o percurso elementar não é considerado mais de uma vez.

A Figura III.9 mostra o fluxograma para o cálculo da matriz G, a partir da Matriz de Adjacências.

Através do algoritmo de Tiernan, todos os ciclos presentes no processo químico, que se pretende simular, são identificados e o registro destes ciclos é feito em uma matriz onde cada linha da matriz corresponde a um ciclo e cada coluna a uma unidade pertencente ao ciclo. Os registros são feitos sequencialmente, da esquerda para a direita, sendo que o primeiro zero na linha indica o fim dos registros. Esta matriz foi denominada de Matriz Circuito dos Nós, pois registra os ciclos através das unidades do processo.

A fim de relacionar os ciclos pelas correntes envolvidas, e não pelas unidades, o que constituirá numa conveniência para os passos seguintes, foi criada uma matriz na qual, cada linha representa um ciclo, e cada coluna uma corrente a ele pertencente. Esta matriz foi denominada Matriz Circuito Correntes, cujo fluxograma pode ser visto na Figura III.10, no qual as seguintes variáveis são usadas:  $MA(i,j)$ , Matriz de Adjacências,  $MC(i,j)$ , Matriz de Conexão das Correntes,  $G(i,j)$ , Matriz Acumuladora.

### III.9. DETERMINAÇÃO DAS CORRENTES DE CORTE

Nos processos onde não estão envolvidos ciclos, a seqüência de cálculos das unidades modulares é efetuada no mesmo sentido do fluxo mássico do processo. No caso da pre-

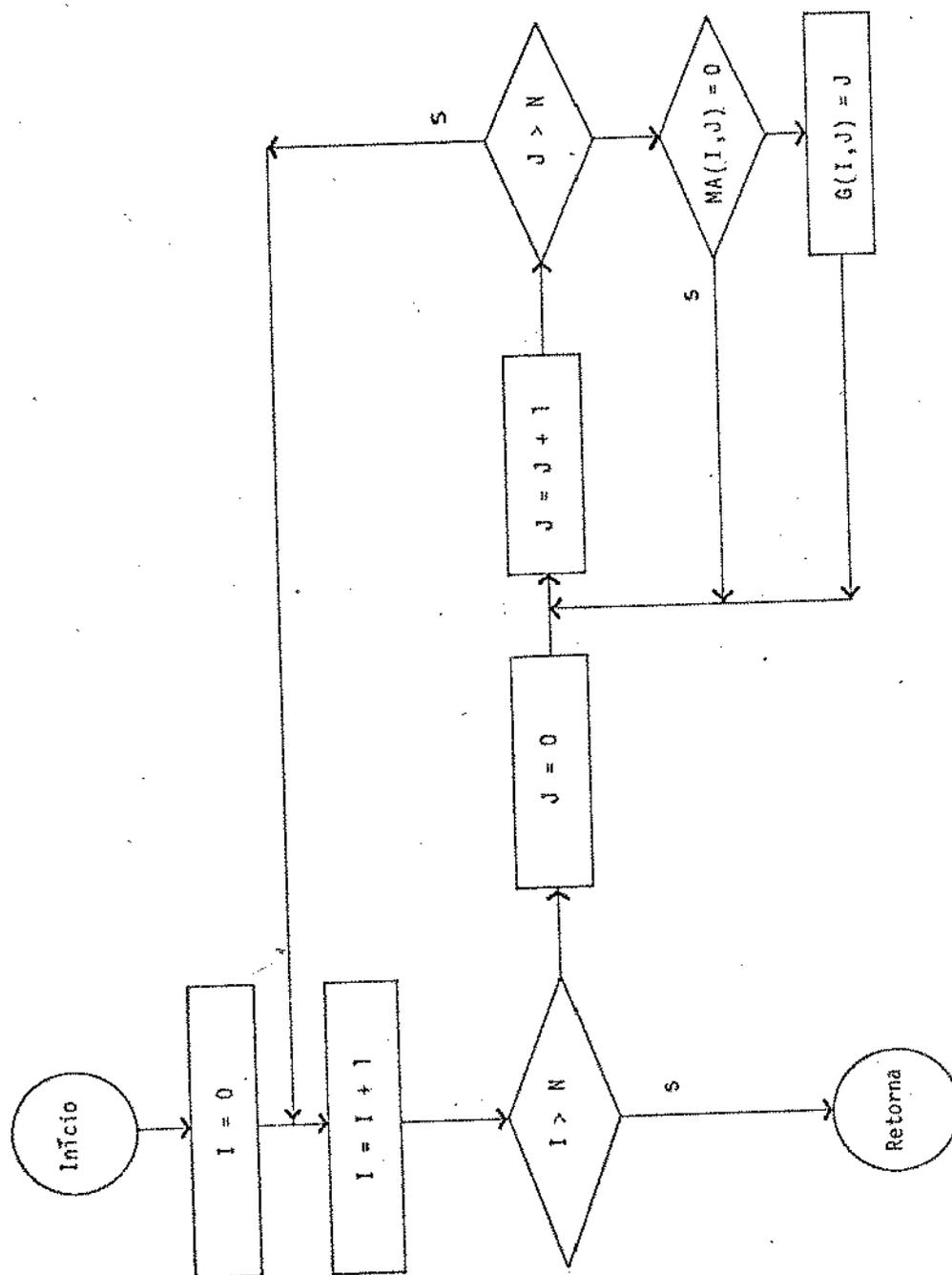


Figura III.9 - Fluxograma para o cálculo da Matriz G

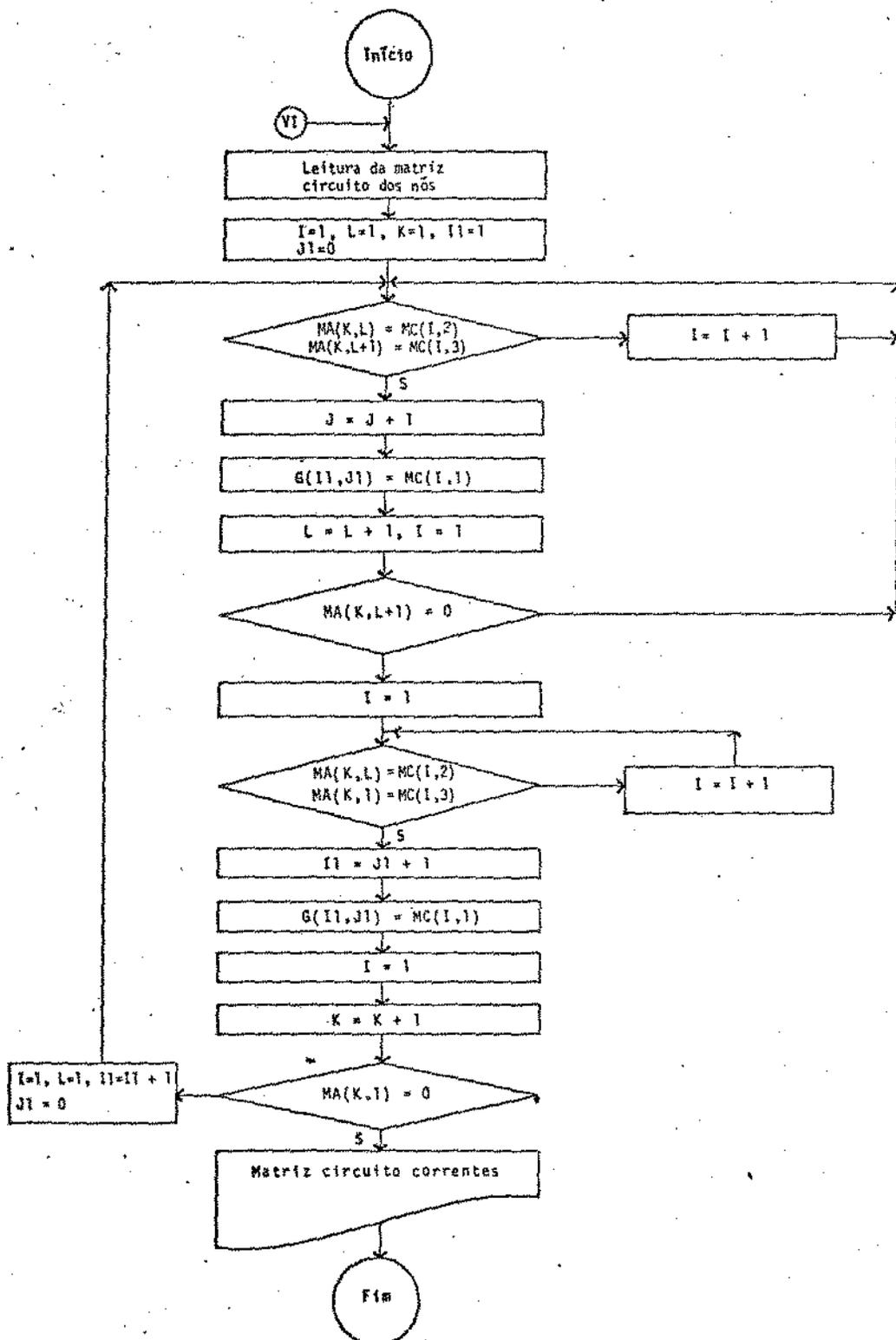


Figura III.10 - Fluxograma para a obtenção da Matriz  
Circuito Correntes

sença de recícos, os balanços mássico e energético são efetuados utilizando-se método iterativo.

A estratégia de cálculo baseia-se no corte de um número mínimo de correntes do processo, de modo a abrir todas as malhas de recícos. As correntes de corte são desdobradas em dois segmentos sob o ponto de vista matemático: o valor inicial e o valor calculado, correspondendo ao destino e à origem da corrente, respectivamente.

Os Valores Iniciais das Correntes de Corte são fornecidos pelo operador, com a orientação da subrotina de entrada de dados, sendo arquivados aos números das correntes consideradas.

A Figura III.11 mostra o fluxograma referente à determinação das correntes de corte, no qual as seguintes variáveis são utilizadas:

NR , número de recícos,  $G(I1,j)$ , matriz circuito corrente,  
 MZ , número de correntes do processo,  $MC(K,I)$ , freqüência da corrente, FR, freqüência,  $A(i)$ , matriz unidimensional que acumula o número das correntes de corte.

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 recícos aberta.

O fluxograma referente à adequação da Matriz de Adjacência à abertura dos recícos é mostrado pela Figura III.12, no qual as seguintes variáveis são utilizadas:

$MC(i,j)$ ; Matriz de Conexão da Correntes,  $MA(i,j)$ , Matriz de Adjacências e  $A2(i)$ , vetor corrente de corte.

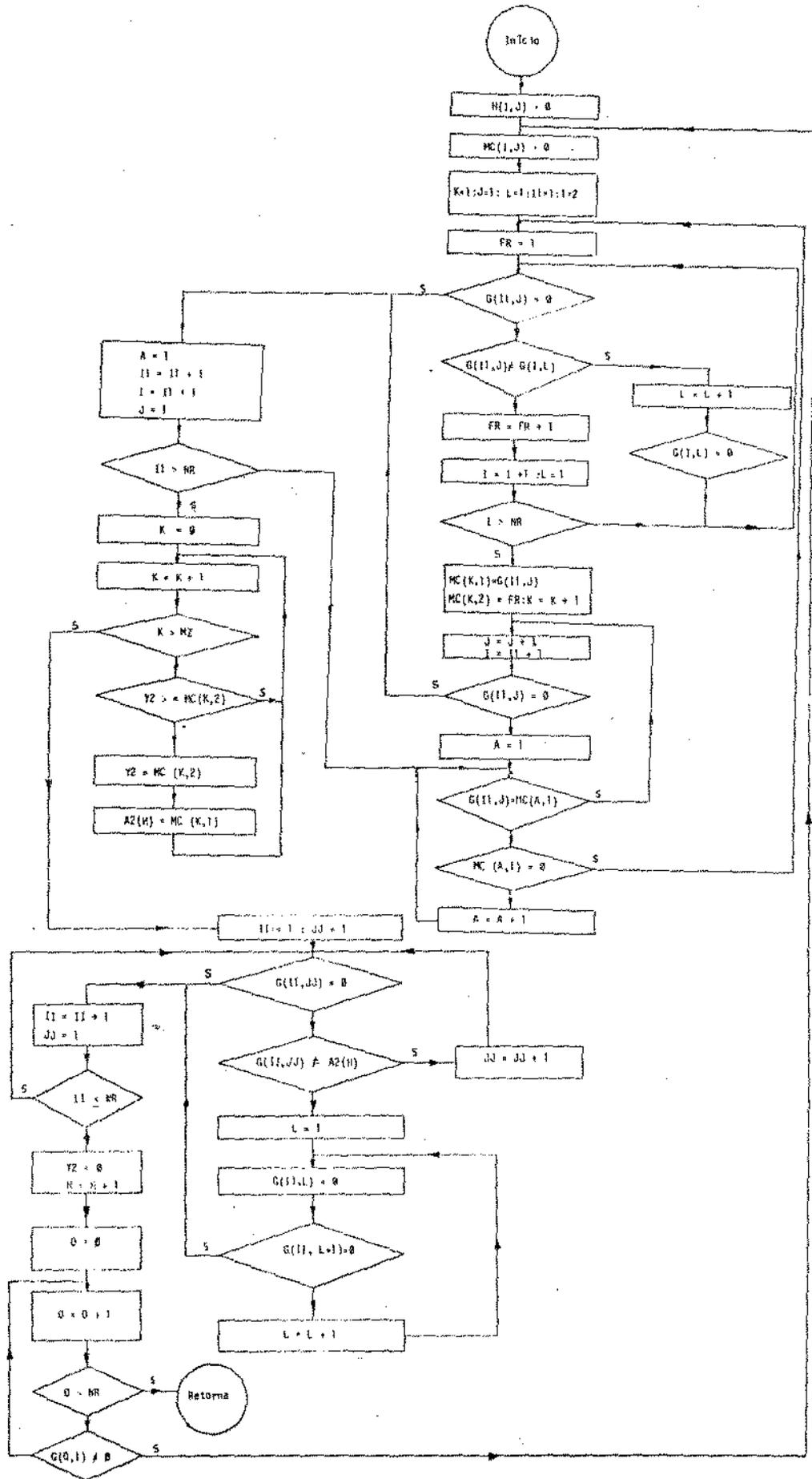


Figura III.11 - Fluxograma correspondente à determinação das Correntes de Corte

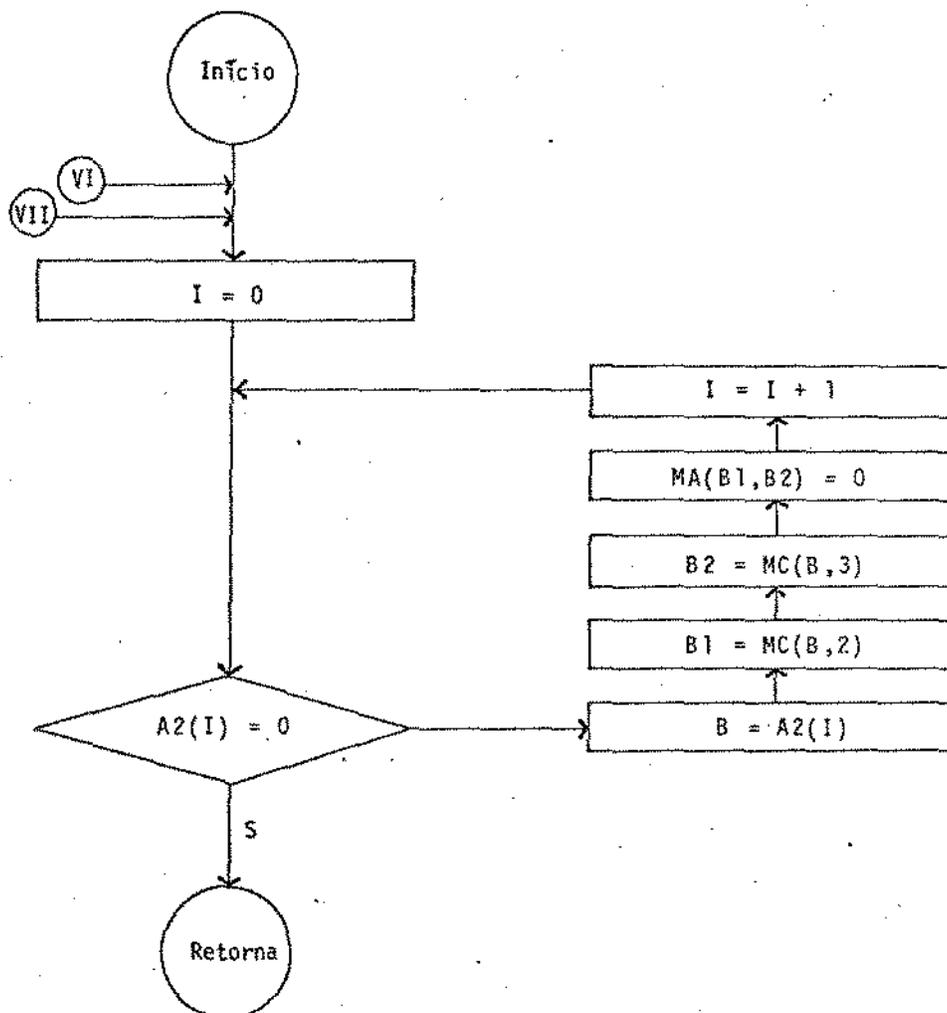


Figura III.12 - Fluxograma para a adequação da Matriz de Adjacências à abertura de reciclós

Uma vez adequada a Matriz de Adjacências para representar o processo com a malha de ciclos aberta, a seqüência de cálculos pode então ser obtida. O fluxograma da subrotina para a determinação da seqüência de cálculo é mostrado na Figura III.7.

