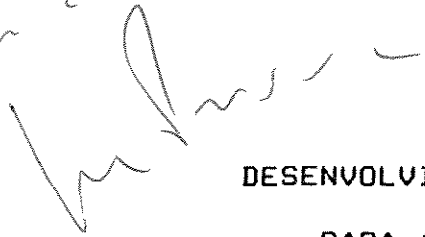


Este exemplar
corresponde à redação
final da tese defendida
por Marcelo Cardoso
em 29.08.1996



DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA EXECUTIVO
PARA ANÁLISE DE PLANTAS QUÍMICAS

Autor : Marcelo Cardoso \bar{n}
Orientador : João Alexandre F. R. ^{rocha} Pereira \bar{t}
Co-Orientador : Sergio Persio Ravagnani \bar{n}
Sergio Persio Ravagnani

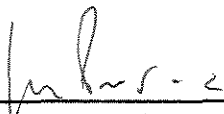
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS - UNICAMP
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA EXECUTIVO
PARA ANÁLISE DE PLANTAS QUÍMICAS

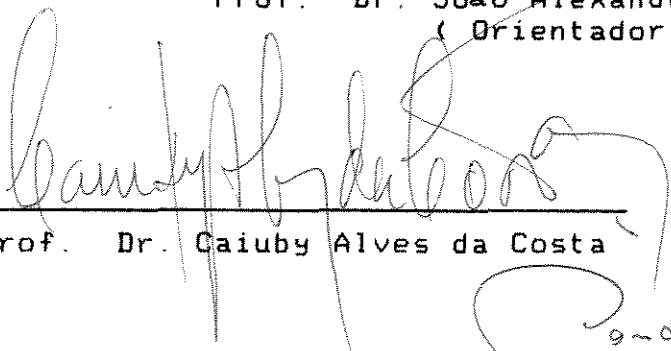
Autor : Marcelo Cardoso

Tese submetida à comissão de Pós-Graduação da
Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP como
parte dos requisitos necessários para a obtenção
do grau de "Mestre em Engenharia Química".

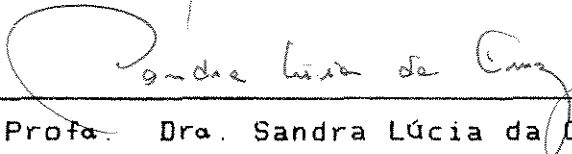
Aprovada por:



Prof. Dr. João Alexandre F. R. Pereira
(Orientador)



Prof. Dr. Caiuby Alves da Costa



Prof. Dra. Sandra Lúcia da Cruz

Campinas - SP - Brasil

29 de Agosto de 1991

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr João Alexandre F. R. Pereira pela dedicada orientação e apoio prestado durante a realização deste trabalho.

Ao Prof. Dr Sergio Persio Ravagnani pela grande colaboração e incentivo prestado.

Aos Amigos.

RESUMO

Neste trabalho foi desenvolvido um programa executivo para microcomputadores utilizando a técnica sequencial modular para análise de processos químicos em estado estacionário e tendo uma concepção estrutural flexível ao uso dos mais variados processos existentes.

Iniciando com a entrada de dados referente ao processo, isto é, localização de equipamentos e ligações existentes entre eles, o programa executivo é capacitado para verificar a presença de ciclos, identificar subsistemas existentes, determinar a sequência ótima de cálculo das unidades do processo, acessar os parâmetros das unidades modulares e gerenciar a execução dos cálculos automatizando as iterações (caso o sistema contenha ciclo) até que a tolerância admitida como critério de convergência seja atingida para cada subsistema.

A fim de testar o programa executivo foram desenvolvidas unidades modulares em estado estacionário, onde cada unidade procura representar um equipamento do processo e por sua vez estas são representadas por programas separados e independentes que podem ser simuladas separadamente ou gerenciadas pelo programa executivo. Na biblioteca de módulos estão arquivadas as seguintes unidades:

DIV (Divisor de fluxo);
MIT (Misturador adiabático e isotérmico);
REA (Reator adiabático e isotérmico);
SEPARADOR

DESTIL (Coluna de destilação);

SEP (Separador - módulo simplificado);

ABSORVEDOR

ABSORÇÃO (Coluna de absorção);

ABSI (Absorvedor - módulo simplificado);

TANQUE FLASH

FLASHF (Flash com cálculo do fator de vaporização);

FLASH (Flash módulo simplificado);

TER (Termostato), PRES (bomba ou compressor).

Quando necessário, é possível a criação de outros programas usando qualquer linguagem computacional para representar as unidades modulares a fim de somá-las às demais.

SUMÁRIO

RESUMO

	pág.
1 - INTRODUÇÃO	1
2 - ANÁLISE DA LITERATURA	3
2.1 - Introdução	4
2.2 - Terminologia	5
2.3 - Simuladores de Processos	5
2.4 - Técnicas de Simulação de Processos	8
2.4.1 - Cálculo Sequencial Modular	8
2.4.2 - Cálculo de Equações Orientadas	10
2.4.3 - Cálculo Simultâneo Modular	11
2.5 - Fatores que Distinguem os Simuladores Comerciais ..	12
2.6 - Perspectivas dos Simuladores Comerciais	14
2.7 - Programa Executivo em Simuladores Sequenciais	15
2.8 - Conclusão	19
3 - DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA EXECUTIVO	20
3.1 - Introdução	21
3.2 - Informações Básicas do Programa Executivo	22
3.3 - Estrutura do Programa Executivo	23
3.4 - Entrada de Dados	24
3.4.1 - Arquivo Referente ao Processo	24
3.4.2 - Dados Iniciais	26
3.4.3 - Matriz do Processo	27
3.5 - Cálculo das Matrizes	29
3.5.1 - Matriz Conexão das Correntes	30

3.5.2 - Matriz de Incidência	31
3.5.3 - Matriz de Adjacência	32
3.5.4 - Matriz de Dados	33
3.6 - Correntes de Entrada	33
3.6.1 - Identificação	33
3.6.2 - Introdução dos Valores das Propriedades ..	34
3.7 - Identificação do Sistema	35
3.7.1 - Sistema Aberto (Determinação da Ordem de Cálculo)	37
3.7.2 - Sistema com Reciclo	37
3.7.2.a - Identificação dos Reciclos	37
3.7.2.b - Identificação dos Subsistemas	40
3.7.2.c - Determinação das correntes de Corte	40
3.7.2.d - Determinação da Sequência de Cálculo	42
3.8 - Gerenciamento das Unidades Modulares	43
3.8.1 - Acesso as Unidades Modulares	43
3.8.2 - Teste de Convergência	45
3.9 - Gerenciamento dos Arquivos	46
3.10 - Apresentação do Relatório Final	47
4 - UNIDADES MODULARES	48
4.1 - Introdução	49
4.2 - Acesso aos Parâmetros das Operações Unitárias	49
4.3 - Cálculo dos Modelos Matemáticos	50
4.4 - Classificação	50

4.4.1 - Divisor de Correntes (DIV)	50
4.4.2 - Misturador (MIT)	51
4.4.3 - Reator (REA)	53
4.4.4 - Separador	55
4.4.4 a - Coluna de Destilação (DESTIL)	55
4.4.4.b - Módulo Simplificado (SEP)	55
4.4.5 - Absorvedor	57
4.4.5.a - Coluna de Absorção (ABSORÇÃO)	58
4.4.5.b - Módulo Simplificado (ABSI)	60
4.4.6 - Flash	60
4.4.6.a - Cálculo do Equilíbrio (FLASHF)	61
4.4.6.b - Módulo Simplificado (FLASH)	61
4.4.7 - Termostato (TER), Bomba ou Compressor (PRES)	62
4.5 - Conclusão	63
5 - SIMULAÇÃO	64
5.1 - Introdução	65
5.2 - Simulação com Malhas de Reciclos	65
5.3 - Balanços Simplificados de Processos	68
5.4 - Cálculos de Unidades Modulares com Modelagens mais Elaboradas	77
6 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES	85
6.1 - Conclusões	86
6.2 - Sugestões	86
ANEXO - FLUXOGRAMAS	88
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	103
NOMENCLATURA	106

INTRODUÇÃO

INTRODUÇÃO

O programa executivo é a arquitetura básica de um simulador de processos. Ele é o responsável pela determinação da sequência de cálculo e gerenciamento das unidades em simuladores sequenciais modulares e pela formação do sistema de equações em simuladores de equações orientadas.

A utilização de simuladores para análise, projeto e otimização de processos químicos tem se tornado imprescindível. Sendo assim, grandes investimentos tem ocorrido neste setor, pelas indústrias, instituições acadêmicas e empresas de consultoria dos países desenvolvidos.

No Brasil, os simuladores existentes no mercado são desenvolvidos por empresas estrangeiras e na maioria das vezes são feitos para serem usados em grandes computadores. A utilização destes programas é de alto custo, restringindo seu uso somente pelas indústrias de grande porte. No país há uma enorme carência de estudos e pessoal especializado na área de simulação e principalmente na pesquisa e desenvolvimento de simuladores. O objetivo deste trabalho é contribuir para a difícil tarefa de reverter este quadro.