### III.10. CARACTERÍSTICAS DAS UNIDADES MODULARES

Os resultados da simulação de um dado processo estarão tão próximos dos resultados experimentais quanto mais representativos forem os modelos matemáticos adotados dos equipamentos pertencentes ao processo simulado. O desenvolvimento de modelos matemáticos precisos, para cada equipamento pertencente aos processos a serem simulados, será portanto o fator determinante da validade dos resultados obtidos pela simulação.

Os modelos matemáticos dos equipamentos da indústria química, escritos cada um deles através de um programa, constituirão nas Unidades Modulares.

As unidades modulares, no presente trabalho, são gerenciadas por dois sub-programas: PARA e GUIA, cujos fluxogramas podem ser vistos nas Figuras III.14 e III.15., os quais supervisionam o acesso dos parâmetros e a execução dos cálculos, respectivamente.

O fluxograma das etapas de construção das unidades modulares é apresentado na Figura III.13, onde cada uma destas fases serão descritas a seguir.

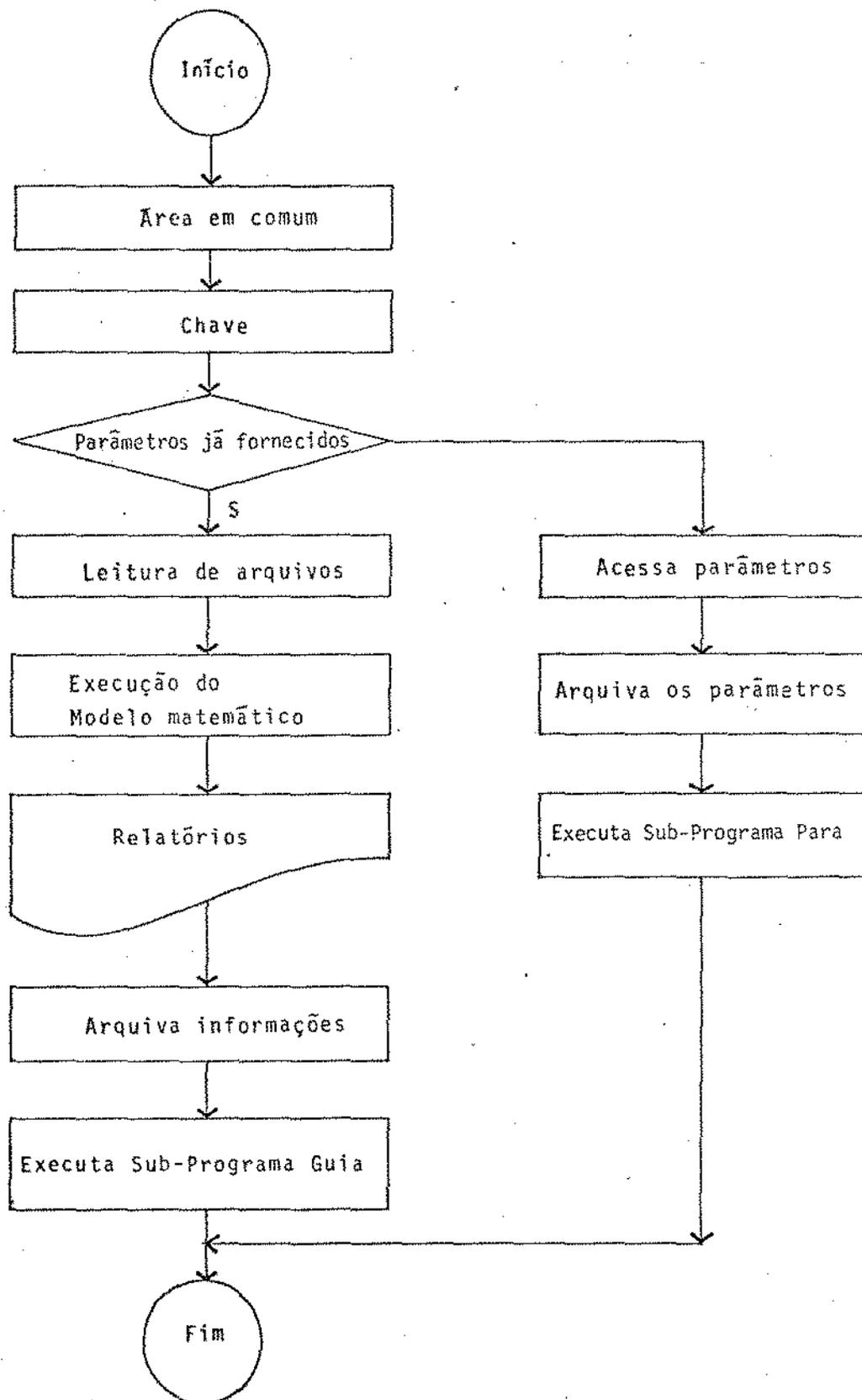


Figura III.13 - Fluxograma para construção das unidades modulares

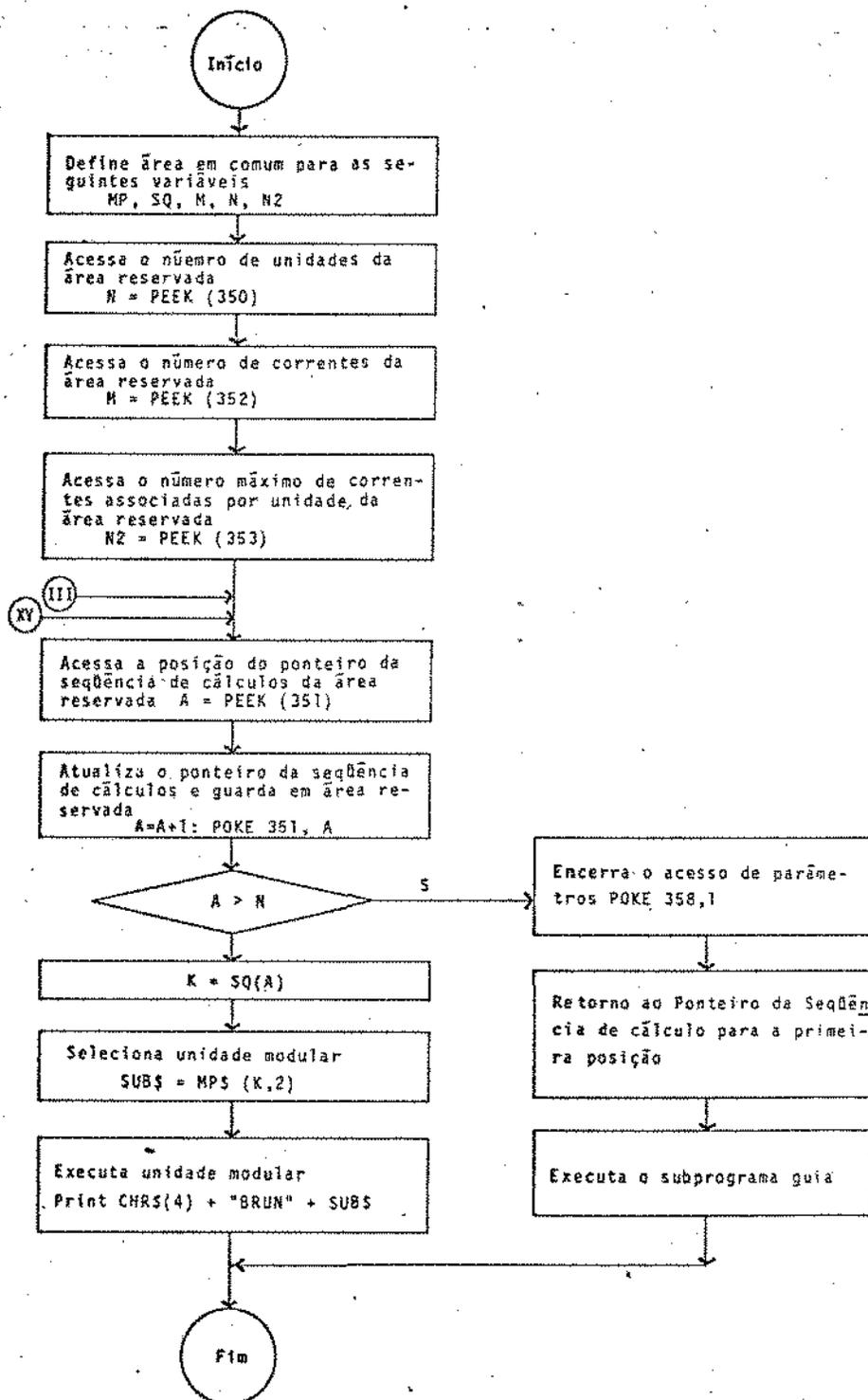


Figura III.14 - Fluxograma do Sub-programa PARA

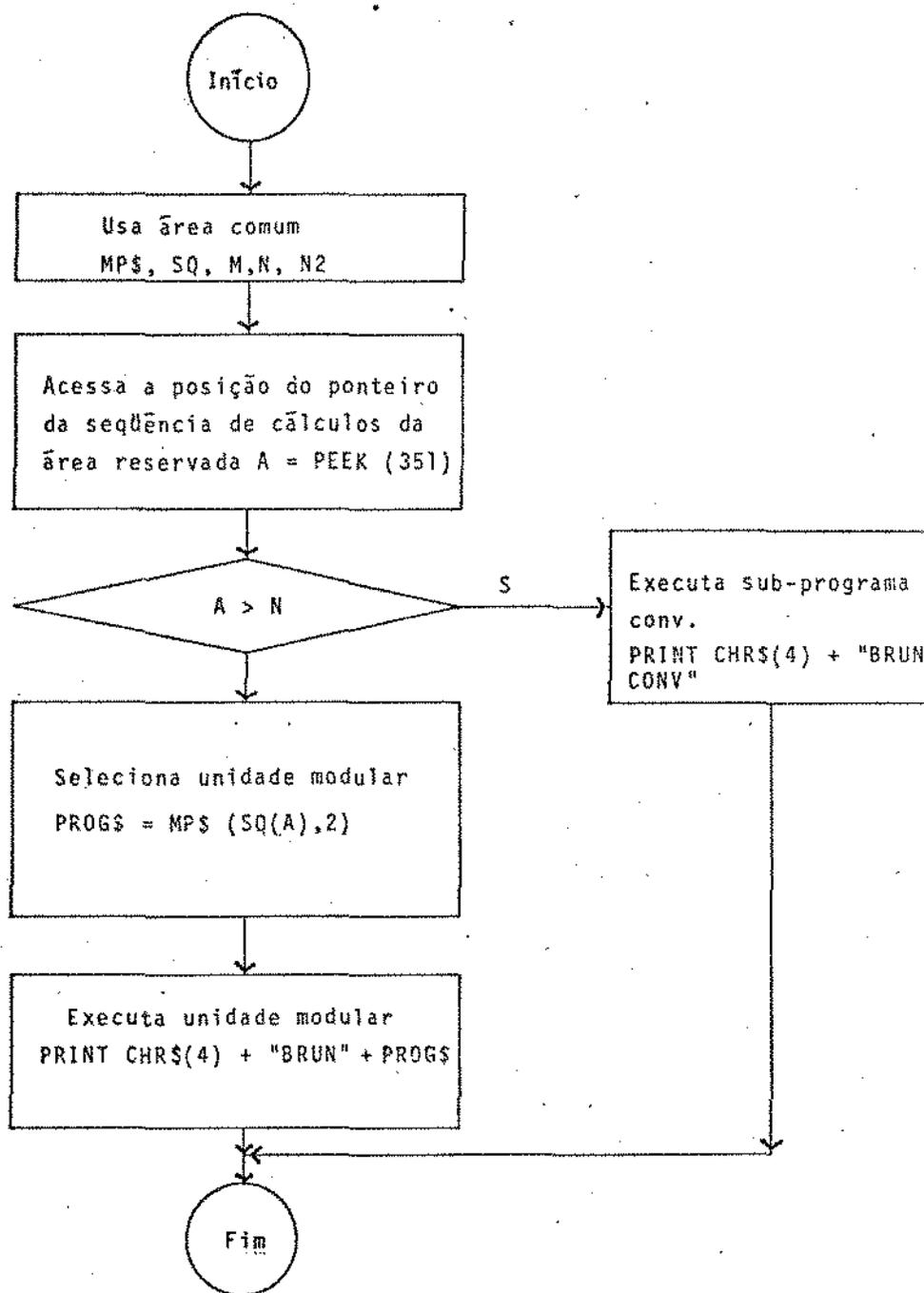


Figura III.15 - Fluxograma do Sub-programa GUIA

### III.10.1. ÁREA EM COMUM E SETOR CHAVE

A utilização de áreas de memórias RAM, em comum com as unidades modulares, resulta no aumento da velocidade de processamento, uma vez que o banco de dados mantido na memória RAM é consultado instantaneamente pelas unidades modulares encadeadas, dispensando as consultas às unidades de disquetes para leitura de arquivos. Entretanto a utilização de áreas em comum acarreta numa redução da capacidade de memória RAM, disponível para a utilização pelas variáveis das unidades modulares.

A área em comum abrange as seguintes variáveis: Matriz do Processo, seqüência de cálculo, número de unidades do processo, número de correntes do processo e número máximo de correntes associadas às unidades modulares.

O setor chave é responsável pela atualização do ponteiro da seqüência de cálculos e pela localização do número da unidade modular em execução. Após a obtenção destas informações, a unidade modular atualiza o registro da seqüência de cálculo, permitindo que, após a execução deste módulo, o próximo módulo seja acessado.

O número associado a cada unidade em execução é obtido utilizando-se a informação da posição na seqüência de cálculo do referido módulo, como argumento do vetor seqüência de cálculos, alocado na área em comum.

A seguinte seqüência corresponde à discussão acima:

A = PEEK (351)

B = A + 1

POKE 351, B

NN = SQ (A)

onde NN é o número da unidade em execução, A é a posição ocupada na seqüência de cálculo e SQ(i) é o vetor seqüência de cálculo.

### III.10.2. ADMISSÃO DE PARÂMETROS

Os parâmetros intrínsecos a cada unidade modular são definidos convenientemente na construção das mesmas, sendo inerente à 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,

O exemplo a seguir elucidada uma definição de parâmetros para um Divisor de Corrente Isotérmico.

O fluxo mássico de uma corrente pertencente a um processo químico que se pretende simular é dividido em duas outras com um fator de divisão a e b do fluxo original, conforme ilustra a Figura III.16. Esta operação deve ser realizada em uma unidade modular.



Figura III.16 - Módulo nº 4 - DIVISOR - Correntes Associadas  
1-2-3

O desenvolvimento do módulo divisor de corrente deve ser feito de modo a ter o maior grau de liberdade possível para atender às situações mais diversas, tais como as ilustradas pela Figura III.17.

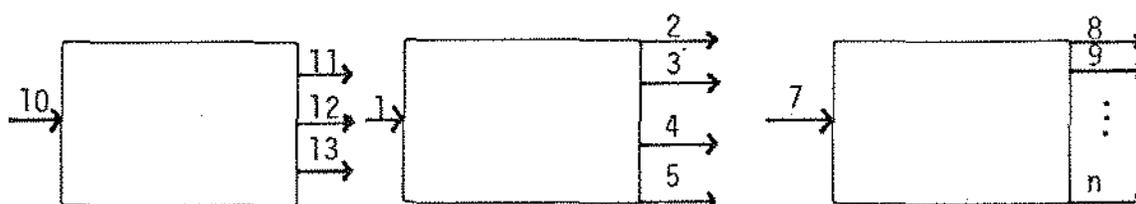


Figura III.17 - Variações das Correntes de entrada para um Divisor de Corrente

Portanto as correntes associadas e os respectivos fatores de divisão das correntes de saída do módulo não podem ser fixados na construção do mesmo. A identificação das correntes associadas deve ser efetuada pelo módulo, tendo como argumento o número da unidade e as informações da Matriz do Processo e os fatores de divisão associados às correntes de saída da unidade devem ser solicitados pela unidade modular, atendendo a cada situação particular.

No exemplo citado o fator de divisão de cada corrente de saída é denominado parâmetro intrínseco do módulo divisor de corrente. Se, no exemplo, a unidade fosse um misturador adiabático, as capacidades térmicas dos fluidos das correntes de entrada poderiam ser os parâmetros intrínsecos, que seriam fornecidos pelo operador ou estimados por subrotinas de predição de propriedades físicas ou ainda fornecidos por um banco de dados, se disponível no sistema.

A definição dos parâmetros intrínsecos, portanto, de

pende do projeto da unidade modular e do grau de liberdade que se pretenda conferir ao módulo, devendo ser detalhado no manual de operação da unidade modular.

A utilização de uma outra posição reservada da memória RAM é necessária para informar às unidades modulares se os parâmetros intrínsecos da unidade em execução já foram fornecidos.