Nos capítulos seguintes apresentaremos os tipos de simuladores existentes no mercado, as técnicas de simulação por eles empregadas, as divisões internas e principalmente o desenvolvimento do programa executivo. Finalizando é feita a apresentação de algumas unidades modulares com o objetivo de testar o programa proposto.

2 - ANÁLISE DA LITERATURA

2.1 - INTRODUÇÃO

Nas duas últimas décadas, a simulação de processos tem se tornado indispensável para o projeto, análise e otimização de processos. O crescente interesse nesta área é bem exemplificado pelo grande número de artigos publicados nas revistas especializadas (segundo Biegler (1989) são aproximadamente 50 artigos por mês), pelos livros editados e a quantidade de programas existentes no mercado.

Uma breve revisão bibliográfica revela numerosos exemplos de utilidade prática de simulação de processos. Por exemplo, um artigo de Armstrong e Olson (1962) avaliou as melhorias que poderiam ser obtidas através da simulação de uma planta de amônia cuja produção era de 150 ton/dia. A primeira constatação foi um aumento de 10% da produção, a partir de pequenas alterações na operação, sem nenhum custo adicional. Avaliaram também a ampliação dessa unidade industrial a partir da simulação de processos e através de técnicas convencionais e, constataram que a unidade avaliada pela simulação possuía uma capacidade 50% mais elevada do que a convencional. Outros exemplos envolvendo otimização, análise, avaliação econômica e projeto de plantas químicas, desenvolvidas a partir da simulação de processos estão presentes nas revistas especializadas.

A revisão da literatura mostrando a evolução da simulação de processos químicos desde a publicação do primeiro simulador de processos de uso flexível (Kesler e Kesler, 1958), foram feitas por Kehat e Shacham (1973), Motard et al (1975), Rosen (1980) e Biegler (1989), entre outros.

2.2 - TERMINOLOGIA

Simulação de processos segundo Motard (1975) é a representação de um processo químico através de modelos matemáticos que solucionados geram informações sobre o desempenho desse processo. Os modelos matemáticos são usualmente representados por programas de computadores. E o simulador de processos constitui num conjunto desses programas interconectados a fim de representar o processo como um todo.

Kehat e Shacham (1973) classificaram os simuladores de processos de acordo com sua estrutura. Os simuladores podem ser desenvolvidos para um processo particular com um fluxograma de planta fixo ou ter uma estrutura flexível para uso dos mais variados processos existentes, utilizando por exemplo uma estrutura modular (simuladores sequenciais). De acordo com este segundo método cada passo do processamento químico é representado por um modelo matemático, os quais são identificados como unidades modulares e são gerenciados por um programa central (programa executivo).

2.3 - SIMULADORES DE PROCESSOS

Em uma classificação preliminar dos simuladores para análise de processos, segundo Raman (1985), podemos dividi-los quanto a sua sofisticação em:

1 - Simples - Avaliação rápida do processo por um balanço de massa e energia bastante simplificado (representado por um conjunto de equações lineares).

2 - Detalhado - Avaliação detalhada, com cálculos

precisos de propriedades físicas e termodinâmicas dos componentes do processo e modelagem rigorosa das operações unitárias. (representado por um conjunto de equações lineares, não-lineares e diferenciais).

Um simulador de processos detalhado de acordo com Leesley (1982) contém quatro partes principais:

- 1 - Um programa executivo principal com sub-rotinas;
- 2 - Um banco de dados das propriedades físicas;
- 3 - Um conjunto de sub-rotinas de cálculos de propriedades físicas e termodinâmicas;
- 4 - Um conjunto de modelos matemáticos de operações unitárias.

Que serão descritos a seguir:

1) PROGRAMA EXECUTIVO

O Programa Executivo é a parte principal de um simulador de processos, ele que é o responsável pelo gerenciamento das demais etapas e sua estrutura básica sofre diferenciações, de acordo com a técnica de simulação empregada. Cálculo sequencial modular, de equações orientadas e simultâneo modular compõem as três técnicas utilizadas na simulação de processos.

2) BANCO DE DADOS

O banco de dados é utilizado como interface entre os programa executivo, as operações unitárias e os cálculos das propriedades termodinâmicas. Nestes são armazenadas informações referentes aos componentes, suas propriedades físicas e parâmetros

termodinâmicos, como por exemplo, peso molecular, densidade, coeficientes do polinômio para a entalpia molar de líquidos e vapores em função da temperatura e coeficientes para estimativas de pressão de vapor para soluções ideais (Eq. de Antoine), entre outros. Entre os bancos de dados mais completos temos: o DIPPR (desenvolvido nos Estados Unidos), PPDS (no Reino Unido) e o DECHEMA em Dortmund (na Alemanha).

3) CÁLCULO DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E FÍSICAS

O conjunto de sub-rotinas de cálculo das propriedades termodinâmicas são baseadas geralmente em minuciosas revisões de técnicas de estimativas de propriedades termodinâmicas, desenvolvidas como base em Fredenslund (1980), O'Connell (1984) e Grens (1984).

A biblioteca de cálculo de propriedades termodinâmicas é usualmente transparente ao usuário, mas representa muito para o cálculo do processo. Westerberg et al (1979) estimaram que 80% das equações dos simuladores estão na biblioteca das propriedades.

Quase todos os simuladores comerciais empregam modelos de equações cúbicas para descrever as propriedades dos componentes, modelos de coeficientes de atividades (como Wilson, NTRL, UNIQUAC), métodos de contribuição de grupos como UNIFAC, coeficientes de atividade para hidrocarbonetos como Chao-Seader e Grayson-Streed, entre outros, são utilizados para estimar a pressão de vapor, temperatura de bolha e orvalho, necessárias no modelo das operações unitárias.

4) OPERAÇÕES UNITÁRIAS

A modelagem matemática que prediz o que ocorre internamente a um equipamento industrial está representada por um conjunto de operações unitárias do simulador de processos. Geralmente a relação entre equipamento e operação é feita de um -para-um. Estes modelos matemáticos podem ser um simples balanço de massa até uma representação detalhada dos fenômenos de transporte de quantidade de movimento, energia e massa de um determinado equipamento. As modelagens das operações unitárias nos simuladores sequenciais e simultâneos modulares são representados por módulos que são identificados como unidades modulares.

2.4 - TÉCNICAS DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

2.4.1 - CÁLCULO SEQUENCIAL MODULAR

Esta técnica é muito comumente usada em simulação de processos, como pode ser verificada na tabela 2.1. O cálculo sequencial consiste no cálculo das unidades, uma após a outra, obedecendo a uma hierarquia que é determinada pelo programa executivo. A partir da sequência de cálculo ocorre a execução dos módulos onde as propriedades das correntes de saída de uma unidade devem ser calculadas através do balanços de massa, energia e momento a partir das correntes de entrada. Finalmente, o programa executivo e os módulos podem frequentemente precisar das propriedades físicas e termodinâmicas dos componentes, sendo assim, estas são avaliadas através do banco de dados e estimadas por correlações em sub-rotinas ou subprogramas.

Simuladores utilizando a técnica sequencial modular são

SIMULADOR	TIPO DE SIMULADOR	OTIMIZACAO	OPCOE TAMANHO CUSTO, ECONOMICO	BANCO DE DADOS	CAPACIDADE DINAMICA	INTERFACE	NACIONALIDADE
ASPEN/PLUS	Sequencial modular com opcao simultaneo modular	sim algoritmo SQP	tamanho de equipamentos, custo e aspectos economicos	PRODABAS	Avaliacao separada coluna de destilacao batelada prog. (BRICH/PAC)	interface com pds plant design systems	EUA
ASPEH/SP	Sequencial modular com opcao simultaneo modular	algoritmo SQP	tamanho de equipamento, custo e aspectos economicos	PRODABAS	NAO mas estudo passo a passo do estado permanente serve como aproximacao	extensao para graficos	EUA
CAPIES	Sequencial modular com opcao simultaneo modular	NAO	NAO	WXFILE	SIM	sistema de graficos para flowsheet e esboço de desenho	JAPAO
CHEM3IN	Equacoes orientadas	Nao	Nao	CHEM3DAT	Eventual controle simulacao de controladores e coluna de destilacao batelada	Graficos de saida suportados em GKS	ALEMANHA
DESIGN-II	Sequencial modular com opcao simultaneo modular	Atraves de tecnicas de programacao nao lineares	tamanhos; separador pratos de coluna trocadores etc...	-	Coluna de destilacao batelada	PFIDs PFDs	EUA
FLOWPACK	Equacoes orientadas	SQP	tamanho de equipamento e custo	DB	SIM	DB e PFDs	INGLATERRA
GENESIS	Sequencial modular com opcao simultaneo modular	SQP	limitado caracteristicas de tamanho e custo	PRODABAS	mas estudo passo a passo do estado permanente serve como aproximacao	opcoes para graficos	INGLATERRA
IPES	Sequencial modular com opcao simultaneo modular	otimizacao para uma variavel SQP	Muito limitado poucas caracteristicas de tamanho e custo	NAO	NAO	NAO	EUA
MPFL	Simultaneo modular	NAO tem recursos de otimizacao	NAO	PRODABAS	NAO		ALEMANHA
OPTISIM	Equacoes orientadas	MINLP	tamanho e custo	PRODABAS	SIM	interface com graficos	ALEMANHA
PROCESS	Sequencial modular com opcao simultaneo modular	otimizacao de ate 16 variaveis	estimativa de custo	PRODABAS	destilacao batelada	PFD, guiooad lotus 1,2,3 etc...	EUA
QUASILIN	Equacoes orientadas	SIM	tamanhos; algumas unidades e custo	QUASILIN	SIM		INGLATERRA
SPEEDUP	Equacoes orientadas	MINOS	NAO	SPEEDUP interface com PRODABAS	SIM	interface com graficos	INGLATERRA
VIPLAN	opcoes Sequencial modular Equacoes orientadas	SIM	NAO	VIPLAN	destilacao batelada	graficos e janelas	ALEMANHA
SPAN	Sequencial modular com opcao simultaneo modular	SIM	tamanhos de colunas area de transferencia de calor.	NAO	NAO		EUA

TAB2.1 CARACTERISTICAS DE ALGUNS SIMULADORES COMERCIAIS - (BIEGLER 1989)

relativamente fáceis de serem desenvolvidos e sua natureza modular oferece simplicidade e uma grande capacidade de expansão.

Unidades modulares podem ser usadas em dois diferentes níveis: simples balanço de massa e energia e módulos mais sofisticados com uma modelagem detalhada das operações unitárias.

Os simuladores sequenciais são impróprios para sistemas altamente complexos que contém um número elevado de correntes de reciclo, porque estabelecer uma hierarquia de ordem de cálculo e criar métodos de convergência para estes sistemas são extremamente difíceis e demorados, mas a maior desvantagem do sequencial modular é para simulações inversas, onde as correntes de entrada devem ser estimadas a partir das correntes de saída. Segundo Biegler (1989), normalmente simultâneas iterações são envolvidas, tornando-se computacionalmente ineficientes quando o número de iterações é superior a 1000. As técnicas de simulação por cálculo sequencial modular foram descritas por Evans et al (1968), Flower e Whitehead (1973), Kehat e Shacham (1973), Mortard et al (1975) e Westerberg (1979).

2.4.2 - CÁLCULO POR EQUAÇÕES ORIENTADAS

O cálculo modular torna-se inviável para simular os casos acima citados. Para resolver este problema o cálculo de equações orientadas e simultâneo modular foram desenvolvidos.

O tratamento das equações do processo são a crucial diferença desta técnica, isto é, elas são tratadas através de um propósito geral e a distinção entre as equações das conexões das correntes, operações unitárias e propriedades físicas e

termodinâmicas desaparecem completamente. Sendo assim, todo o processo pode ser representado através de um sistema de equações algébricas em geral não lineares e diferenciais que têm de ser resolvidas simultaneamente.

No caso de uma planta industrial média o sistema pode conter milhares de equações. Através de técnicas convenientes de decomposição as equações podem ser resolvidas em módulos.

A simulação de equações orientadas foi descrita por Shacham e Perkins (1979). O maior problema é a solução de grandes sistemas de equações não lineares. Vários algoritmos foram propostos por Sargent (1981).

2.4.3 - CÁLCULO SIMULTÂNEO MODULAR

O cálculo simultâneo modular possui características comuns as técnicas descritas acima.

As etapas deste método segundo Raman (1984) são as seguintes:

- 1 - Para a primeira iteração estima-se o valor da corrente de corte;
- 2 - Para estimar as demais correntes do processo utiliza-se o cálculo sequencial modular;
- 3 - Tendo obtido uma primeira estimativa para os valores das correntes de entrada e saída de cada unidade lineariza-se as equações envolvidas no processo e constroem-se uma relação linear entre elas.
- 4 - As equações lineares são interconectadas e resolvidas simultaneamente usando métodos matriciais

para obter um conjunto de valores.

- 5 - Se em duas sucessivas iterações os valores das correntes convergirem, a simulação é finalizada. Caso não haja convergência o cálculo retornará para a etapa 2.

As vantagens do cálculo simultâneo modular são a redução do tempo computacional e a facilidade para o uso de simulação inversa. A técnica simultâneo modular é descrita em detalhes por Umeda e Nishino (1972), Westerberg et al (1979) e Biegler (1983).

2.5 - FATORES QUE DISTINGUEM OS SIMULADORES COMERCIAIS

Anteriormente os simuladores foram classificados, de uma forma didática, em simplificados ou detalhados, mas são diversos os fatores que distinguem os simuladores comerciais. A seguir apresentaremos e descrevemos os principais fatores identificados por Biegler (1989):

- 1 - Arquitetura;
- 2 - Otimização;
- 3 - Análise e Projeto;
- 4 - Capacidade dinâmica;
- 5 - Interface;
- 6 - Outros.

1) ARQUITETURA

Quanto a arquitetura, os simuladores são classificados de acordo com as técnicas de simulação empregadas. Portanto podemos classificá-los em simulador sequencial modular, de

equações orientadas e simultâneo modular e modelos não convencionais.

2) OTIMIZAÇÃO

A otimização de variáveis do processo é comum e necessária na indústria. Durante muito tempo os algoritmos de otimização foram somente aplicados em simuladores de equações orientadas, devido ao dispendioso trabalho e a imprecisão dos resultados em simulação sequencial modular. Atualmente é utilizado com bastante sucesso algoritmos como SQP (Successive Quadratic Programming) para simuladores sequenciais e MINLPS (Mixed-Integer Nonlinear Programs), MINOS (Augmented Method (Murtagh, (1982))) e também o SQP para os de equações orientadas.

3) ANÁLISE E PROJETO

O objetivo da análise é fazer uma avaliação das variáveis (vazão, temperatura, pressão, composição, entre outras) de todo o processo, enquanto o projeto tem a finalidade de calcular a capacidade, tamanho e custo dos equipamentos.

A análise e projeto geralmente são executados conjuntamente em simuladores sequenciais modulares ou de equações-orientadas, sendo que este último pode ser tratado separadamente por simuladores não convencionais.

4) CAPACIDADE DINÂMICA

Os simuladores são estacionários ou dinâmicos, sendo que na maioria das vezes estes trabalham no estado estacionário.

Entretanto, os estudos para implementação da modelagem de estados dinâmicos para simuladores sequenciais e de equações-orientadas tem evoluído bastante nos últimos anos.

5) INTERFACE

Indiferente do tipo, os simuladores de processos requerem estrutura de dados internas (banco de dados e formação de arquivos específicos) para transferência de informação e comunicação entre o programa executivo e operações unitárias, cálculo das propriedades termodinâmicas e outros módulos.

O que vai diferenciar um simulador de outro, quanto ao aspecto interface, será a facilidade ou não deste em adaptar a introdução de novas modelagens e se é disponível a interface com módulos gráficos e desenho de fluxogramas, tais como diagramas de tubulação e instrumentação (P&ID), bem como diagramas de fluxo de processos (PFD).

6) Outros fatores também são responsáveis por esta distinção, dentre eles as opções de operação: quanto ao cálculo de propriedades físicas e termodinâmicas, banco de dados e modelagem das operações unitárias.

2.6 - PERSPECTIVAS DOS SIMULADORES COMERCIAIS

Balanço de massa e energia (em estado estacionário), dimensionamento de equipamentos, estimativa de custos e avaliação de projetos econômicos, têm sido utilizados de uma forma generalizada nos simuladores comerciais. Mas segundo Evans (Mash e

Seider (1981)) outros tipos de análises são importantes, e estão sendo estudadas e implementadas nos simuladores. Estas inovações são:

- Simulação dinâmica para estudos de controle de sistemas e para partidas, alterações bruscas e interrompimento de processos.
- Otimização a nível de subsistemas e para o sistema completo.
- Programação de operações bateladas, envolvendo simulações estocásticas e algoritmos determinísticos.
- Estimativas probabilísticas de prováveis desempenhos e riscos econômicos do projeto do processo.
- Análise da eficiência energética, baseada na segunda lei da termodinâmica e usando conceitos de disponibilidade termodinâmica dentro das várias formas de perdas de trabalho.

2.7 - PROGRAMA EXECUTIVO EM SIMULADORES SEQUENCIAIS

O programa executivo é responsável pela determinação da sequência de cálculo e gerenciamento das unidades modulares nos simuladores sequenciais.

Entrada de dados, processamento e saída de dados correspondem as três principais fases dos modernos programas executivos, sendo que nesta seção discutiremos os principais aspectos destas fases.

A) FASE ENTRADA DE DADOS

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

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

Para fornecer a topologia de uma planta química, segundo Crowe (1971) é geralmente necessário uma representação modular do processo, isto é, numerar as operações unitárias (associá-las com as unidades modulares correspondentes), as correntes e fornecer os nomes das unidades (veja fig 2.1), para que os dados fornecidos pelo usuário sejam compatíveis com o simulador a ser utilizado. A interação operador-simulador não ocorre somente na fase de entrada, mas também na fase de processamento e saída de dados, portanto é de fundamental importância o bom conhecimento do simulador pelo operador para o êxito da simulação.

B) FASE DE PROCESSAMENTO

Os dados de entrada são assimilados pelo programa executivo que deve ser capacitado para identificar a presença de ciclos.