A entrada dos parâmetros é supervisionada pelo subprograma PARA, que após a admissão dos parâmetros de todas as unidades modulares, modifica o conteúdo da posição de memória reservada, finalizando a entrada dos parâmetros.

A seqüência abaixo elucida o exposto acima:

```
J = PEEK (358)
```

```
IF J <> 0 THEN GOTO (Execução do módulo)
```

```
Admissão dos parâmetros
```

```
Arquivo dos parâmetros
```

```
PRINT CHR$(4) + "BRUN PARA"
```

Os parâmetros fornecidos a cada unidade devem ser arquivados no arquivo PARÂMETROS#90, no endereço correspondente ao número da unidade modular, onde o primeiro registro deve conter o total de parâmetros.

Após arquivar os parâmetros da unidade modular, o subprograma PARA deve ser executado, conforme a seguinte sentença.

```
PRINT CHR$(4) + "BRUN PARA"
```

Permitindo desta maneira a supervisão do acesso dos

parâmetros dos módulos seguintes.

A leitura dos parâmetros intrínsecos, conforme a seqüência definida no arquivo PARÂMETROS#90, e das informações de cada corrente associada à unidade modular contidas nos arquivos QTPNC 900, COMPONENTES e FRAMOL 500, fornece os dados necessários para a execução do modelo matemático correspondente ao equipamento que se pretende simular.

Após o acesso dos parâmetros de cada unidade, o bloco responsável pela supervisão da execução da seqüência de cálculo é executado, através da seguinte sentença:

```
PRINT CHR$(4) + "BRUN GUIA"
```

Para facilitar o acompanhamento da simulação do processo, a apresentação de relatórios parciais dos passos de cálculo de cada unidade modular é efetuada, através do monitor de vídeo e impresso.

Após a conclusão de todos os cálculos e a apresentação dos relatórios, os dados de saída das unidades modulares devem ser arquivados nos arquivos e endereços correspondentes, constituindo-se na memória de cálculos para as unidades subsequentes.

O subprograma GUIA deve ser executado nesta etapa, para que a próxima unidade modular na seqüência de cálculos seja acessada para processamento. A seguinte seqüência leva à execução do subprograma GUIA:

```
PRINT CHR$(4) + "BRUN GUIA"
```

A estrutura proposta permite que cada unidade modu-

lar seja interpretada como uma subrotina, viabilizando a conexão do fluxo de informações de projeto e processo como argumentos de entrada e saída.

A ordem de entrada das correntes associadas torna-se irrelevante pela estrutura proposta, dispensando ainda a utilização de codificações ou palavras reservadas para iniciar listas de dados de entrada a associá-los às respectivas unidades. Cada módulo solicita explicitamente os dados necessários para a sua execução através de sentenças como:

Qual a temperatura da corrente nº 5 ?

Qual o fator de divisão da corrente -4 ?

A entrada de dados torna-se, deste modo, dirigida, facilitando a operação do programa e reduzindo a possibilidade de erros nesta fase.

### III.11. CONVERGÊNCIA DOS RESULTADOS

Posto que, na grande maioria dos processos químicos estão envolvidos correntes de reciclo, e que a estratégia de cálculo adotada é através de método iterativo, é necessário portanto que após cada ciclo de cálculo completado, os resultados sejam analisados.

A análise dos resultados, após cada ciclo de cálculo é feita confrontando-se os valores iniciais das correntes de corte com os valores calculados, determinando-se os desvios relativos pela seguinte equação:

$$Dr = \frac{VI(i) - VC(i)}{VI(i)} \times 100$$

onde:  $D_r$  é o desvio relativo,  $VI(i)$  é o valor inicial da corrente de corte  $i$  e  $VC(i)$  é o valor calculado para a corrente de corte  $i$ .

Se o desvio relativo entre os valores iniciais e calculados das correntes de corte forem maior que a tolerância admitida pelo operador, o ciclo de cálculos se repete, sendo atribuído como novos valores iniciais das correntes de corte a média aritmética entre os valores iniciais e os calculados. Caso contrário a simulação do processo será concluída, estando disponível o relatório das informações de todas as correntes do processo.

O programa responsável pela convergência dos resultados, CONV, admite, como parâmetros, as tolerâncias desejadas para o cálculo da vazão, temperatura, pressão e composição.

O fluxograma do programa CONV é apresentado na Figura III.18.

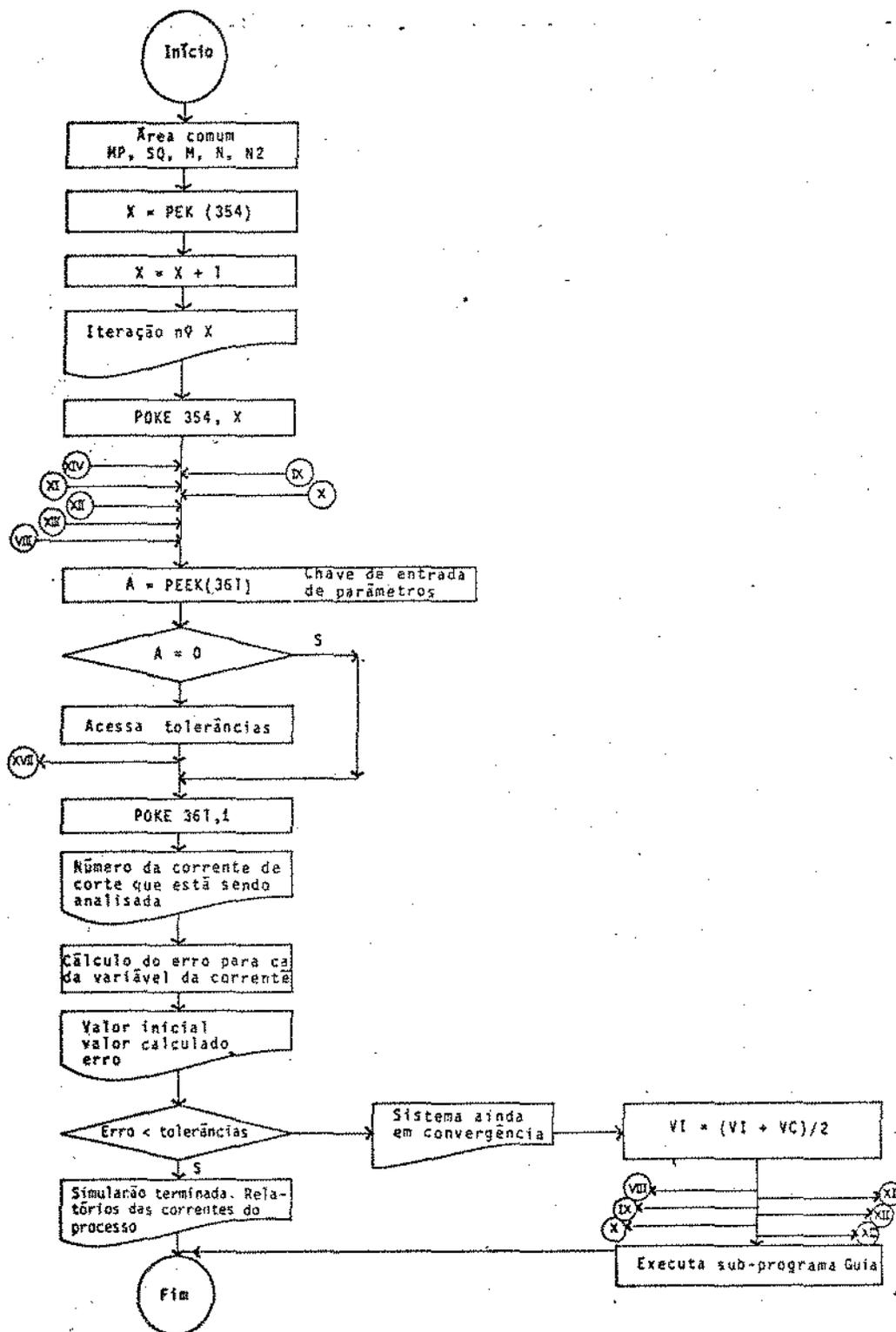


Figura III.18 - Fluxograma para análise da convergência

CAPÍTULO IV  
PROGRAMA EXECUTIVO  
ESTRUTURA AUXILIAR

#### IV.1. INTRODUÇÃO

Um grande número de informações é necessário estar disponível para consulta do programa executivo durante a simulação de um processo, tais como as informações acerca dos arquivos existentes, das unidades modulares e dos bancos de dados de propriedades físicas e químicas. O acesso do programa a estas informações, bem como o acesso pelo usuário às informações sobre a "memória" do programa executivo será possibilitada pela estrutura auxiliar.

A estrutura auxiliar permite ao operador informar ao programa executivo sobre a criação de novos arquivos, alteração e destruição de arquivos existentes. Além disso possibilita obter informações sobre o conteúdo dos arquivos, relação das unidades modulares e arquivos existentes, dados referentes ao último processo simulado e ainda a execução da estrutura principal do programa.

Nas próximas seções serão descritas as principais etapas da estrutura auxiliar e apresentados os fluxogramas correspondentes.

#### IV.2. ESTRUTURAÇÃO DO PROGRAMA AUXILIAR

Todas as operações realizadas pela estrutura auxiliar são orientadas por "menús", que permite ao operador a escolha da alternativa desejada pela digitação do respectivo código.

Através do primeiro "menú" (Figura IV.1) apresentada pela estrutura auxiliar, as seguintes alternativas são mos

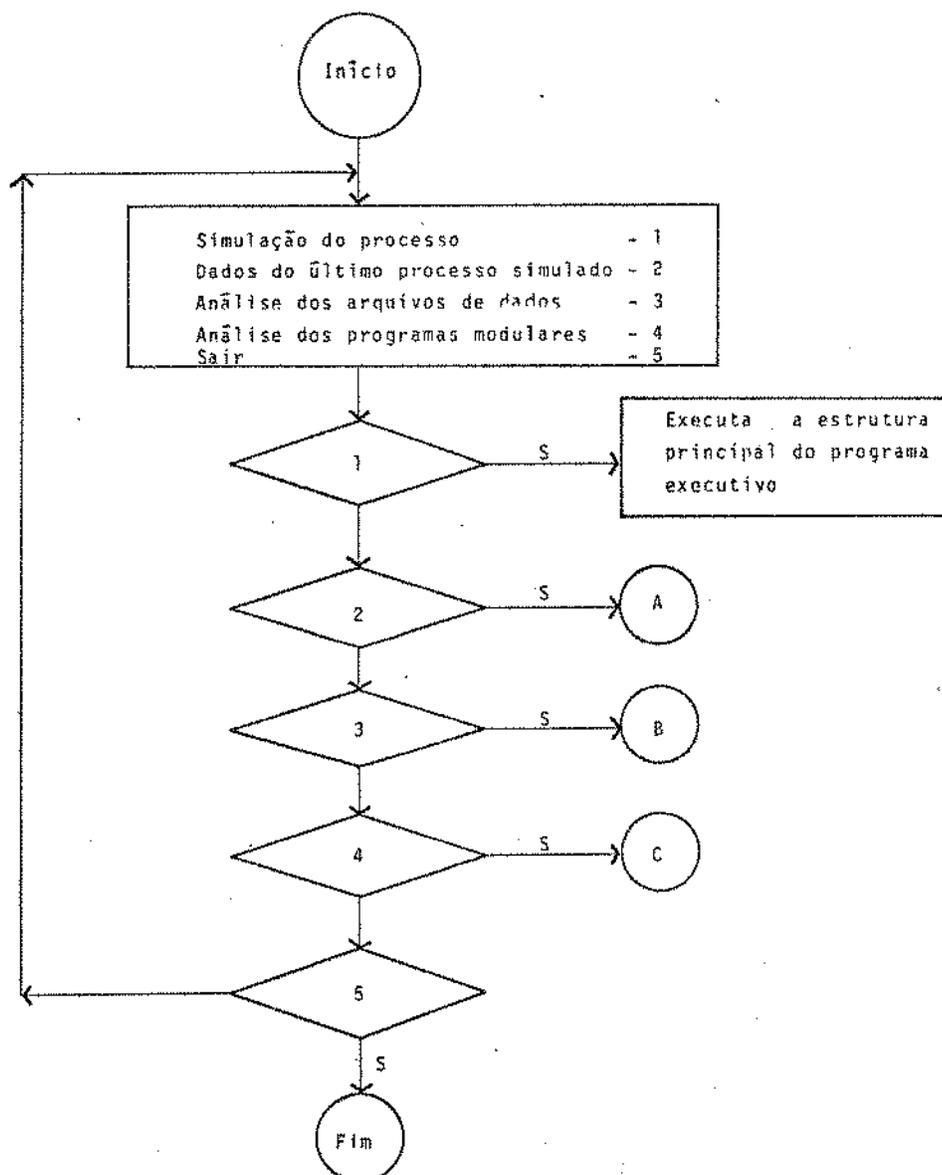


Figura IV.1 - Fluxograma referente ao primeiro menu da estrutura auxiliar

tradas ao usuário: simulação do processo, dados do último processo simulado, análise dos arquivos de dados, análise dos programas modulares e saída do sistema.

#### IV.3. SIMULAÇÃO DO PROCESSO

A escolha da alternativa simulação do processo leva à execução da estrutura principal do programa executivo.

#### IV.4. INFORMAÇÕES SOBRE O ÚLTIMO PROCESSO SIMULADO

As informações sobre o último processo simulado podem ser obtidas através de um segundo "menú" (Figura IV.2) apresentado ao usuário, onde estão disponíveis as seguintes informações: Matriz do Processo, Matriz Circuito Correntes, Correntes de Corte, Seqüência de Cálculos e dados relativos às correntes.

A Matriz do Processo, Matriz Circuito Correntes, Correntes de Corte e a seqüência de cálculos (Figuras IV.3, IV.4, IV.5 e IV.6) são obtidas através da leitura dos arquivos MATPROCS#72, MATCIR#100, CORCORTE, SEQCAL#5, respectivamente. A apresentação destas matrizes pode ser feita através do vídeo ou em relatórios impressos.

As informações relativas às correntes (vazão, temperatura, pressão e composição) (Figura IV.7) são obtidas através da leitura dos seguintes arquivos: QTPNC#900, COMPONENTES e FRAMOL#500.