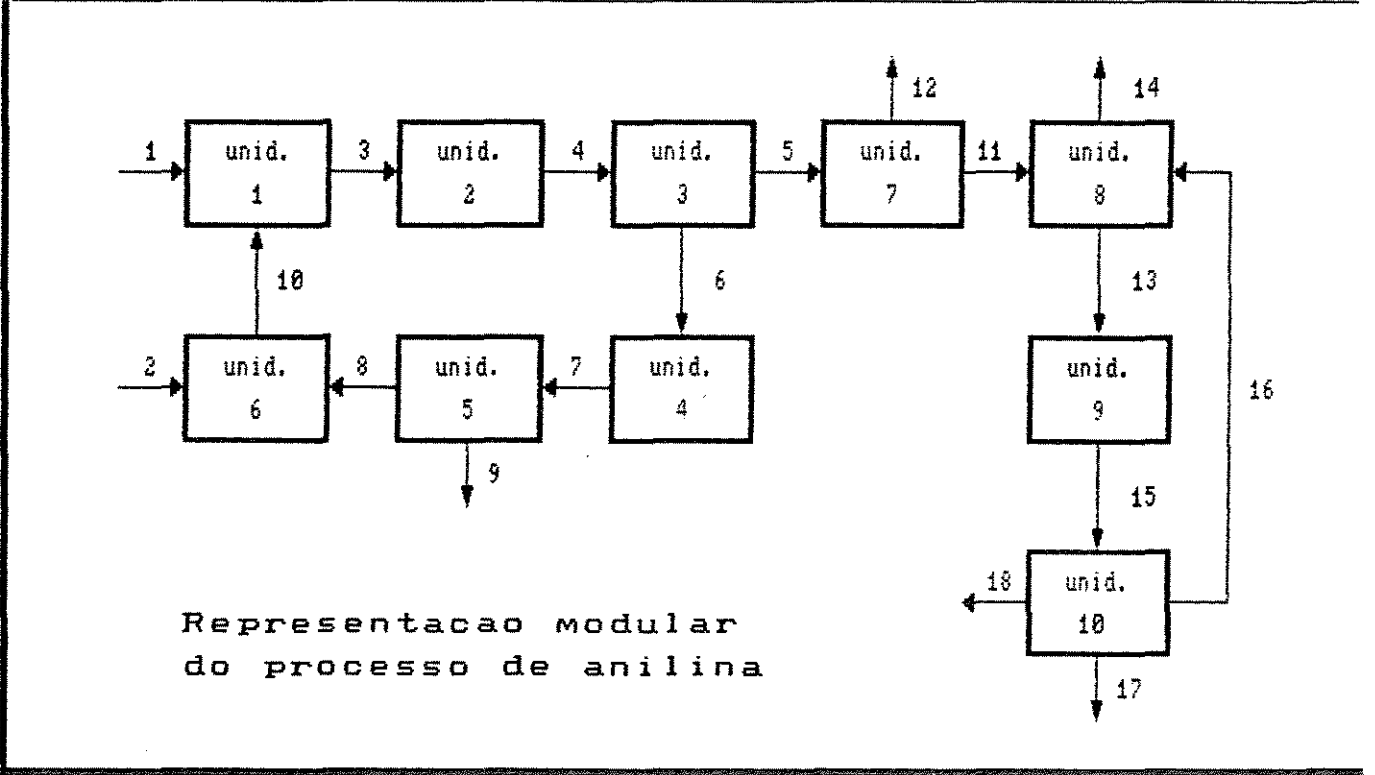
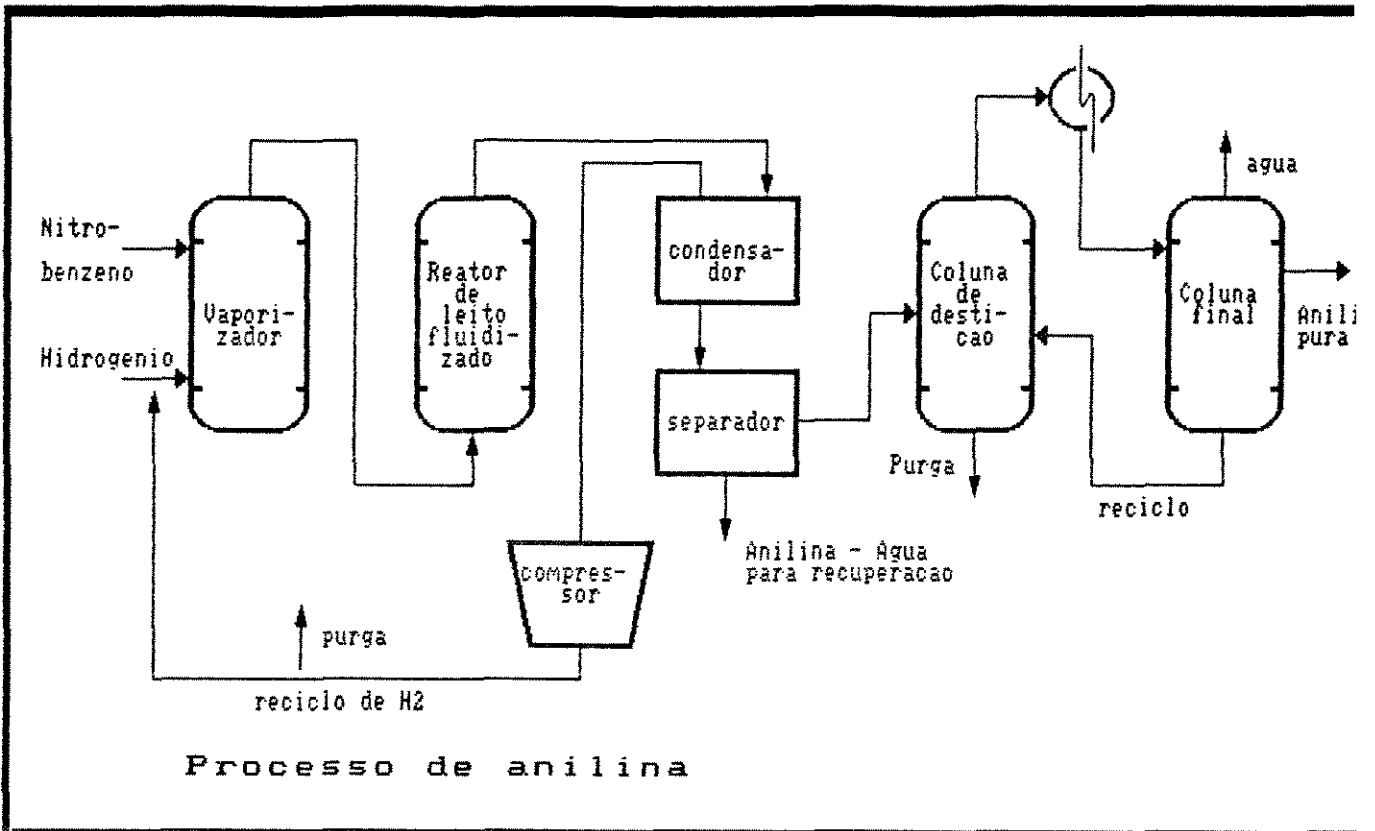


FIG. 2.1 - REPRESENTAÇÃO MODULAR DO PROCESSO DE ANILINA

Caso o processo não apresente ciclos a execução das unidades modulares, é feita de uma forma sequenciada, unidade após unidade, evidentemente as primeiras unidades a serem calculadas serão aquelas onde os valores das correntes são conhecidos. Para os processos com ciclo o programa identifica as unidades que compõem os ciclos, determina a ordem de cálculo e executa iterativamente as unidades modulares até que a tolerância admitida como critério de convergência seja atingida.

A fase de processamento sofre diferenciações de acordo com a técnica de simulação empregada. Nos simuladores de equações orientadas e simultâneos modulares esta etapa é mais complexa devido às dificuldades em se formar e resolver os sistemas de equações.

C) FASE DE SAÍDA DE DADOS

A saída de dados na maioria dos programas executivos de simulação é feita da seguinte forma: Primeiro são apresentados os valores intermediários no vídeo, e por fim é feita a impressão do relatório final (ficando muitas vezes a decisão a critério do usuário).

Os dados referentes à topologia do processo, correntes de alimentação, identificação dos ciclos, correntes de corte, sequência de cálculo, parâmetros de projeto, valores iniciais atribuídos às correntes de corte e os critérios de tolerância admitidos para a convergência dos resultados são apresentados à medida que vão sendo introduzidos ou gerados pelo sistema computacional.

Ao término do programa será apresentado para cada corrente do processo, os valores de vazão, temperatura, pressão, composição, entalpia, entre outros.

O relatório final na maioria dos programas executivos, correspondem a impressão dos principais dados gerados na simulação.

2.8 - CONCLUSÃO

Partindo do princípio que os simuladores existentes no mercado são de alto custo, conseqüentemente de uso restrito pelas indústrias de grande porte, optamos em construir um programa executivo simples para processos em estado estacionário, utilizando a técnica de simulação de cálculo sequencial modular, que possa trabalhar com unidades modulares de simples balanço de massa e energia até modelagens detalhadas das operações unitárias e que atenda justamente às indústrias de médio e pequeno porte.

O programa executivo foi criado de maneira a permitir (com pequenas adaptações) a interface deste com banco de dados, unidades modulares, programas de cálculos de propriedades termodinâmicas (as unidades e cálculos, representados por qualquer linguagem computacional) e avaliações de projeto. Este pode ser utilizado em micros compatíveis com o IBM-PC, de grande disponibilidade no mercado e com o preço bastante razoável.

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

3 - DESENVOLVIMENTO DO
PROGRAMA EXECUTIVO

3.1 - INTRODUÇÃO

Os programas de simulação aqui descritos foram desenvolvidos em linguagem Turbo C da Borland e o computador utilizado foi um micro da linha PC - XT com capacidade de memória de 640 Kb acoplado a um disco rígido de 20 Mb. O simulador é do tipo cálculo sequencial modular em estado estacionário que contém um programa executivo central e programas que são denominados de unidades modulares. A opção de construir o simulador com estrutura modular está vinculada em permitir ao usuário expandir ou modificar as opções de cálculo, isto é, acrescentar ou trocar as unidades modulares e também em ter memória disponível para a utilização de grandes programas modulares (cada módulo funciona como um programa à parte). Após o sistema estabelecer a sequência ótima de cálculo (ordem na qual as unidades vão ser executadas) inicia-se o gerenciamento das unidades modulares através do programa executivo. Cada programa é transferido da biblioteca de módulos localizada no disco rígido para a unidade central de processamento, já em linguagem de máquina executável. Executado este módulo, ele é automaticamente apagado da memória e um novo módulo é requisitado, obedecendo estritamente a sequência que foi anteriormente determinada.

A transferência de informações entre o programa executivo e os respectivos módulos é feita através da criação e leitura de arquivos de dados específicos. Os módulos são independentes e tem como vantagem adicional a possibilidade de poderem ser executados sem a presença do programa executivo, aumentando assim a flexibilidade de utilização dos vários

programas disponíveis

A partir destas informações iniciais iremos apresentar as etapas do programa executivo, descrever o programa e as unidades modulares, bem como a interação entre eles.

3.2 - INFORMAÇÕES BÁSICAS A RESPEITO DO PROGRAMA EXECUTIVO

O programa executivo é composto de um programa principal responsável pelo gerenciamento das unidades modulares e das diversas sub-rotinas (que contém as entradas de dados, grande parte da fase de processamento e de saída de dados). O programa é compilado conjuntamente com as sub-rotinas Entry.c e Window.c (All Stevens, (1988)) a fim de gerar o programa executável. Estas sub-rotinas são responsáveis por uma melhor interação operador-computador, permitindo a facilidade de entrada de dados através da criação de janelas e aparecimento de mensagens no vídeo.

O diagrama de fluxo apresentado na figura 3.1, servirá de ilustração para as diversas fases do programa executivo.

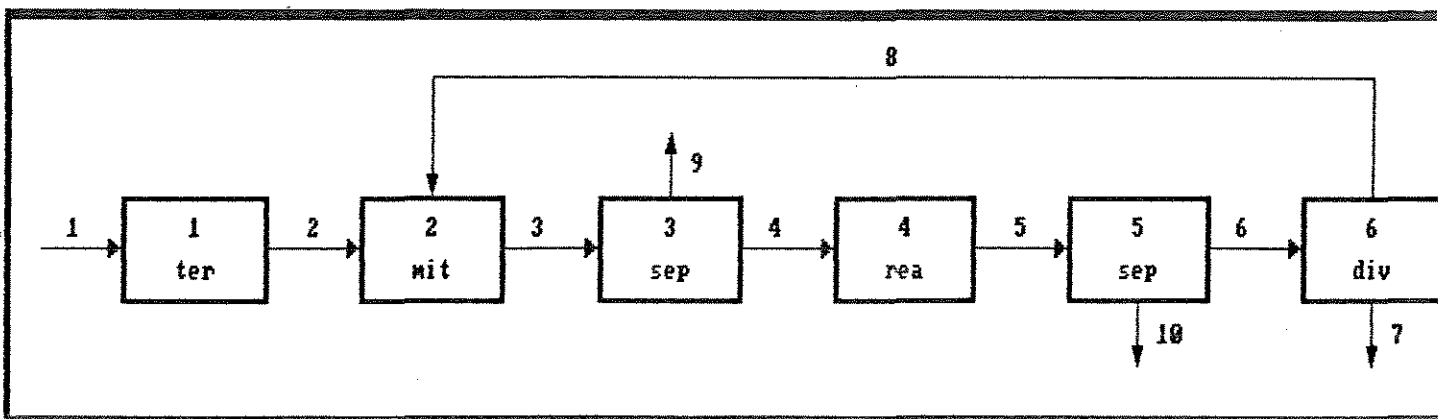


FIG. 3.1 - DIAGRAMA DE FLUXO DE UM PROCESSO QUIMICO (PLANTA A)

3.3 - ESTRUTURA DO PROGRAMA EXECUTIVO

A estrutura do programa executivo é composta de diversas fases, obedecendo sempre a uma hierarquia de processamento.

A seguir apresentaremos as etapas do programa:

Entrada de dados :

- Arquivo referente ao processo;
- Dados iniciais;
- Matriz do processo;

Cálculo das matrizes :

- Matriz conexão das correntes;
- Matriz de incidência;
- Matriz de adjacência;
- Matriz de dados;

Correntes de entrada :

- Identificação;
- Introdução dos valores das propriedades;

Identificação do sistema: aberto ou com reciclo

Sistema aberto :

- Determinação da sequência de cálculo;

Sistema com reciclo :

- Identificação dos reciclos;
- Identificação dos subsistemas;
- Determinação das correntes de corte;
- Determinação da sequência de cálculo;

Gerenciamento :

- Acesso às unidades modulares;
- Teste de convergência;

Gerenciamento dos arquivos

Apresentação do relatório final

O fluxograma referente a esta estrutura é mostrado na figura 3.2. A seguir serão apresentadas cada uma das etapas do fluxograma.

3.4 - ENTRADA DE DADOS

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

3.4.1 - ARQUIVO REFERENTE AO PROCESSO

A primeira informação a ser fornecida é o nome do arquivo referente ao processo que contém ou conterá os principais dados fornecidos e calculados no decorrer do programa executivo. Caso já exista um arquivo de dados com este nome, automaticamente as informações referente àquela planta são lidas e a etapa seguinte será o gerenciamento das unidades modulares. Caso contrário o programa obedece a mesma hierarquia apresentada anteriormente.

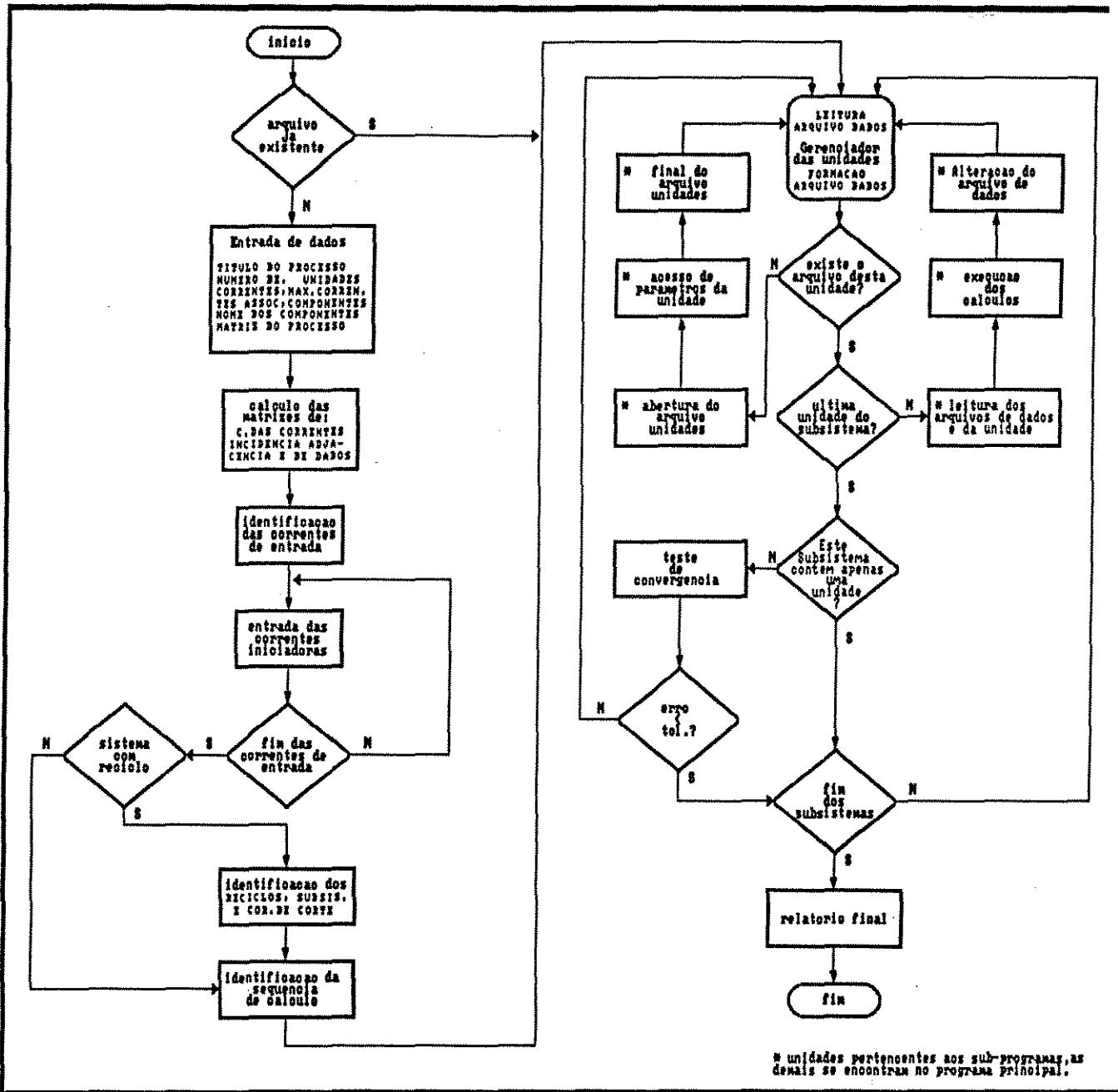


FIG 3.2 - FLUXOGRAMA (SIMPLIFICADO) DO PROGRAMA EXECUTIVO

Essa etapa evita que o usuário entre com os dados toda vez que for simular um processo já executado ou novo, bastando para este último caso, que faça modificações nos arquivos já existentes a fim de adaptá-los à planta a ser simulada.