#### IV.5. ARQUIVOS DE DADOS

A análise dos arquivos de dados é possibilitada por

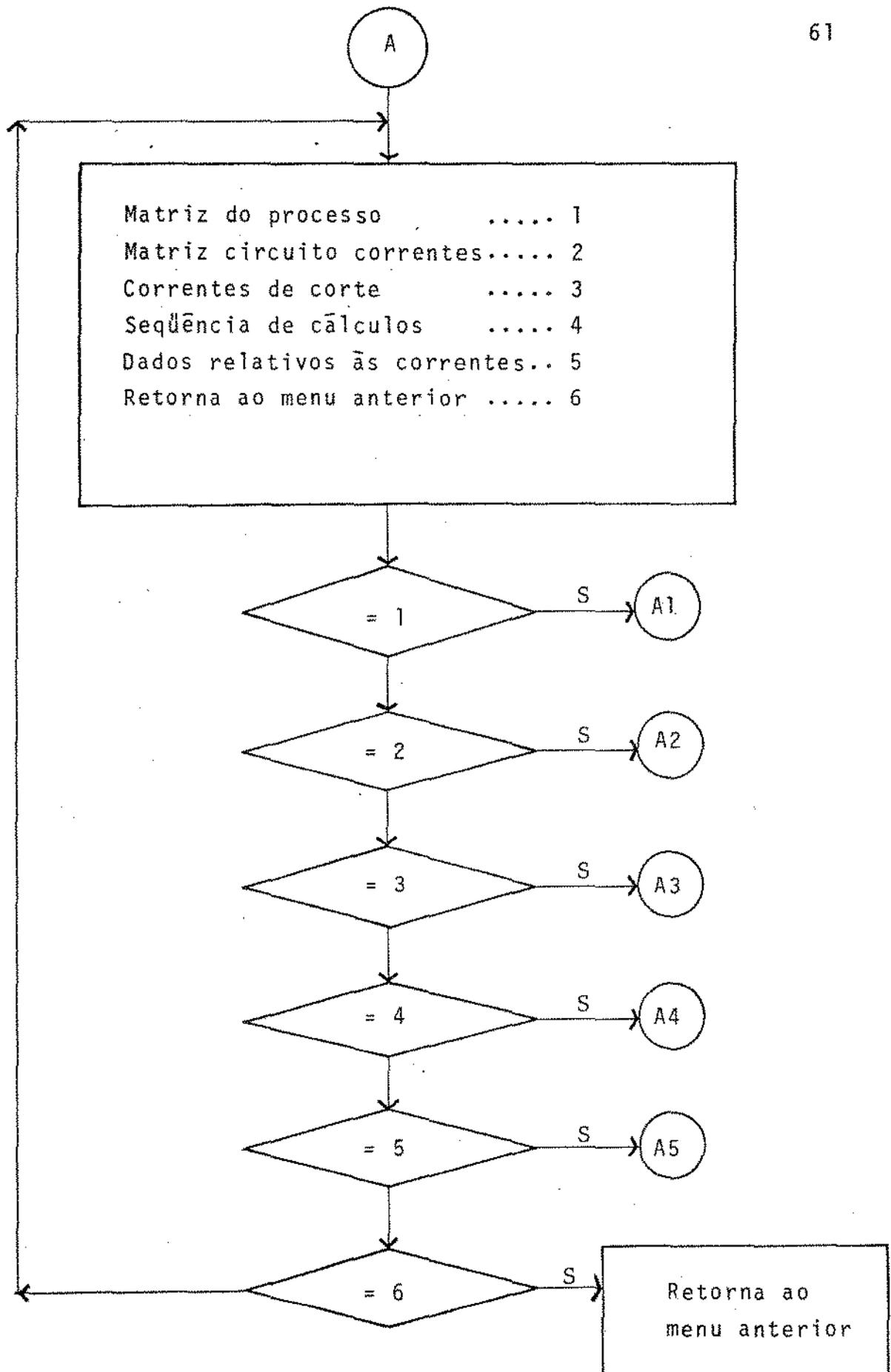


Figura IV.2 - Fluxograma relativo ao segundo menu da estrutura auxiliar

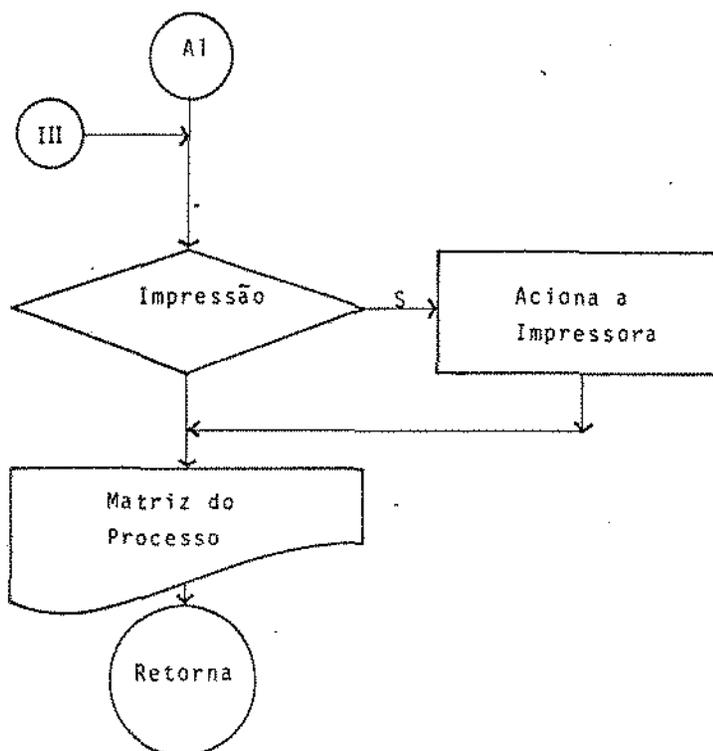


Figura IV.3 - Fluxograma referente à apresentação da matriz do processo

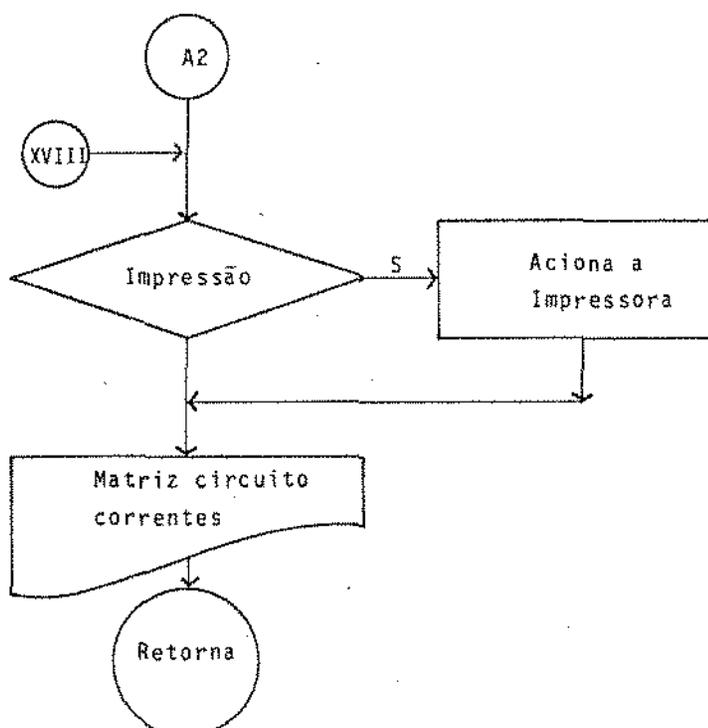


Figura IV.4 - Fluxograma referente à apresentação da matriz circuito correntes

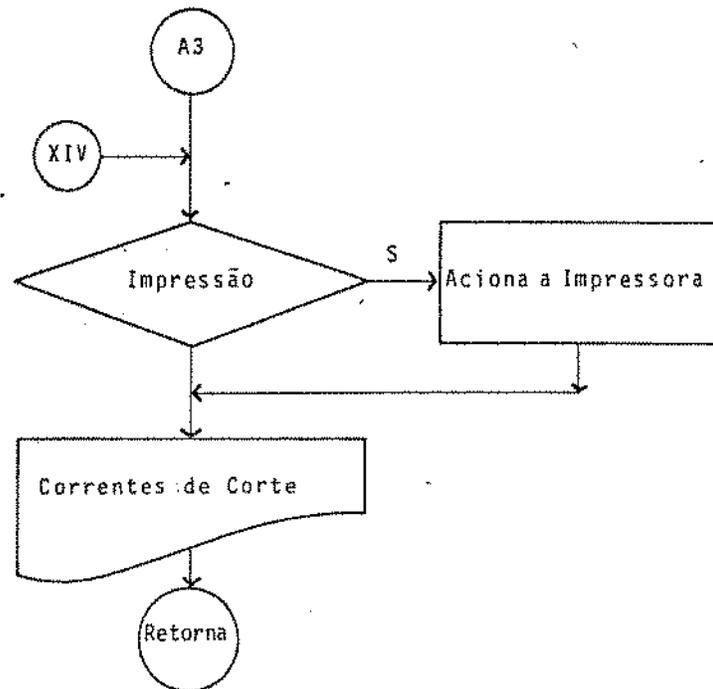


Figura IV.5 - Fluxograma referente à apresentação das Correntes de Corte

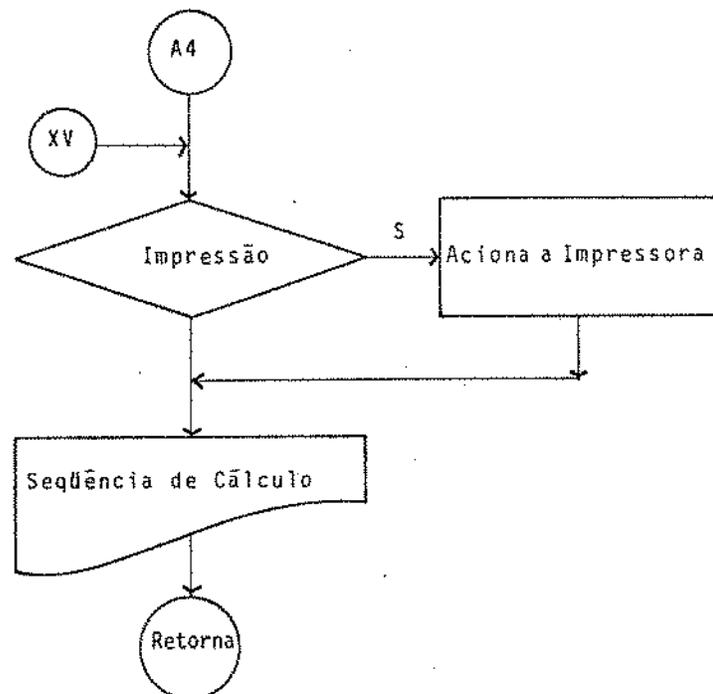


Figura IV.6 - Fluxograma referente à apresentação da Seqüência de Cálculo

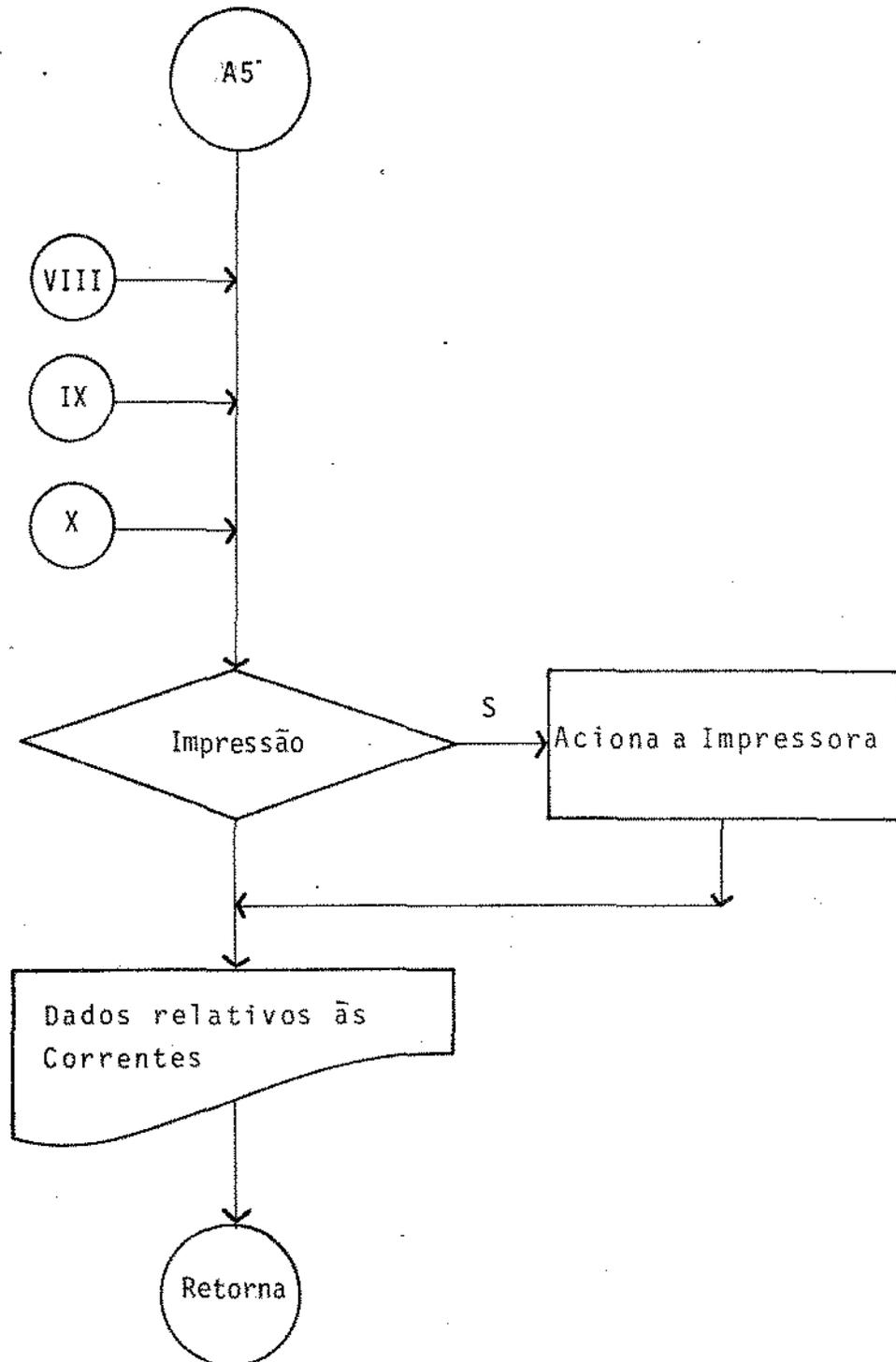


Figura IV.7 - Fluxograma referente à apresentação dos dados relativos às Correntes

um terceiro "menú" (Figura IV.8) apresentando as opções: Listagem de arquivos, criação de um novo arquivo de dados, atualização de arquivos de dados, destruição de arquivos de dados, catalogar, retornar ao menú anterior.

#### i. Listagem de Arquivos

A primeira alternativa (Figura IV.9) oferece ao operador a relação de todos os arquivos existentes indexando-os, e após a digitação do número associado ao arquivo desejado, é efetuada a leitura do arquivo contido no disquete e sua apresentação no vídeo ou impressora.

#### ii. Criação de novo Arquivo de Dados

A criação de um novo arquivo de dados (Figura IV.10) pode ser feita através da alternativa número 2. Inicialmente o nome proposto para o novo arquivo é confrontado com os nomes dos arquivos já existentes. Caso não exista coincidência de nomes, o operador deve fornecer os números do "drive", disco e total de dados a serem arquivados, seguidas das informações a serem arquivadas. No caso de coincidência de nome entre o arquivo que se pretende criar e um dos arquivos já existentes, uma mensagem é enviada ao operador advertindo se este pretende a substituição do arquivo existente pelo novo. A opção pela não substituição faz com que o programa aguarde um novo nome para o arquivo a ser criado, enquanto que optando-se pela substituição o arquivo já existente é substituído pelo novo arquivo.

#### iii. Atualização de Arquivos de Dados

A atualização de arquivos de dados (Figura IV.11) po

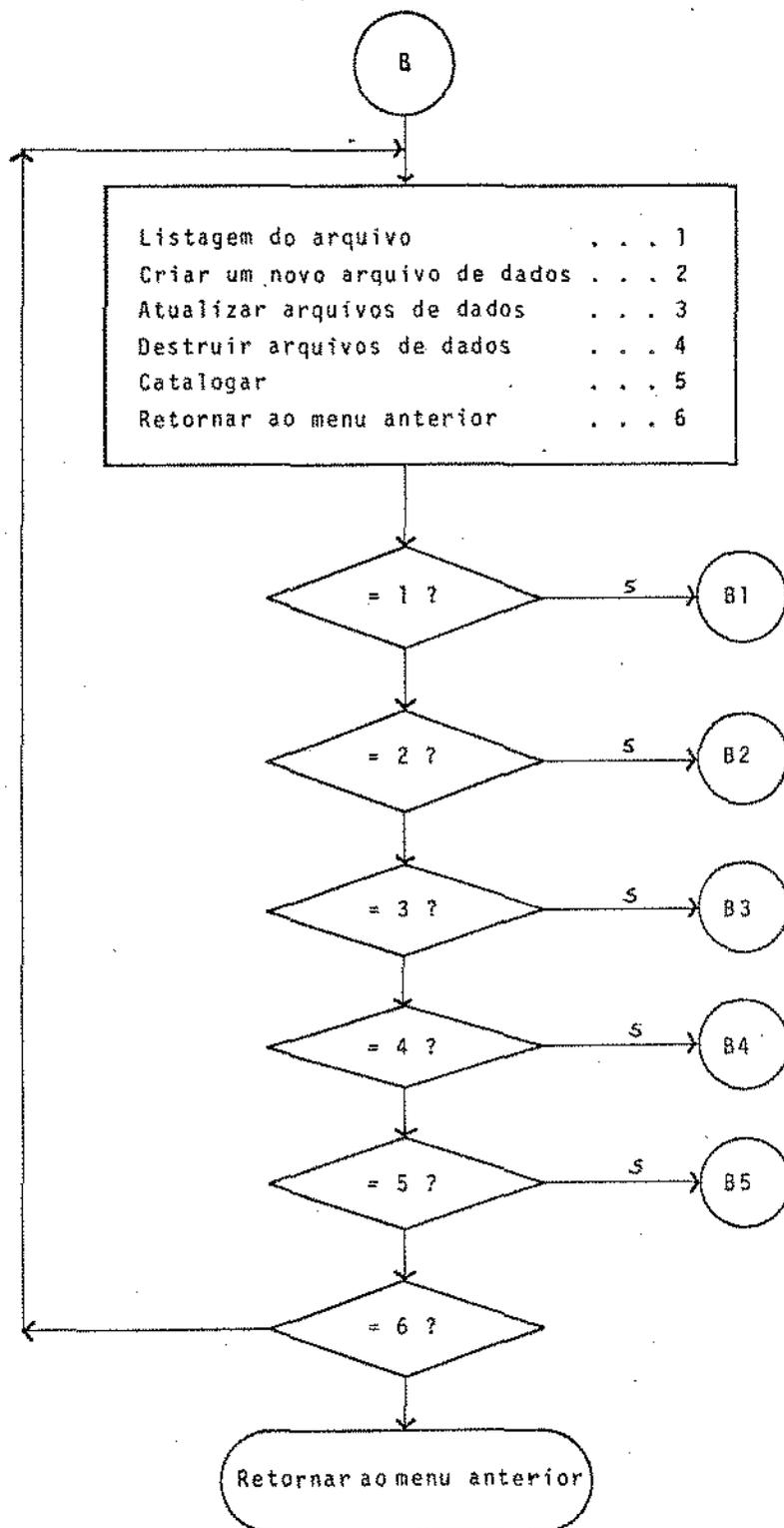


Figura IV.8 - Fluxograma referente à apresentação das alternativas para análise dos arquivos

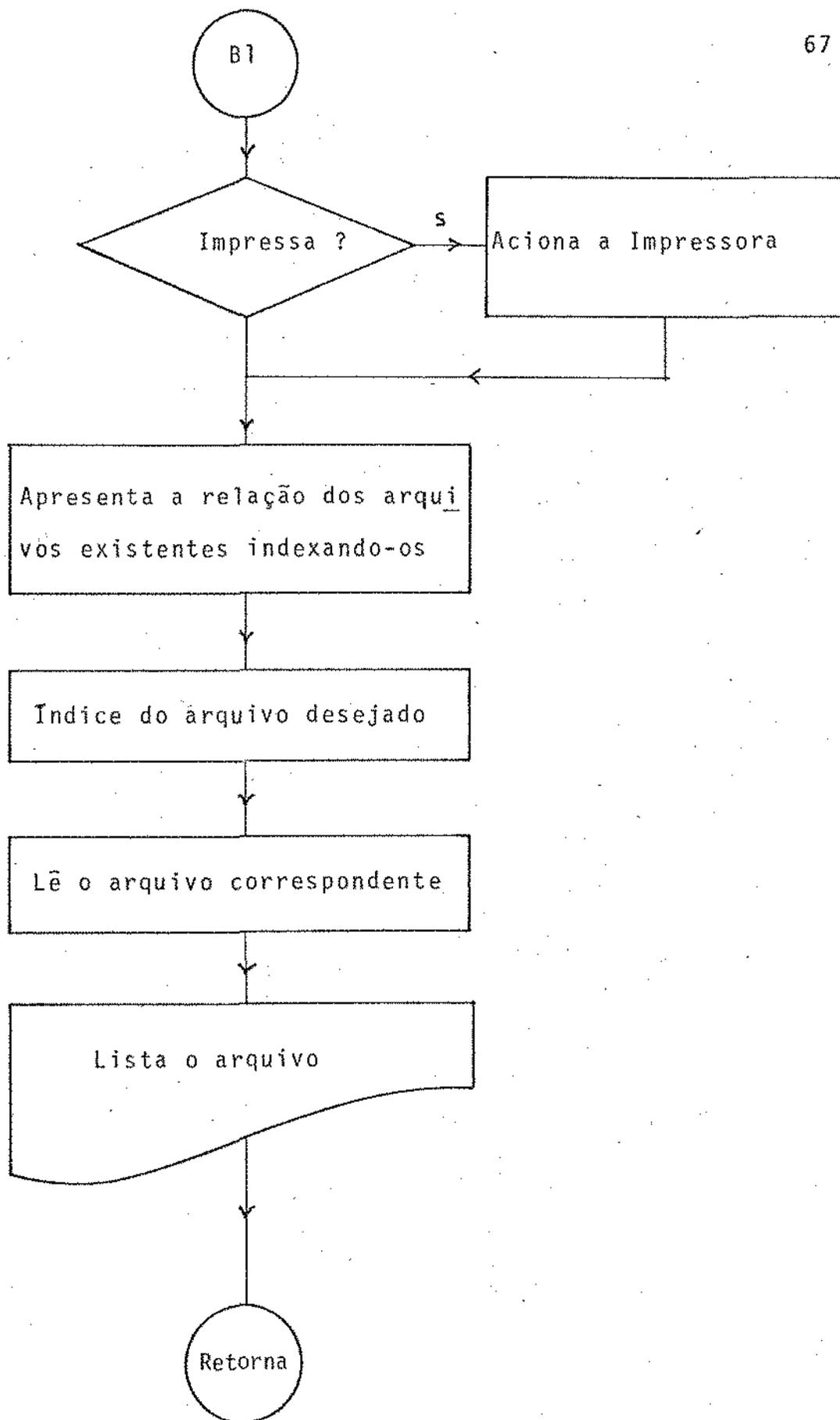


Figura IV.9 - Fluxograma referente à listagem dos arquivos

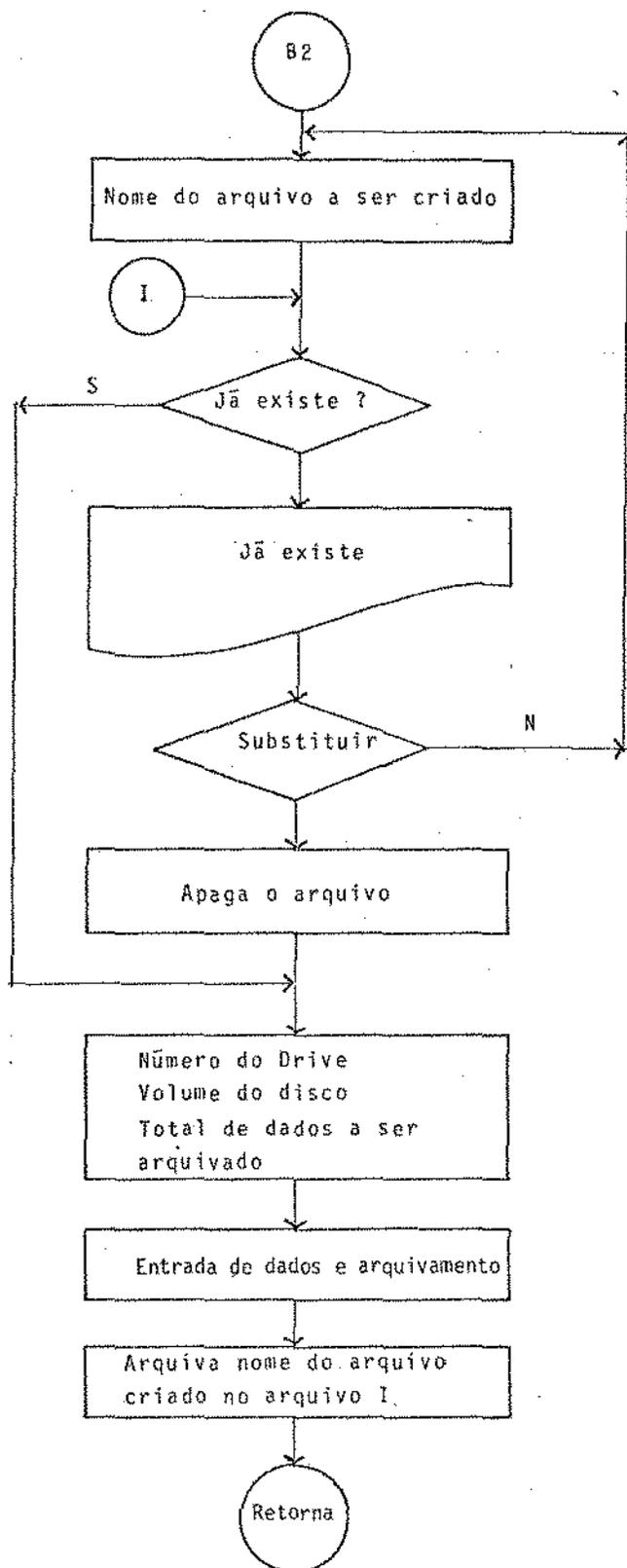


Figura IV.10 - Fluxograma referente à criação de novos arquivos

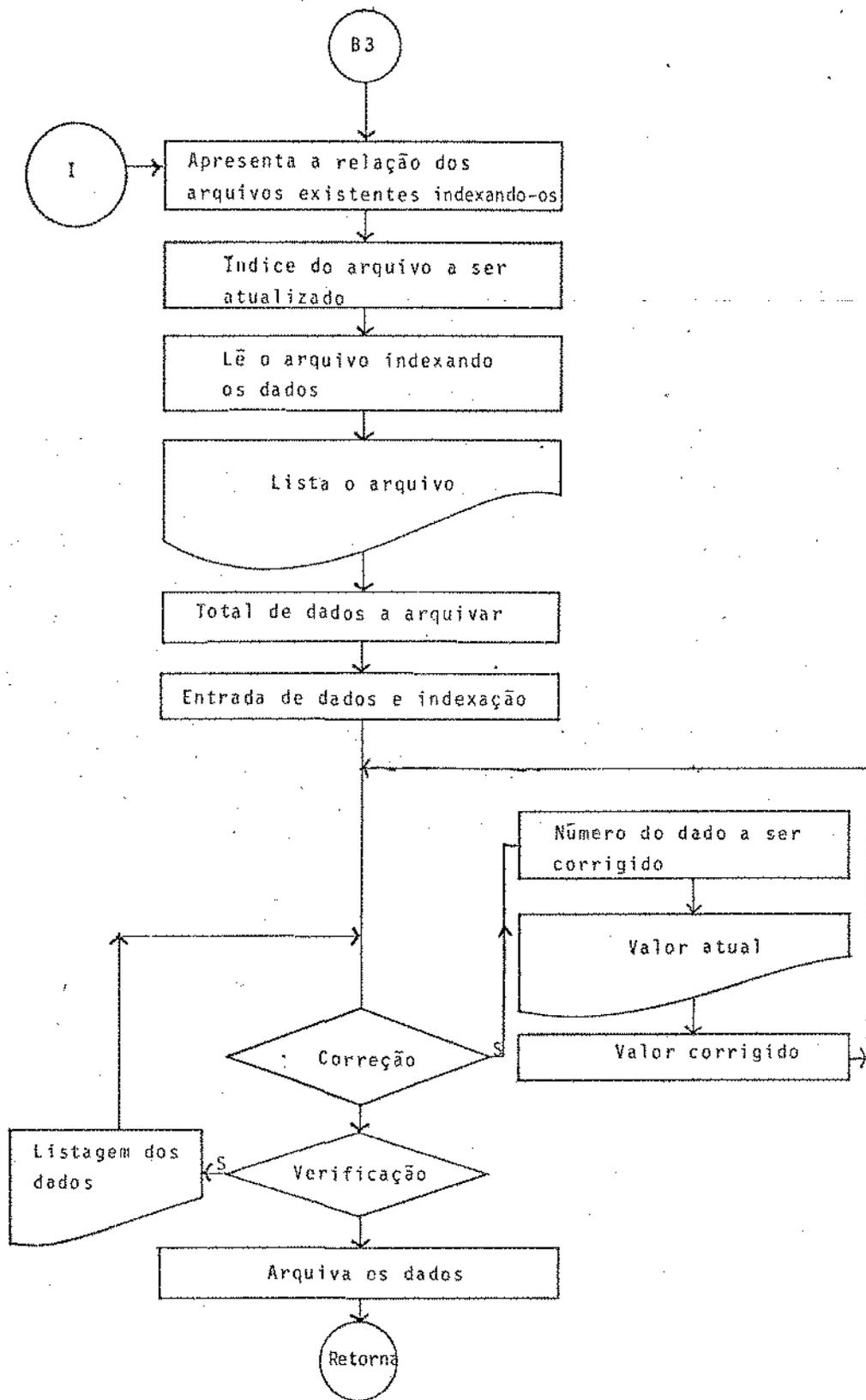


Figura IV.11 - Fluxograma referente à atualização de arquivos de dados

de ser efetuada pela escolha da terceira alternativa. O programa apresenta a relação dos arquivos existentes, indexando-os. Após a digitação do número associado ao arquivo que se pretende atualizar, o arquivo é lido e seu conteúdo apresentado no vídeo, sendo cada linha do arquivo associada a um número de referência. Os números de referência das linhas serão usados para a correção dos dados já existentes no arquivo.

A verificação dos dados pode ser efetuada em qualquer instante da atualização de dados, através da digitação de "!!" o que possibilita ao operador a supervisão de erros acidentais.

#### iv. Destruição de Arquivos de Dados

Após a verificação quanto à existência do arquivo que se pretende eliminar e enviar uma mensagem ao operador quando este não existe, o arquivo é destruído mesmo quando travado, como mostra a Figura IV.12.

#### v. Catalogação

A escolha da quinta alternativa possibilita ao operador a verificação dos arquivos existentes no sistema de simulação cujo fluxograma é mostrado na Figura IV.13.

#### vi. Análise dos Programas Modulares

Através da consulta ao arquivo SUB-PROG.EXIST., o programa apresenta ao operador a relação dos programas existentes, indexando-os. Após a digitação do número correspondente ao programa modular desejado, o programa é carregado do disquete para a CPU e listado, permanecendo então à disposição para análise do operador. O fluxograma relativo a esta etapa pode ser visto na Figura IV.14.