No lado direito da tela, que é fornecido o nome do arquivo, aparece a listagem das unidades modulares, com suas respectivas abreviações (que é uma forma de identificar os programas que se encontram na biblioteca de módulos), como podemos notar pela figura 3.3.

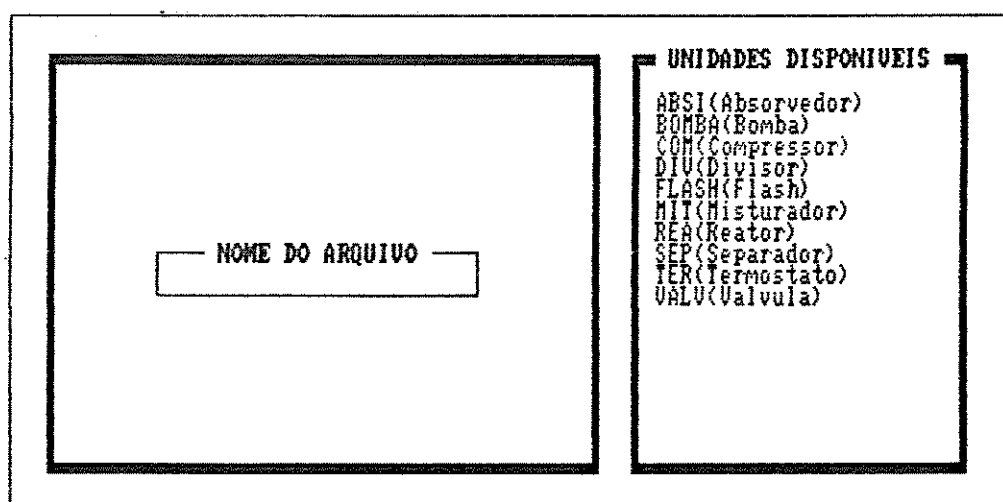


FIG 3.3 - TELA NOME DO ARQUIVO

É possível criar novas unidades modulares e para apresentar estas unidades na tela é necessário acrescentar os seus nomes e suas abreviações no arquivo UNID.MEK.

3.4.2 - DADOS INICIAIS

Os primeiros dados a serem fornecidos, como ilustrado na figura 3.4, são:

Título da planta química a ser simulada:

Número de :

- componentes envolvidos em todo o processo (ncom)
 - unidades do processo (nu)
 - correntes (nc)
 - máximo de correntes associadas a uma unidade (nm)
- Nome dos componentes

ENTRADA DE DADOS		COMPONENTES
Titulo do Processo: PLANTA A N° de componentes: 5 N° de unidades do Processo: 6 N° de correntes do Processo: 10 N° maximo de correntes associadas a cada unidade: 3		a b c d e
VALORES MAXIMOS Num. de componentes = 12 Num. de unidades = 30 Num. de correntes = 100 Num. max. de correntes = 5	APERTE F10 PARA GRAVAR	

FIG 3.4 - TELA ENTRADA DE DADOS

O número de componentes (ncom), das unidades (nu) e correntes (nc) devem ser inteiros e obedecerem os seguintes intervalos: $0 < ncom \leq 12$, $0 < nu \leq 30$ e $0 < nc < 100$. Os dados de nu, nc e nm são os responsáveis pelo dimensionamento das matrizes a serem calculadas. Caso uma planta tenha o número de unidades e correntes superior a estes valores, o operador deve dividir esta planta em sub-plantas e simular as partes separadamente se possível.

3.4.3 - MATRIZ DO PROCESSO

A matriz do processo é uma representação da topologia de uma planta química em forma de estrutura. Cada linha da matriz contém informações referente a um equipamento do processo. Assim

sendo, o número de linhas é igual ao de unidades e o de colunas é igual ao número máximo de correntes associadas mais dois ($nm+2$). A primeira coluna representa um vetor ($uni[i]$) com as abreviações das unidades modulares que devem ter no máximo 10 caracteres, a segunda contém os números das unidades e a partir da terceira são apresentadas as correntes de entrada e saída de cada equipamento (a segunda coluna em diante pertence à matriz $num[i][j]$). Por convenção, as correntes de alimentação têm o sinal positivo e as de saída negativo.

Para introdução da matriz do processo alguns esclarecimentos devem ser feitos. O número e o nome das unidades devem ser seguidas da tecla "enter". Com a finalidade de facilitar, agilizar e diminuir a incidência de erros, o programa cria, automaticamente, duas páginas idênticas à representada na figura 3.5. Cada página tem a capacidade de armazenar até quinze unidades e ao ser digitada a décima sexta unidade, o sistema retira da tela do vídeo a página 1 colocando em seu lugar a página 2.

MATRIZ DO PROCESSO			Pag 1		
Nome da unidade	Numero da unidade	Correntes associadas			
ter	1	1	-2	0	
mit	2	2	-3	0	
sep	3	3	-4	-9	
rea	4	4	-5	0	
sep	5	5	-6	-10	
div	6	6	-7	-8	

Mensagem

Estas informacoes estao corretas? (s/n)

FIG 3.5 - TELA MATRIZ DO PROCESSO

Concluída a introdução dos dados referentes à topologia do processo alguns erros podem ser cometidos na digitação sem serem percebidos. O programa, então, permite realizar correções na matriz do processo. A seguinte mensagem é apresentada no vídeo: "Estas informações estão corretas? (s/n)". Pressionando-se a tecla "n" o sistema apresenta na parte inferior da tela uma mensagem para cada valor introduzido, perguntando ao usuário se aquele dado deve ser corrigido ou não (ex. "Deseja alterar o nome da linha [1]? (s/n)"). Pressionando a tecla "s" o operador pode alterar o valor sem o menor problema e ao final da correção o usuário deve analisar minuciosamente a relação entre a topologia do processo e a matriz do processo. Consciente da equivalência dos dados, deve então, dar continuidade às demais etapas.

3.5 - CÁLCULO DAS MATRIZES

A partir da matriz do processo, quatro outras matrizes são calculadas: conexão das correntes, incidência, adjacência e de dados. Estas matrizes constituem-se em uma importante ferramenta para as etapas de cálculos posteriores.

Os programas de simulação operam internamente fazendo uso de estruturas matriciais. Grande espaço na CPU é ocupado e desta forma limita-se consideravelmente o uso de microcomputadores para estes fins. Para obter o máximo de eficiência na utilização da CPU, como foi dito anteriormente, as matrizes foram dimensionadas a partir dos dados de entrada: nu, nc, nm e ncom.

3.5.1 - MATRIZ CONEXÃO DAS CORRENTES

A matriz conexão das correntes informa qual a corrente que estabelece a conexão entre as unidades. Cada corrente do processo é representada por uma linha e essa possui três colunas. A primeira coluna é formada pelos números das correntes do processo, a segunda pela unidade da qual a corrente é originária e a terceira e última pela unidade a qual a corrente se destina.

O número zero é atribuído para:

- A segunda coluna quando a corrente é de alimentação;
- A terceira coluna quando a corrente é de saída;

A matriz conexão das correntes é construída a partir das informações da matriz do processo. Para isto é utilizado o fluxograma de bloco apresentado na figura 1 do anexo.

A tabela 3.1 representa a matriz conexão das correntes para a planta A.

TAB 3.1 - MATRIZ CONEXÃO DAS CORRENTES

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

3.5.2 - MATRIZ DE INCIDÊNCIA

Uma outra forma de codificar as informações do diagrama de fluxo é através da matriz de incidência, que relaciona as unidades modulares com suas respectivas correntes. Cada unidade é representada por uma linha e cada corrente por uma coluna na matriz de incidência. A primeira coluna refere-se ao número das unidades modulares e a primeira linha corresponde à numeração das correntes. As demais linhas e colunas apresentam os valores +1, -1 e 0 no qual o símbolo "+1" indica que o número da corrente associada, existente naquela coluna, entra na unidade modular da linha correspondente. O símbolo "-1" indica que a corrente sai do equipamento. O espaço em branco ou zero indica que a corrente não está conectada à unidade.