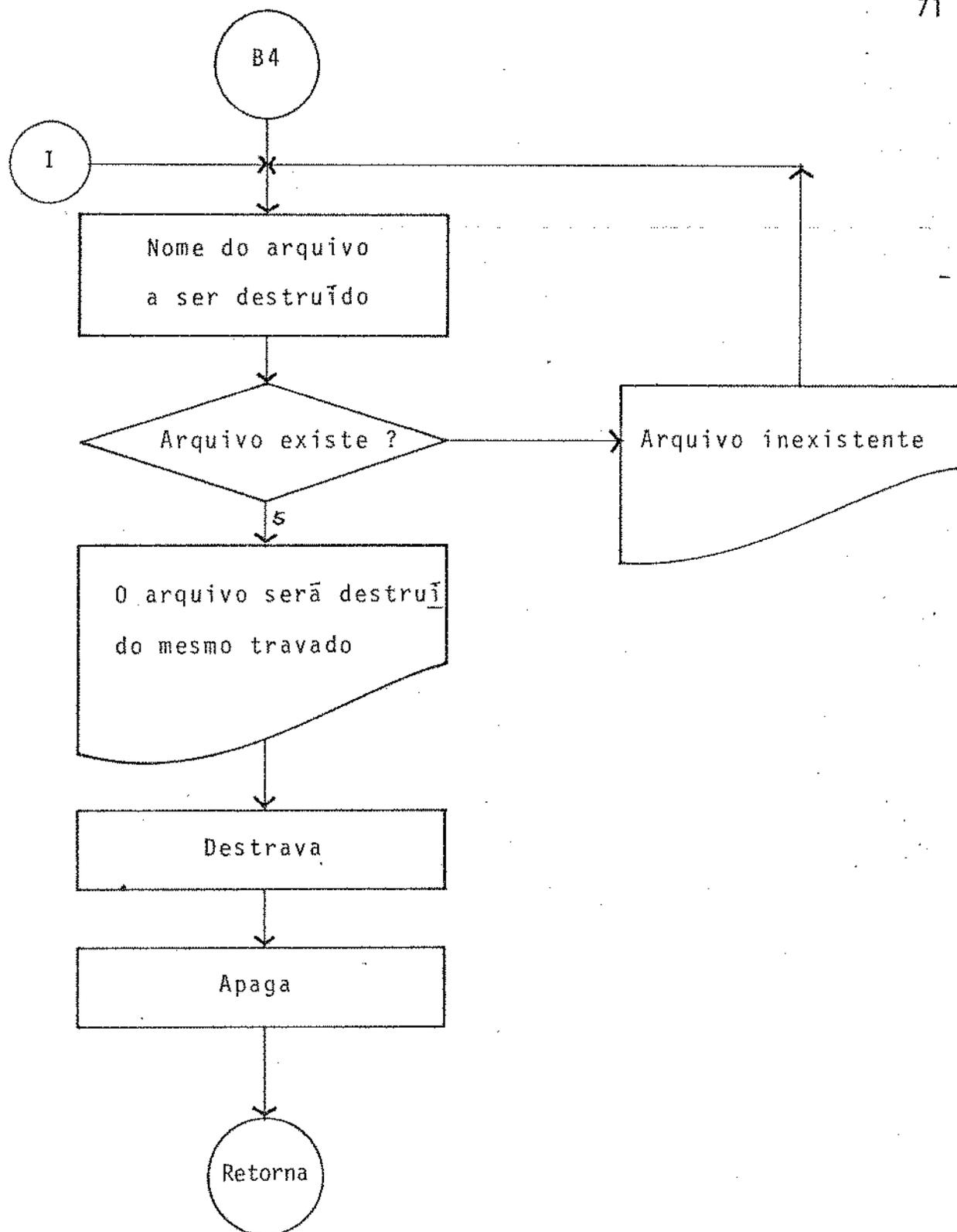


Figura IV.12 - Fluxograma referente à eliminação de arquivos existentes

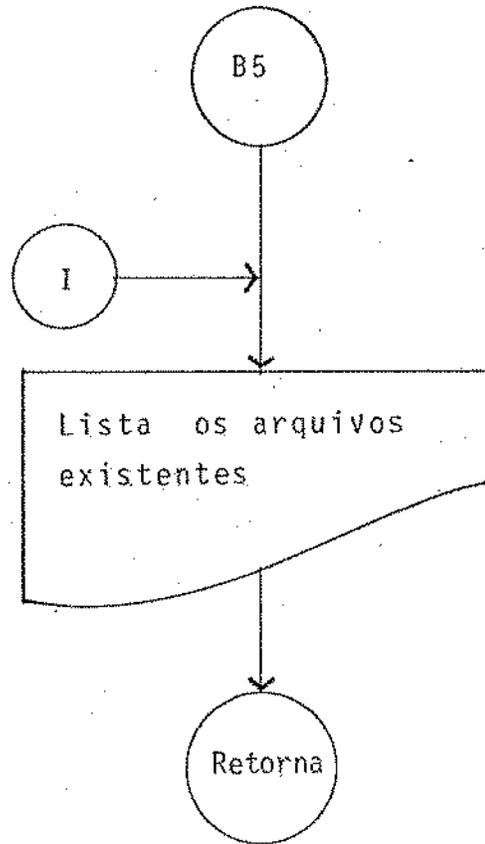


Figura IV.13 - Fluxograma referente à catalogação dos arquivos existentes

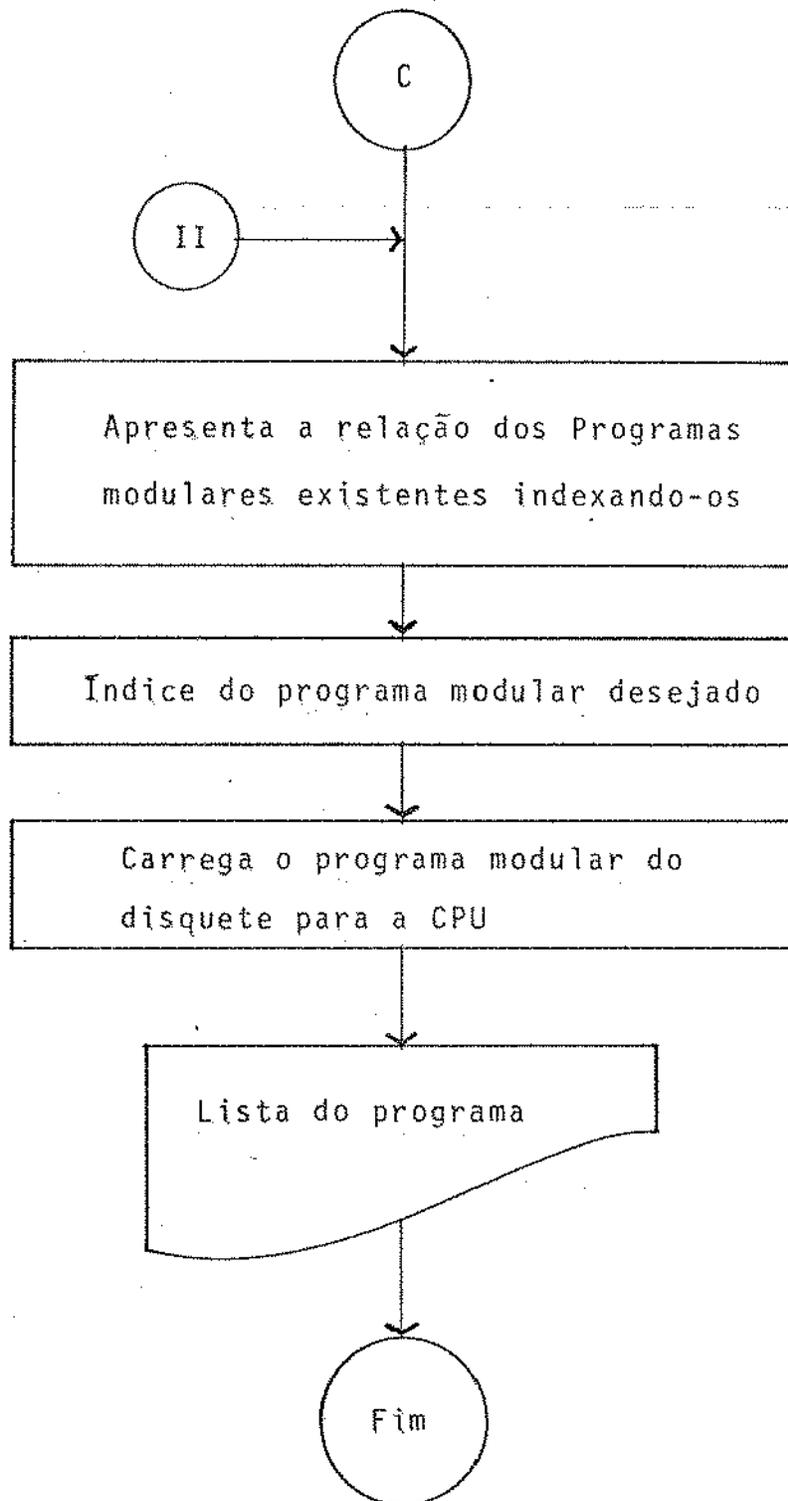


Figura IV.14 - Fluxograma referente à Análise dos Programas Modulares

A estrutura auxiliar será portanto a responsável pela supervisão das informações trocadas pelo operador e o programa executivo, monitorando, na maioria dos casos, todos os passos desta comunicação e enviando mensagens de advertência quando a tentativa de uma operação comprometer os bancos de dados já existentes, facilitando a operação do programa e reduzindo a possibilidade de erros introduzidos pelo operador.

CAPÍTULO V  
DESENVOLVIMENTO DE UNIDADES MODULARES

## V.1. INTRODUÇÃO

Com o objetivo de avaliar o desempenho do programa executivo desenvolvido, foi elaborado um conjunto de unidades modulares simplificadas, representativas de equipamentos de uso frequente pela indústria química. Cada unidade foi considerada de modo simplificado, visando apenas o objetivo de testar a transferência de informações entre o programa e as unidades modulares e avaliar a flexibilidade do programa proposto.

As unidades modulares desenvolvidas referem-se aos seguintes equipamentos: misturador adiabático, divisor de corrente, separador e termostato, os quais serão descritos nas próximas seções.

## V.2. MISTURADOR ADIABÁTICO - MIT

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 à 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 de 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 resultante igual à média ponderal das temperaturas das correntes de entrada.

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 V.1.

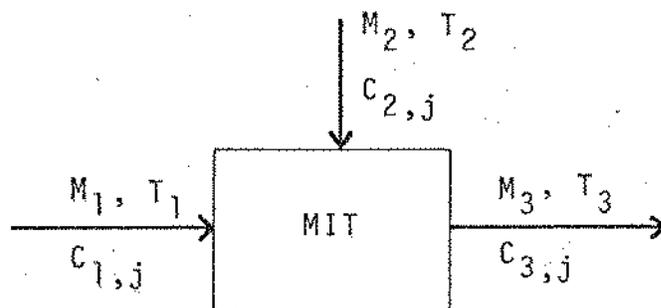


Figura V.1 - Misturador Adiabático

onde  $M_i$  é a vazão mássica da corrente  $i$ ,  $T_i$  a temperatura da corrente  $i$  e  $C_{i,j}$  a composição do componente  $j$  na corrente  $i$ .

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

$$M_R = \sum_{i=1}^n M_i$$

$$C_{R,j} = \frac{\sum_{i=1}^n M_i C_{i,j}}{\sum_{i=1}^n M_i}$$

$$T_R = \frac{\sum_{i=1}^n M_i T_i}{\sum_{i=1}^n M_i}$$

onde  $M_R$ ,  $T_R$  e  $C_{R,j}$  são, respectivamente, a vazão, temperatura e concentração do componente  $j$  na corrente resultante.

### V.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 do 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 V.2.

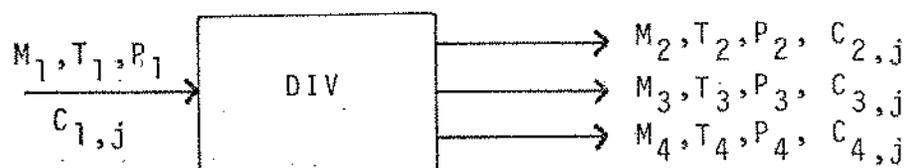


Figura V.2 - Representação Esquemática da Unidade Modular DIV

onde  $M_i$ ,  $T_i$ ,  $P_i$ ,  $C_{i,j}$  correspondem à vazão, temperatura, pressão e composição do componente  $j$  na corrente  $i$ , respectivamente.

Na confecção da modelagem, as seguintes equações de balanço foram utilizadas:

$$M_e = \sum_{i=1}^n M_{si}$$

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

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

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

$$M_{si} = fdi M_e$$

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

#### V.4. SEPARADOR - SEP

Num grande número de processos da indústria química, é frequente a obtenção de produtos desejados em soluções com produtos indesejados, como por exemplo um reator onde se processa uma reação cuja conversão não é 100%, sendo necessária a separação do produto dos reagentes, ou ainda, quando ocorre a formação de produtos secundários e estes devem ser separados.

A operação de separação usualmente é realizada por um processo de destilação, extração ou absorção, entre outros, sendo que, para efeito da modelagem destes processos, no presente trabalho, estes serão enfocados considerando-se simplificada-mente apenas os fatores de separação de cada componente, relativos à corrente do topo e fundo.

Após o operador definir a corrente de topo entre as duas correntes de saída da unidade SEP, ele deverá fornecer os fatores de separação de cada componente para a corrente de

topo. O somatório dos fatores de separação para cada componente deve ser igual à unidade.

A representação esquemática desta unidade pode ser vista na Figura V.3.

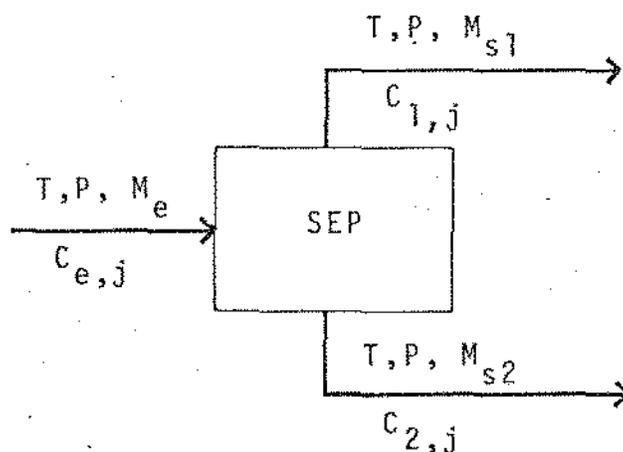


Figura V.3 - Representação Esquemática da Unidade Modular Separador - SEP

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

$$M_e = \sum_{i=1}^n M_{s,i}$$

$$M_{s,i} = \sum_{j=1}^n F_{si,j} C_{e,j} M_e$$

$$C_{i,j} = \frac{F_{si,j} C_{e,j} M_e}{M_{s,i}}$$

onde  $M_e$  corresponde à vazão mássica da corrente de entrada e  $M_{s,i}$  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  $C_{i,j}$  é a concentração do componente  $j$  na corrente  $i$ .

#### V.5. 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 V.4.



Figura V.4 - 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:

$$M_e = M_s ; P_e = P_s ; C_{ei,j} = C_{si,j}$$

onde  $M$ ,  $P$ ,  $T$  e  $C_{i,j}$  representam a vazão mássica, pressão, temperatura e composição do componente  $j$  na corrente  $i$ , respectivamente.

Os programas correspondentes às unidades modulares propostas nesta seção encontram-se no Apêndice .

Embora os modelos dos equipamentos propostos tenham sido tratados de modo simplificado, estes serão usados para compor diversas malhas de processos químicos hipotéticos, envolvendo diferentes configurações de reciclo, as quais serão estudadas no próximo capítulo, visando a verificação do programa executivo proposto.

## CAPÍTULO VI

### SIMULAÇÃO DE PROCESSOS UTILIZANDO O PROGRAMA EXECUTIVO PROPOSTO

## VI.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados da simulação de um conjunto de processos químicos obtidos a partir do programa executivo desenvolvido.

O conjunto de processos químicos estudado foi construído com as unidades modulares descritas no capítulo anterior, onde, em cada processo, diferentes malhas de ciclos foram consideradas, assim como procurou-se variar a conexão entre as diversas unidades modulares construídas.

A construção deste conjunto de processos tem como objetivo testar todas as fases do programa executivo proposto.

## VI.2. UNIDADE PARA SEPARAÇÃO DOS PRODUTOS DA REAÇÃO DE PIROLÍSE TERMO-OXIDATIVA DO METANO

Este processo foi escolhido para testar as etapas do programa executivo proposto até a determinação da seqüência de cálculo, posto que, algumas das unidades modulares constantes deste processo não foram ainda desenvolvidas.

O grande entrelaçamento das malhas de ciclos existentes no processo considerado permitirá avaliar a flexibilidade do programa na determinação das diversas malhas de ciclos existentes, das correntes de corte e da seqüência de cálculo das diferentes unidades.

O fluxograma do processo em estudo (P. Belov, 1970) e os resultados apresentados pelo programa podem ser vistos na Figura VI.1 e Quadro VI.1, respectivamente.

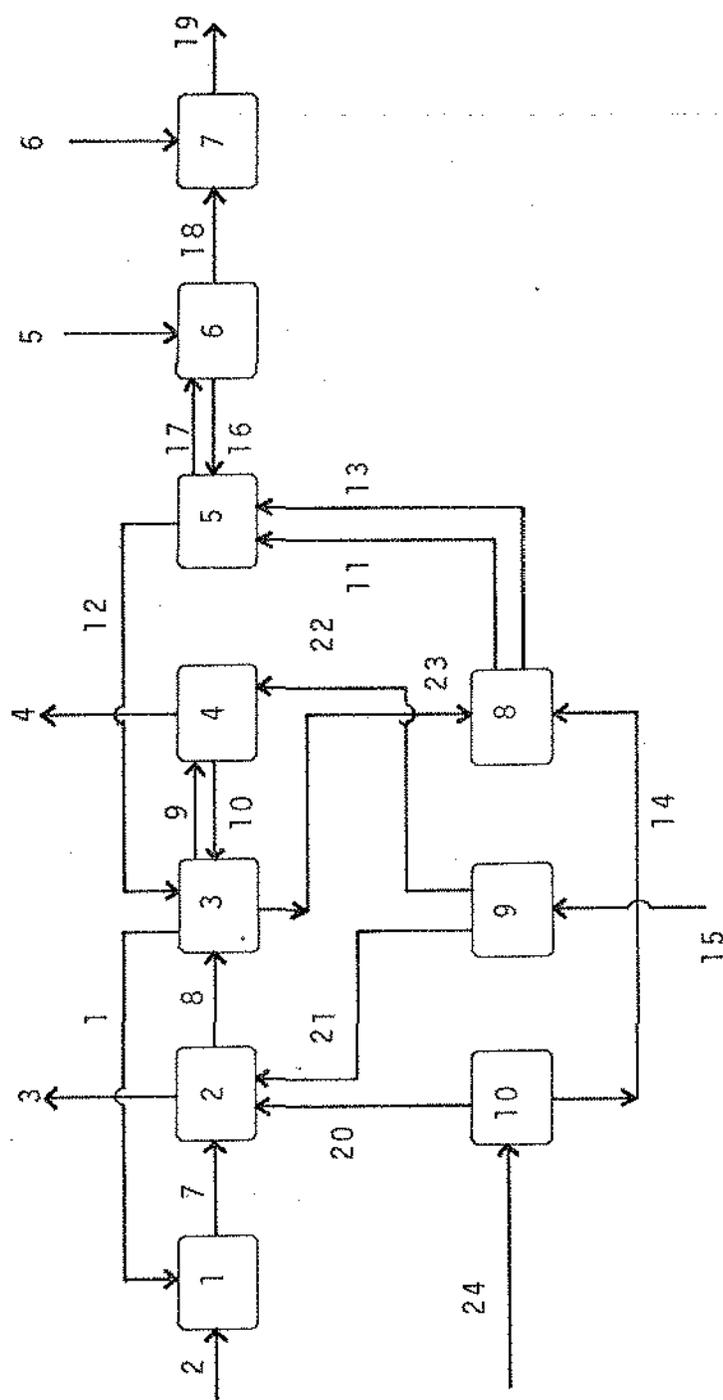


Figura VI.1 - Fluxograma da Unidade de Separação dos Produtos da Reação de Pirólise Termoxidativa do Metano

## \* MATRIZ DO PROCESSO

UNIDADE	MÓDULO	CORRENTES ASSOCIADAS
1	MIST01	2 1 -7 0 0 0 0
2	ABS01	7 20 21 -3 -6 0 0
3	SEP01	-1 8 12 10 -9 -23 0
4	LAV01	9 -10 22 -4 0 0 0
5	SEP02	-12 11 13 16 -17 0 0
6	LAV02	17 5 -16 -18 0 0 0
7	MIST02	18 6 -19 0 0 0 0
8	TELD1	23 14 -11 -13 0 0 0
9	MIST03	15 -21 -22 0 0 0 0
10	MIST03	24 -20 -14 0 0 0 0

Quadro VI.1 - Resultados obtidos para a Unidade de Separação dos Produtos da Reação de Pirólise Termo-Oxidativa do Metano

## \* MATRIZ INCIDENTE

UNIDADE	CORRENTE																								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	
1	1	1	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	-1	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0
3	-1	0	0	0	0	0	0	1	-1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0
4	0	0	0	-1	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	1	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	-1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	-1	-1	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	1	0

Quadro VI.1 - Continuação

## \* MATRIZ CONEXAD DAS CORRENTES

CORRENTE	DA UNIDADE	PARA UNIDADE
1	3	1
2	0	1
3	2	0
4	4	0
5	0	6
6	0	7
7	1	2
8	2	3
9	3	4
10	4	3
11	8	5
12	5	3
13	8	5
14	10	8
15	0	9
16	6	5
17	5	6
18	6	7
19	7	0
20	10	2
21	9	2
22	9	4
23	3	8
24	0	10

Quadro VI.1 - Continuação

## \* MATRIZ ADJACENCIA

DA UNIDADE	PARA UNIDADE									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
3	1	0	0	1	0	0	0	1	0	0
4	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0
6	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
9	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
10	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0

Quadro VI.1 - Continuação

## MATRIZ CIRCUITO(NOS)

```

1 # 2 # 3 #
3 # 4 #
3 # 8 # 5 #
5 # 6 #

```

## Correntes de Corte

CORRENTE NUMERO 7

CORRENTE NUMERO 9

CORRENTE NUMERO 23

CORRENTE NUMERO 17

## Sequencia de calculo :

Orden de calculo	Unidade numero	Unidade modular
1	6	LAV02
2	9	RIST03
3	10	RIST03
4	2	ABS01
5	4	LAV01
6	7	RIST02
7	8	TCL01
8	5	SEP02
9	3	SEP01
10	1	RIST01

Quadro VI.1 - Continuação

### VI.3. PROCESSO I: MISTURADOR - DIVISOR DE CORRENTES

Este processo é composto de duas unidades modulares: MIT e DIV, já descritas no capítulo anterior.