A matriz de incidência foi obtida a partir da matriz do processo utilizando o fluxograma de bloco mostrado na figura 2 do anexo.

A tabela 3.2 representa a matriz de incidência para a planta A.

TAB 3.2 - MATRIZ DE INCIDENCIA

UNIDADE	CORRENTE									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	1	-1	0	0	0	0	1	0	0
3	0	0	1	-1	0	0	0	0	-1	0
4	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	-1
6	0	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0

3.5.3 - MATRIZ DE ADJACÊNCIA

A matriz de adjacência é uma matriz quadrada que relaciona as unidades entre si. Tanto a primeira linha como a primeira coluna contém os números das unidades modulares envolvidas no processo. O valor "1" indica a ligação da unidade existente na linha com a unidade representada pela coluna. O número zero identifica que não há ligação naquela direção. Essa matriz em relação às outras, possui o menor número de informações sobre a topologia do processo, mas é de grande utilidade para manipulação matemática com o objetivo do reconhecimento de reciclos.

A matriz de adjacência é construída a partir das matrizes do processo e conexão das correntes. O fluxograma utilizado é representado na figura 3 do anexo.

A tabela 3.3 representa a matriz de adjacência para a planta A.

TAB 3.3 - MATRIZ DE ADJACENCIA

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

3.5.4 - MATRIZ DE DADOS

A matriz de dados, que é ilustrada na tabela 3.4, é a responsável pelo armazenamento de propriedades (vazão, temperatura, pressão e a fração mássica de cada componente) das correntes. O número de linhas desta matriz é igual ao número de correntes do processo e o de colunas é igual ao número de componentes mais três (ncom+3). A primeira coluna armazena os valores da vazão em quilograma por unidade de tempo (Kg/h, Kg/min ou Kg/s), a segunda a temperatura em Kelvin (K), a terceira a pressão em atmosferas (atm) e as demais colunas apresentam os valores das frações mássicas para cada componente. Inicialmente, esta matriz é nula.

TAB 3.4 - MATRIZ DE DADOS

	VAZAO (Kg/min)	TEMP. (K)	PRESSAO (atm)	FRACAO COMP.A *	FRACAO COMP.B *	FRACAO COMP.C *	FRACAO COMP.D *	FRACAO COMP.E
1	500.00	300.0	1.0	0.500	0.000	0.300	0.200	0.000
2	500.00	350.0	1.0	0.500	0.000	0.300	0.200	0.000
3	700.00	350.0	1.0	0.500	0.000	0.357	0.143	0.000
4	600.00	370.0	1.0	0.583	0.000	0.417	0.000	0.000
5	600.00	390.0	1.0	0.250	0.367	0.250	0.000	0.133
6	300.00	370.0	1.0	0.500	0.000	0.500	0.000	0.000
7	100.00	400.0	1.0	0.500	0.000	0.500	0.000	0.000
8	200.00	350.0	1.0	0.500	0.000	0.500	0.000	0.000
9	100.00	330.0	1.0	0.000	0.000	0.000	1.000	0.000
10	300.00	400.0	1.0	0.000	0.733	0.000	0.000	0.267

* OBS. FRACAO MASSICA

3.6 - CORRENTES DE ENTRADA

3.6.1 - IDENTIFICAÇÃO

A matriz de incidência é a responsável pela identificação de todas as correntes de entrada existentes no

diagrama de fluxo. Quando se faz o somatório das colunas (Tab 3.5), a partir da segunda linha, três resultados são possíveis de se obter: "+1", "0" e "-1". Se o resultado do somatório de uma coluna for igual a "+1" a corrente correspondente àquela coluna é tida como de entrada (alimentação). Se a soma for "-1", a corrente é a de saída do processo. Se o somatório for zero a corrente é a de conexão entre duas unidades.

O fluxograma que identifica as correntes de entrada é representado na figura 4 do anexo.

TAB 3.5 - MATRIZ DE INCIDENCIA

UNIDADE	CORRENTE									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	1	-1	0	0	0	0	1	0	0
3	0	0	1	-1	0	0	0	0	-1	0
4	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	-1
6	0	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0
SOMATORIO	1	0	0	0	0	0	-1	0	-1	-1

3.6.2 - INTRODUÇÃO DOS VALORES DAS PROPRIEDADES

Identificadas as correntes de entrada, o sistema necessita conhecer quais as características de cada corrente. Uma subrotina é acionada e o operador pode, então, introduzir os valores da vazão, temperatura, pressão e fração mássica de cada componente. Para isto o programa cria automaticamente uma página para cada corrente de alimentação identificada.

VALORES DA CORRENTE DE ENTRADA	
Nº 1	
Vazao massica (Kg/unid. de tempo) = Temperatura (K) = Pressao (atm) =	fracao massica a b c d e
Mensagem Estas informacoes estao corretas? (s/n)	

FIG 3.6—TELA VALORES DA C. DE ENTRADA

Concluída a introdução dos dados de cada página alguns erros podem ser cometidos na digitação, sendo assim, o programa permite realizar correções. Ao final da última página estes valores são armazenados na matriz de dados, ocupando as suas respectivas posições.

3.7 - IDENTIFICAÇÃO DO SISTEMA

Os sistemas podem ser classificados em sistemas abertos ou com ciclos, como podemos visualizar pela figura 3.7.

SISTEMA ABERTO

Quando não existe ciclos as unidades podem ser calculadas separadamente uma após a outra, iniciando nas unidades que possuem correntes de alimentação. A sequência de cálculo coincide com o sentido do fluxo de processamento e este processo é denominado de aberto ou em série.

SISTEMA COM RECICLO

Um processo com reciclo é aquele no qual uma corrente de saída de no mínimo uma unidade afeta diretamente a corrente de entrada desta mesma unidade. Isto implica que pelo menos esta unidade não pode ser calculada separadamente. Nos processos onde ocorre a presença de reciclos, a sequência de cálculo não obedece necessariamente o sentido do fluxo de massa.

Para diferenciar um sistema aberto de um com reciclo utiliza-se a matriz de adjacência como instrumento. A técnica é a de zerar sucessivamente as linhas do mesmo número das colunas cujo somatório interno é zero. Se, no final desta técnica, as linhas e colunas cujo número for superior a dois possuírem todos os seus valores iguais a zero, podemos caracterizar este sistema como aberto. Caso contrário, este é definido com reciclos.

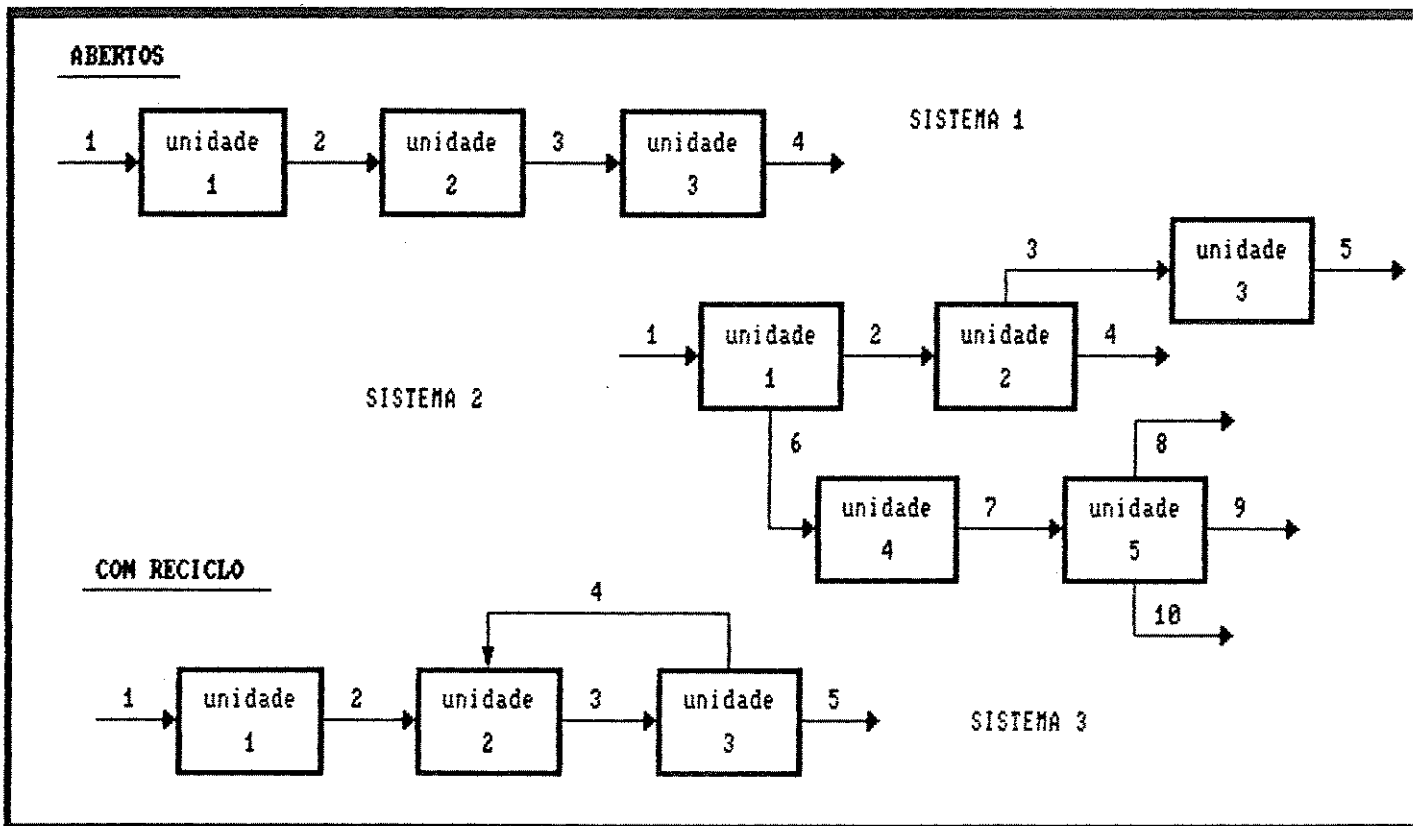


FIG 3.7 - EXEMPLOS DE SISTEMAS

3.7.1 - SISTEMA ABERTO (DETERMINAÇÃO DA ORDEM DE CÁLCULO)