Na simulação deste processo, a temperatura, pressão e a composição foram mantidas constantes, sendo analisada a variação da vazão.

O fluxograma referente ao Processo I é apresentado na Figura VI.2.

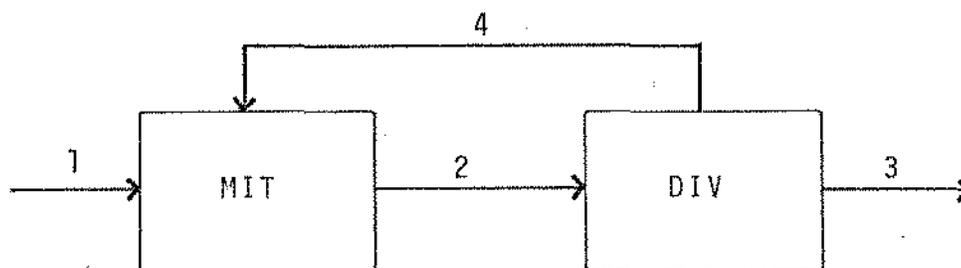


Figura VI.2 - Fluxograma referente ao Processo I.

O Quadro VI.2 apresenta os resultados da simulação do Processo I, mostrando as Matrizes do Processo, Incidente, Conexão das Correntes, de Adjacências, Circuito (Nós) e Circuito (Correntes), informações sobre a corrente de entrada, correntes de corte, valores iniciais das correntes de corte, seqüência de cálculo, acesso de parâmetros, assim como os resultados do primeiro e último ciclo de cálculo e os valores das variáveis das correntes do processo.

### VI.4. PROCESSO II: MISTURADOR - DIVISOR - MISTURADOR - DIVISOR DE CORRENTES

## \* MATRIZ DO PROCESSO

UNIDADE	MODULE	CORRENTES ABEOLJADAS
1	MIT	1 4 -2
2	DIV	2 -3 -4

## Informações da Corrente de estudo do Processo

CORRENTE NUMERO 1

Vazão Massica (Kg/s): 100

Temperatura (K): 300

Pressão (Kgf/m<sup>2</sup>): 1

Número de componentes: 2

Nome do Componente: Fração Mássica

H<sub>2</sub>O ..... 0.5H<sub>2</sub>O ..... 0.5

Quadro VI.2 - Resultados obtidos para o Processo I

MATRIZ CIRCUITO(NOS)

1 # 2 #

MATRIZ CIRCUITO(CORRENTE)

2 # 4 #

Correntes de corte

2 #

### Valores iniciais da Corrente de Corte

CORRENTE NUMERO 2

Vazao Massica (Kg/s): 100

Temperatura (K): 300

Pressao (Kg/cm<sup>2</sup>): 1

Numero de componentes: 2

Nome do Componente: Fração Mássica

H<sub>2</sub>O: .5

H<sub>3</sub>CO<sub>3</sub>: .5

Sequencia de calculo :

Orden de calculo	Unidade numero	Unidade modular
1	2	DIV
2	1	RET

Quadro VI.2 - Continuação

## Acesso de Parâmetros

## Unidade nº 2 - DIV

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -3 7

.3

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -4 7

.7

## Unidade nº 1 - MIT

Não há Parâmetros

## Resultado do primeiro ciclo de cálculo

IT. Nº. 1

QUAL A TOLERANCIA (%) NA CONVERGENCIA :

VAZAO ... 1

TEMPERATURA ... 1

PRESSAO ... 1

COMPOSICAO ... 1

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$\frac{(VI - VC) \cdot VI}{100}$
VAZAO	170	170	41.1764726
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.5	.5	0
H2OCH2OH	.5	.5	0

Quadro VI.2 - Continuação

## Resultado do último ciclo de cálculo

IT.Nº.14

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) * 100$
VAZAO	329.398395	331.750013	.739091641
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.5	.5	0
H3CON2OH	.5	.5	0

EXECUCAO TERMINADA APORTE QUALQUER TECLA PARA A APRESENTACAO DOS RESULTADOS  
 DESEJA OS RESULTADOS DE QUALCORRENTE?

Quadro VI.2 - Continuação

## Valores das variáveis das Correntes do Processo

Corrente nº	Vazão (Kg/s)	Temperatura (K)	Pressão (Kgf/m <sup>2</sup> )	Composição (%)	
				H <sub>2</sub> O	H <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> OH
1	100,000	300	1	0,5	0,5
2	331,751	300	1	0,5	0,5
3	99,322	300	1	0,5	0,5
4	231,751	300	1	0,5	0,5

Quadro VI.2 - Continuação

O Processo II é composto por quatro unidades modulares, sendo dois misturadores e dois divisores de correntes alternados, envolvendo duas malhas de recíolos.

Neste processo, como no anterior, somente será analisada a variação da vazão, sendo as demais variáveis consideradas constantes.

O fluxograma referente ao Processo II é apresentado na Figura VI.3.

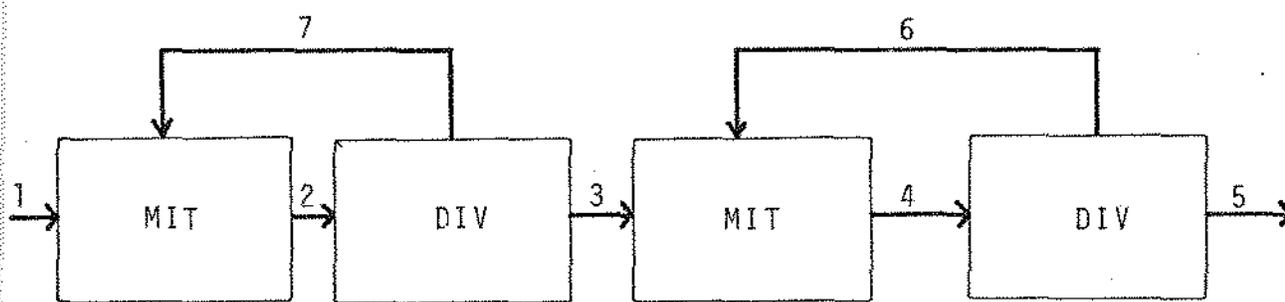


Figura VI.3 - Fluxograma correspondente ao Processo II.

Os resultados da simulação do Processo II são apresentados no Quadro VI.3.

#### VI.5. PROCESSO III: MISTURADOR - SEPARADOR - DIVISOR DE CORRENTES

Neste processo, composto por três unidades modulares (MIT, SEP e DIV) e uma malha de reciclo, serão analisadas as variações da vazão e composição das correntes do processo.

O fluxograma referente ao Processo III é apresentado na Figura VI.4, sendo os resultados da simulação deste processo mostrados no Quadro VI.4.

## \* MATRIZ DO PROCESSO

UNIDADE	MODULO	CORRENTES ASECOCIADAS
1	RIT	1 7 -2
2	DIV	2 -3 -7
3	RIT	3 6 -4
4	DIV	4 -6 -5

## \* MATRIZ INCIDENTE

UNIDADE	CORRENTE						
	1	2	3	4	5	6	7
1	1	-1	0	0	0	0	1
2	0	1	-1	0	0	0	-1
3	0	0	1	-1	0	1	0
4	0	0	0	1	-1	-1	0

Quadro VI.3 - Resultados obtidos para o Processo II

## \* MATRIZ CONEXÃO DAS CORRENTES

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

## \* Matriz de Adjacências

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

Quadro VI.3 - Continuação

## Informações da corrente de entrada do processo

CORRENTE NUMERO 1

Vazão Massica (Kg/s): 100

Temperatura (K): 300

Pressão (Kg/cm<sup>2</sup>): 1

Numero de componentes: 2

Nome do Componente Fração mássica

H<sub>2</sub>O ..... 5

H<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>H ..... 5

MATRIZ CIRCUITO(NOS)

1 2 3  
3 4 5

MATRIZ CIRCUITO(CORRENTE)

2 7 8  
4 6 9

Correntes de corte

2 4 5

## Valores iniciais das correntes de corte

	CORRENTE NUMERO 2	CORRENTE NUMERO 4
Vazao Massica (Kg/s) :	100	100
Temperatura (K) :	300	300
Pressao (Kgf/m <sup>2</sup> ) :	1	1
Numero de componentes : 2	Frção mássica	
Nome do Componente		
H <sub>2</sub> O	.5	.5
H <sub>3</sub> CO <sub>3</sub> ZOH	.5	.5

## Sequencia de calculo :

Orden de calculo	Unidade numero	Unidade modular
1	2	DIV
2	4	DIV
3	1	RIT
4	3	RIT

Quadro VI.3 - Continuação

## Acesso de parâmetros

## Unidade nº 2 - DIV

QUAL O FATOR DE DIVISÃO DA CORRENTE -2 ?  
.3

QUAL O FATOR DE DIVISÃO DA CORRENTE -3 ?  
.7

## Unidade nº 4 - DIV

QUAL O FATOR DE DIVISÃO DA CORRENTE -6 ?  
.2

QUAL O FATOR DE DIVISÃO DA CORRENTE -5 ?  
.8

## Unidade nº 1 - MIT

Não há parâmetros

## Unidade nº 3 - MIT

Não há parâmetros

## Resultado do primeiro ciclo de cálculo

II.NO.1

QUAL A TOLERANCIA (%) NA CONVERGENCIA :

VAZAO ... 1

TEMPERATURA ... 1

PRESSAO ... 1

COMPOSICAO ... 1

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) * 100$
VAZAO	100	130	23.0769231
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.5	.5	0
H3CCH2OH	.5	.5	0

CORRENTE DE CORTE 4 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) * 100$
VAZAO	100	90	11.1111111
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.5	.5	0
H3CCH2OH	.5	.5	0

Quadro VI.3 - Continuação

## Resultado do último ciclo de cálculo

II.Nº.1

## CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$(VI - VC) / VI \times 100$
VAZAO	141.7467	142.854331	.801957412
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.5	.5	0
H3CCN2OH	.5	.5	0

## CORRENTE DE CORTE 4 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$(VI - VC) / VI \times 100$
VAZAO	123.811655	124.981821	.936114942
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.5	.5	0
H3CCN2OH	.5	.5	0

EXECUCAO TERMINADA APORTE QUALQUER TECLA PARA A APRESENTACAO DOS RESULTADOS

Quadro VI.3 - Continuação

## Valores das variáveis das Correntes do Processos

Corrente nº	Vazão (Kg/s)	Temperatura (K)	Pressão (Kgf/m <sup>2</sup> )	Composição (%)	
				H <sub>2</sub> O	H <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> OH
1	100,000	300	1	0,5	0,5
2	142,854	300	1	0,5	0,5
3	99,993	300	1	0,5	0,5
4	124,981	300	1	0,5	0,5
5	99,950	300	1	0,5	0,5
6	24,988	300	1	0,5	0,5
7	42,854	300	1	0,5	0,5

Quadro VI.3 - Continuação

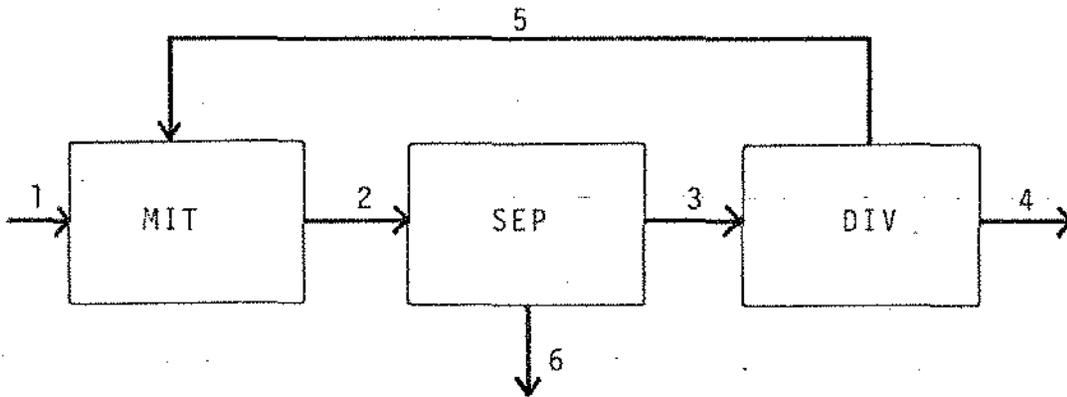


Figura VI.4 - Fluxograma referente ao Processo III

#### VI.6. PROCESSO IV: MISTURADOR - DIVISOR - SEPARADOR

Neste processo, composto por três unidades modulares (MIT, DIV e SEP) e duas malhas de reciclos, serão analisadas as variações de vazão e composição das correntes do processo.

As unidades modulares constantes do Processo IV são as mesmas do processo anterior, sendo neste caso alterada a conexão entre as unidades modulares.

A Figura VI.5 mostra o fluxograma do Processo IV, sendo os resultados da simulação deste processo apresentados no Quadro VI.5.

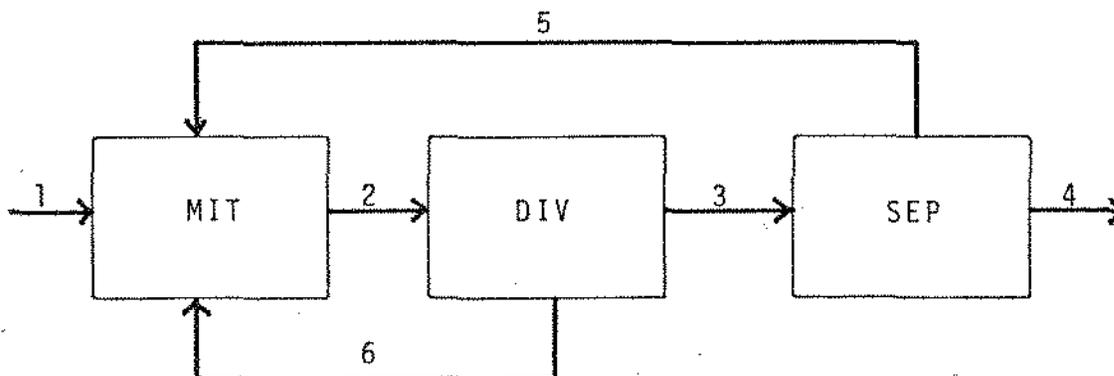


Figura VI.5 - Fluxograma referente ao Processo IV

## \* MATRIZ DO PROCESSO

UNIDADE	MODULO	CORRENTES ASSOCIADAS
1	III	1 5 -2
2	SEP	2 -3 -6
3	OIV	3 -4 -5

## VALORES INICIAIS DAS CORRENTES DE ENTRADA

## CORRENTE NUMERO 1

Vazao Massica (Kg/s) : 100

Temperatura (K).....: 300

Pressao (Kgf/m2).....: 1

Numero de componentes.: 3

Nome do Componente    Fracao massica

H2O

.8

H3CCH2OH

.15

H3CCOOH

.05

Quadro VI.4 - Resultados obtidos para o Processo III

MATRIZ CIRCUITO(NOS)

1 2 3 4

MATRIZ CIRCUITO(CORRENTE)

2 3 4 5 6

Correntes de corte

2 6

VALORES INICIAIS DAS CORRENTES DE CORTE

CORRENTE NUMERO 2

Vazao Massica (Kg/s) : 100

Temperatura (K).....: 300

Pressao (Kgf/m<sup>2</sup>).....: 1

Numero de componentes.: 3

Nome do Componente    Fracao massica

H <sub>2</sub> O	.8
H <sub>3</sub> COH <sub>2</sub> O	.15
H <sub>3</sub> COOH	.05

Quadro VI.4 - Continuação

Sequencia de calculo :

Orden de calculo	Unidade numero	Unidade modular
1	2	SEP
2	3	DIV
3	1	MIT

Acesso de Parâmetros

Unidade nº 2 - SEP

QUAL A CORRENTE DE TOPO -3 DU -6

COMPONENTES<sup>-6</sup> FATORES DE SEPARACAO

H2B ..... .4

H3CC20H ..... .8

H3CC00H ..... .2

Unidade nº 3 - DIV

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -4 ?

.8

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -5 ?

.2

Unidade nº 1 - MIT

Não há Parâmetros

Quadro VI.4 - Continuação

## Resultado do primeiro ciclo de cálculo

## IT.NO.1

QUAL A TOLERANCIA (%) NA CONVERGENCIA :

VAZAO ... 5  
 TEMPERATURA ... 5  
 PRESSAO ... 5  
 COMPOSICAO ... 5

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) \times 100$
VAZAO	100	111	11
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.8	.807207207	.900000821
H3CCH2OH	.15	.148540541	6.30630601
H3CCOOH	.05	.0522522522	4.50450441

## Resultado do último ciclo de cálculo

## IT.NO.3

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) \times 100$
VAZAO	100.902	112.46368	3.27053678
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.8	.808174159	1.02176986
H3CCH2OH	.145270271	.138933387	4.36213406
H3CCOOH	.0513926408	.0528924538	2.91832647

EXECUCAO TERMINADA APORTE QUALQUER TECLA PARA A APRESENTACAO DOS RESULTADOS  
 DESEJA OS RESULTADOS DE QUALCORRENTE?

Quadro VI.4 - Continuação

## Valores das variáveis das Correntes do Processo

Corrente nº	Vazão (Kg/s)	Temperatura (K)	Pressão (Kgf/m <sup>2</sup> )	Composição (%)		
				H <sub>2</sub> O	H <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> OH	H <sub>3</sub> CCOOH
1	100,000	300	1	0,8	0,15	0,05
2	112,464	300	1	0,808	0,139	0,053
3	62,3184	300	1	0,874	0,050	0,076
4	49,855	300	1	0,874	0,050	0,076
5	12,464	300	1	0,874	0,050	0,076
6	49,986	300	1	0,726	0,250	0,024

Quadro VI.4 - Continuação

## \* MATRIZ DO PROCESSO

UNIDADE	MODULO	CORRENTES ASSOCIADAS
1	KIT	1 5 6 -2
2	DIV	2 -3 -6 0
3	SEP	3 -4 -5 0

## VALORES INICIAIS DAS CORRENTES DE ENTRADA

## CORRENTE NUMERO 1

Vazao Massica (Kg/s) : 100

Temperatura (K)..... : 360

Pressao (Kg/cm<sup>2</sup>)..... : 1

Numero de componentes : 2

Nome do Componente    Fracao massica

H2O

.8

H3CCN2OH

.2

Quadro VI.5 - Resultado obtido para o Processo IV

## MATRIZ CIRCUITO(NOS)

1 2 3 4  
1 2 4

## MATRIZ CIRCUITO(CORRENTE)

2 3 5 6  
2 6 4

## Correntes de corte

2 4

## VALORES INICIAIS DAS CORRENTES DE CORTE

## CORRENTE NUMERO 2

Vazao Massica (Kg/s) : 100

Temperatura (K) : 300

Pressao (Kgf/m<sup>2</sup>) : 1

Numero de componentes : 2

Nome do Componente Fracao massica

H2O

.8

H3CCH2OH

.2

Quadro VI.5 - Continuação

Sequencia de calculo :

Orden de calculo	Unidade numero	Unidade modular
1	2	DIV
2	3	SEP
3	1	MIT

Acesso de Parâmetros

Unidade nº 2 - DIV

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -3 ?  
 .8  
 QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -6 ?  
 .2

Unidade nº 3 - SEP

QUAL A CORRENTE DE TOPO -4 OU -5

COMPONENTES	FATORES DE SEPARACAO
H20	.4
H3CCH2OH	.8
H3CCOOH	1

Unidade nº 1 - MIT

Não há Parâmetros

Quadro VI.5 - Continuação

## Resultado do primeiro ciclo de cálculo

IT.NO.1

QUAL A TOLERANCIA (%) NA CONVERGENCIA :

VAZAO ... 3

TEMPERATURA ... 3

PRESSAO ... 3

COMPOSICAO ... 3

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) * 100$
VAZAO	160	161.6	61.6
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.8	.831683168	3.94837606
H3CCN2OH	.2	.168316832	15.841584

## Resultado do último ciclo de cálculo

IT.NO.10

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) * 100$
VAZAO	271.513972	277.65592	2.26211121
TEMP.	300	300	0
PRES.	1	1	0
H2O	.863881144	.887452107	2.72861497
H3CCN2OH	.115173278	.112547893	2.27958581

EXECUCAO TERMINADA APORTE QUALQUER TECLA PARA A APRESENTACAO DOS RESULTADOS  
DESEJA OS RESULTADOS DE QUALCORRENTE?

Quadro VI.5 - Continuação

## Valores das variáveis das Correntes do Processo

Corrente nº	Vazão (Kg/s)	Temperatura (K)	Pressão (Kgf/m <sup>2</sup> )	Composição φ (%)	
				H <sub>2</sub> O	H <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> OH
1	100,000	300	1	0,800	0,200
2	277,656	300	1	0,887	0,113
3	220,771	300	1	0,887	0,113
4	98,308	300	1	0,797	0,203
5	122,463	300	1	0,959	0,040
6	55,193	300	1	0,887	0,113

Quadro VI.5 - Continuação

### VI.7. PROCESSO V: MISTURADOR - DIVISOR - TERMOSTATO-SEPARADOR

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

A Figura VI.6 apresenta o fluxograma do Processo V, sendo os resultados da simulação deste processo mostrados no Quadro VI.6.

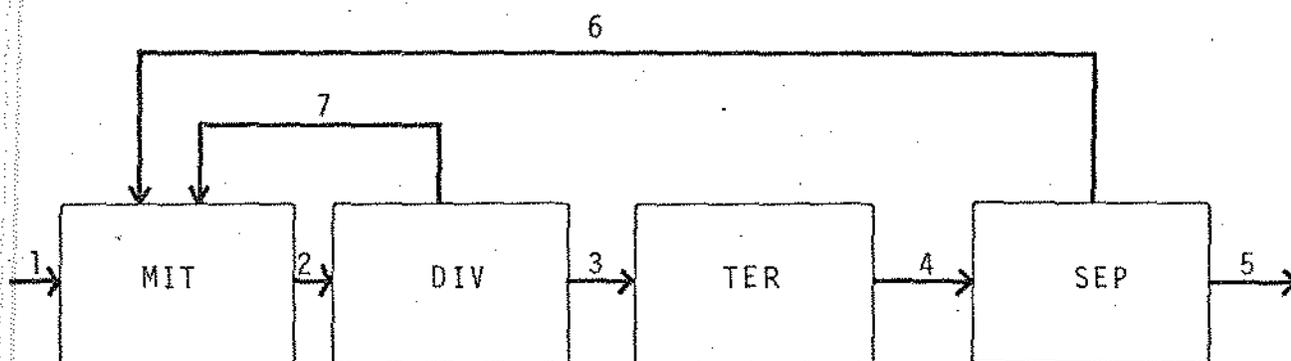


Figura VI.6 - Fluxograma referente ao Processo V

Através de exemplos propostos para testar as diversas fases do programa executivo, pode-se verificar que este se apresenta apropriado para o uso em microcomputadores, é de fácil operação e de grande flexibilidade.

## \* MATRIZ DO PROCESSO

UNIDADE	MODULO	CORRENTES ASSOCIADAS
1	RET	1 6 7 -2
2	DIV	2 -3 -7 0
3	TER	3 -4 0 0
4	SEP	4 -5 -6 0

## VALORES INICIAIS DAS CORRENTES DE ENTRADA

CORRLATE NUMERO 1

Vazao Massica (Kg/s) : 100

Temperatura (K).....: 300

Pressao (kgf/m<sup>2</sup>).....:1

Numero de componentes : 2

Nome do Componente Fracao massica

H2O

.7

N3CCN2OH

.3

Quadro VI.6 - Resultados obtidos para o Processo V

## MATRIZ CIRCUITO(NOS)

```

1  2  3  4  5
1  2  3

```

## MATRIZ CIRCUITO(CORRENTE)

```

2  3  4  5  6  7
2  7  8

```

## Correntes de corte

```

2  8

```

## VALORES INICIAIS DAS CORRENTES DE CORTE

## CORRENTE NUMERO 2

Vazao Massica (Kg/s) : 100

Temperatura (K).....: 300

Pressao (Kgf/m2).....: 1

Numero de componentes : 2

Nome do Componente    Fracao massica

H2O	.8
H3COH	.2

Quadro VI.6 - Continuação

Sequencia de calculo :

Ordem de calculo	Unidade numero	Unidade modular
1	2	DIV
2	3	TER
3	4	SEP
4	1	MIT

Acesso de Parâmetros

Unidade nº 2 - DIV

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -3 ?

.8

QUAL O FATOR DE DIVISAO DA CORRENTE -7 ?

.2

Unidade nº 3 - TER

QUAL O VALOR DA TEMPERATURA DA CORENTE -4

480

Unidade nº 4 - SEP

QUAL A CORRENTE DE TOPO -5 OU -6

-5

COMPONENTES      FATORES DE SEPARACAO

H20

.6

H3CCH2OH

.7

Unidade nº 1 - MIT

Não hã Parâmetros

Quadro VI.6 - Continuação

## Resultado do primeiro ciclo de cálculo

IT.NO.1

QUAL A TOLERANCIA (Z) NA CONVERGENCIA :

VAZAO ... 5

TEMPERATURA ... 5

PRESSAO ... 5

COMPOSICAO ... 5

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) * 100$
VAZAO	100	150.372524	50.372524
TEMP.	300	320.198187	6.73272902
PRES.	1	1	0
H2O	.8	.741425974	7.32175325
N3CCH2OH	.2	.258574026	29.287013

## Resultado do último ciclo de cálculo

IT.NO.7

CORRENTE DE CORTE 2 SENDO ANALISADA

	VI	VC	$((VI - VC) / VI) * 100$
VAZAO	195.031829	200.666009	2.89385154
TEMP.	327.839156	337.707597	3.01014715
PRES.	1	1	0
H2O	.770712987	.7529079	2.36210979
N3CCH2OH	.243005476	.2474921	1.84630575

EXECUCAO TERMINADA APORTE QUALQUER TECLA PARA A APRESENTACAO DOS RESULTADOS  
 DESEJA OS RESULTADOS DE QUALCORRENTE?

Quadro VI.6 - Continuação

## Valores das variáveis das Correntes do Processo

Corrente nº	Vazão (Kg/s)	Temperatura (K)	Pressão (Kgf/m <sup>2</sup> )	Composição (%)	
				H <sub>2</sub> O	H <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> OH
1	100,000	300,000	1	0,700	0,300
2	200,666	377,708	1	0,753	0,248
3	159,874	337,452	1	0,752	0,248
4	159,874	400,000	1	0,797	0,203
5	99,177	400,000	1	0,770	0,230
6	60,700	400,000	1	0,839	0,161
7	39,969	337,452	1	0,753	0,248

Quadro VI.6 - Continuação

CAPÍTULO VII  
CONCLUSÕES E SUGESTÕES

## VII.1 - CONCLUSÕES

O presente trabalho objetiva o estudo da estrutura e das diferentes etapas que constituem um programa executivo, bem como o desenvolvimento de um programa executivo, para a simulação de processos químicos, adequado ao uso em microcomputadores.

Para o desenvolvimento do programa proposto, foi escolhida a estrutura modular, por ser esta a mais flexível, possibilitando que novas unidades modulares sejam incorporadas para ampliação do programa, permitindo a simulação de novos processos, como também, o uso racional da memória RAN disponível nos microcomputadores.

Uma forma dirigida para o acesso das informações dos processos químicos a serem simulados foi criada permitindo, ao programa, identificar inconsistência de dados, advertindo o operador através de mensagens e, na maioria dos casos, permitindo a correção, minimizando, deste modo, erros na fase de entrada de dados.

A topologia do processo é fornecida ao programa executivo através de uma forma matricial, Matriz do Processo, a partir da qual três outras matrizes são criadas (Matrizes Incidente, Conexão das Correntes e de Adjacências) permitindo, juntamente com os algoritmos desenvolvidos, a determinação das correntes de entrada, identificação da presença de ciclos, determinação da corrente de corte para abertura dos ciclos e da seqüência de cálculos. Os algoritmos para as finalidades expostas acima foram testados exhaustivamente, mostran

do-se eficazes aos propósitos desejados e dispendendo pouco tempo de execução.

A estrutura proposta para o desenvolvimento das unidades modulares ofereceu ao programa facilidade de operação, dispensando codificações e uso de palavras chaves para o acesso de parâmetros, bem como mostrou-se eficaz na correspondência entre o fluxo de informações das unidades modulares, o programa executivo e a memória auxiliar.

Os relatórios intermediários, emitidos nas diversas etapas de cálculo, facilitam o acompanhamento da simulação do processo pelo operador.

A estrutura auxiliar proposta permite o acesso, pelo usuário, a todas as informações do programa executivo, como também permite a criação, modificação e destruição de arquivos, sendo estas atividades monitoradas pelo programa, evitando deste modo que seja avariada a "memória" dos arquivos existentes.

Através dos exemplos descritos, pode-se verificar que o programa desenvolvido atende aos objetivos propostos.

## VII.2 - SUGESTÕES

O desenvolvimento de unidades modulares a partir de modelos matemáticos acurados, representativos dos processos da indústria química, é fundamental para a utilização aplicada do programa.

A construção de bancos de dados de propriedades físicas e químicas, bem como a construção de sub-rotinas de predi

ção destas propriedades, constituem-se em uma etapa importan  
te para a simulação dos diferentes processos químicos.

APÊNDICE A

Relação entre código, nome, conteúdo e tipo dos arquivos pertencentes ao sistema.

NÚMERO	NOME DO ARQUIVO	CONTEÚDO	TIPO
I	ARQ.EXISTENTES	Nome dos Arquivos existentes	Sequencial
II	SUB-PROG.EXIST	Nome das Unidades Modulares Existentes	Sequencial
III	MATPROCS#72	Matriz do Processo	Randômico L=72
IV	MATPROCS.S	Número das Unidades e Correntes Associadas	Sequencial
V	MATINCID.S	Matriz Incidência	Sequencial
VI	MATCONX.S	Matriz Conexão das Correntes	Sequencial
VII	MATADJ.S	Matriz de Adjacências	Sequencial
VIII	QTPNC#900	Vazão, Temperatura, Pressão, nº Componentes	Randômico L=900
IX	COMPONENTES#200	Nome dos Componentes	Randômico L=200
X	FRAMOL#500	Concentração Título (%)	Randômico L=500
XI	VICQTPNC#900	Valor Inicial das Correntes: Vazão, Temperatura, Pressão, nº Comp.	Randômico L=900
XII	VICCOMPONENTES#200	Valor Inicial, Nome dos componentes	Randômico L=200
XIII	VICFRAMOL#500	Valor Inicial Concentrações % Título	Randômico L=500
XIV	CORCORTE	Correntes de Corte	Sequencial
XV	SEQCAL#5	Seqüência de Cálculo	Randômico L=5
XVI	PARÂMETRO#90	Parâmetros das Unidades Modulares	Randômico L=90
XVII	TOLERÂNCIA	Tolerâncias para Convergência	Sequencial
XVIII	MATCIRC#100	Matriz Circuitos	Randômico L=100

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Belov, P. - Fundamentals of Petroleum Chemicals Technology, Mir Publishers, Moscow, 1970.
2. Brannock, N.F., Vernevil, V.L. e Wang, Y.L. - "Process Simulation Program - A Comprehensive tool for Chemical Engineers", Comp. Chem. Eng., 3, 329, 1979.
3. Castier, M. e Rajagopal, K. - "Um Programa Executivo Para Simulação de Processos Químicos" - Anais do VI Congresso de Engenharia Química, 1984.
4. Crowe, C.M., Hamielec, A.E., Hoffman, T.W., Johnson, A.I., Shannon, P.T. e Woods, D.R. - Chemical Plant Simulation, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1971.
5. Evans, L.B. e Seider, W.D. - "The Requirements of an Advanced Computing System", Chem. Eng. Prog., 72, 80, 1976.
6. Flower, J.R. e Whitehead, B.D. - "Computer - Aided Design: A Survey of Flowsheeting Programs, Part I", Chem. Eng., London, 272, 208, 1973a - "Computer - Aided Design: A Survey of Flowsheeting Programs, Part 2", Chem. Eng., London, 273, 271, 1973b.
7. Gianoto, V.R. - "Estratégia de Cálculo para Processos Complexos", Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, 1983.
8. Kehat, E. e Shacham, M. - "Chemical Process Simulation Programs - 1", Process Technol., 18(1/2), 35, 1973a - "Chemical Process Simulation Programs - 2, Partitioning and Tearing System Flowsheets", Process Technol., 18(3), 115, 1973b - "Chemical Process Simulation Programs - 3,

- Solution System of Nonlinear Equations", Process Technol., 18(4/5), 181, 1973c.
9. Mañ, R.S.H. - "Recent Development in Process Design", Symp. on Basic Questions of Design Theory, Columbia Univ., New York, 1974.
  10. Motard, R.L. e Shacham, M. - "Steady State Chemical Process Simulation", AIChE Journal, 21, 417, 1975.
  11. Orbach, O. e Crowe, C.M. - "Convergence Promotion in the Simulation of Chemical Processes with Recycle - The Dominant Eigevalue Method", Can. J. Chem. Eng., 49, 509, 1971.
  12. Rosen, M.E. e Pauls, C.A. - "Computer - Aided Chemical Process Design: The FLOWTRAN System", Computers and Chemical Engineering, vol. 1, 11, 1977.
  13. Russel, R.A. - "Chemical Process Simulation - The GMB System", Comp. Chem. Eng., 4, 167, 1980.
  14. Seader, J.D. e Dallin, D.E. - "Interactive Graphical System - Computer Design of a Toluene Dealkylation Process", Chem. Eng. Computing, vol. 1, AIChE Workshop Series, 1972.
  15. Tiernan, J.C. - "An Efficient Search Algorithm to Find the Elementary Circuits of a Graph", Comm. ACM, 13, 722, 1970.