Identificado o sistema aberto, isto é, após feito o somatório de cada coluna existente na matriz de adjacência, a hierarquia de cálculo será determinada. A primeira unidade a ocupar a matriz sequência de cálculo ($mf[i][j]$) é aquela associada à primeira coluna cujo somatório é zero e assim sucessivamente.

Em um processo em série somente a primeira coluna da $mf[i][j]$ é ocupada, sendo que o número das linhas corresponde à ordem de cálculo, isto é, linha 1 contém a primeira unidade a ser calculada e a linha nu a última.

Obtida a matriz sequência de cálculo a próxima etapa do programa é o gerenciamento das unidades modulares.

3.7.2 - SISTEMA COM RECICLO

No processo com reciclo a técnica para se obter a matriz sequência de cálculo não é simples como a de um sistema aberto. Após o programa detectar a existência de reciclos este deve também nos informar quais as unidades que fazem parte de cada reciclo, identificar os subsistemas e as correntes de corte para depois determinar a sequência de cálculo.

3.7.2.a - IDENTIFICAÇÃO DOS RECICLOS

Segundo a literatura, há vários algoritmos para identificar reciclos e informar quais as unidades que fazem parte destes. Porém, vamos utilizar o algoritmo desenvolvido por James C. Tiernan (1970) que é considerado um dos mais eficientes.

O algoritmo é chamado de EC (elementary circuit) e

utiliza três matrizes para descrever o diagrama. A primeira matriz, denominada de G, é obtida a partir da matriz de adjacência (O fluxograma para o cálculo da matriz G, é apresentado na figura 5 do anexo). A segunda (Matriz unidimensional, P) e a terceira e última (Matriz de duas dimensões, H) são inicialmente nulas.

A figura 6 do anexo representa o fluxograma de Tiernan.

A partir do momento em que o programa está identificando os ciclos uma mensagem é mostrada no monitor de vídeo *** AGUARDE UM MOMENTO *** e na parte inferior da tela (Fig 3.8) um contador aparece apresentando o número de iterações do algoritmo de Tiernan.

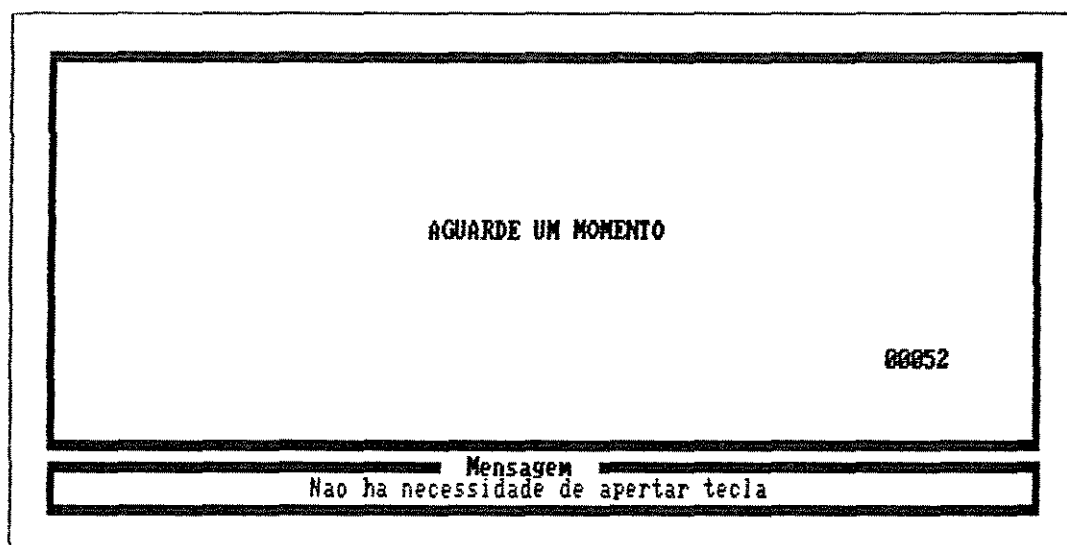


FIG 3.8 - TELA IDENT. DE RECICLOS

Concluída a execução do fluxograma a matriz ciclo é formada e apresentada na tela (Fig 3.9).

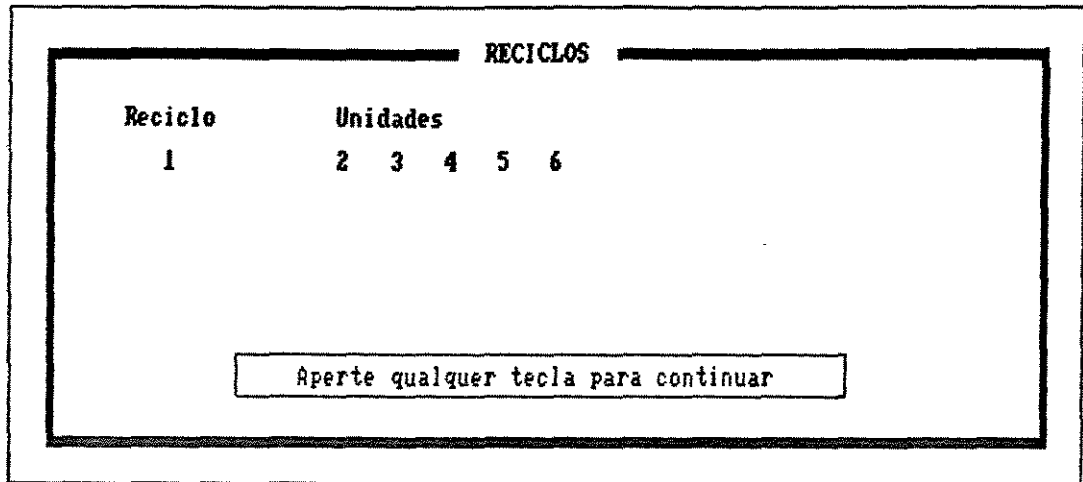


FIG 3.9 - TELA RECICLOS

Esta matriz possui seguintes características:

- Cada linha corresponde a um reciclo e cada coluna a uma unidade pertencente ao reciclo.
- O número de linhas da matriz reciclo ($me[i][j]$) é igual ao número de reciclos e o de colunas é igual ao de unidades nu .
- Nos processos com reciclos internos e externos, primeiramente é apresentado o reciclo externo e depois os seus respectivos internos e assim sucessivamente.

A matriz é apresentada no vídeo até que a tecla "enter" seja acionada.

Após a determinação das unidades que compõem os reciclos são também identificadas as correntes que fazem parte do reciclo, matriz correntes ($md[i][j]$). O fluxograma utilizado é mostrado na figura 7 do anexo. Esta matriz é bastante semelhante a de reciclos, sendo que, cada linha corresponde a um reciclo e cada coluna a uma corrente pertencente ao reciclo.

A matriz corrente é imprescindível para as demais etapas do programa mas não se apresenta na tela de vídeo.

3.7.2.b - IDENTIFICAÇÃO DOS SUBSISTEMAS

Em um processo com reciclo, no mínimo duas unidades são calculadas conjuntamente, podendo as demais serem calculadas separadamente ou não. O objetivo de representar um sistema em subsistemas é identificar as unidades independentes das dependentes e, também, determinar a interdependência das unidades dependentes.

Nos processos químicos, muitas vezes, ocorrem reciclos ou aglomerações de reciclos formando diversas malhas. Cada malha do processo equivale a um subsistema formado por unidades interdependentes. Para determinar as malhas (subsistemas de unidades dependentes) o programa utiliza a matriz de reciclos através do algoritmo representado pela figura 8 do anexo.

3.7.2.c - DETERMINAÇÃO DAS CORRENTES DE CORTE

Quando se quer calcular as unidades que fazem parte de um reciclo (unidades interdependentes) é necessário cortar um número mínimo de correntes do processo de modo a abrir todas as malhas dos reciclos. A partir daí são executados os módulos individualmente adotando um critério de convergência no final.

O fluxograma que identifica as correntes de corte é representado na figura 9 do anexo.

Após a determinação das correntes de corte, a matriz de adjacência é modificada no sentido de vir a representar o processo

com a malha de reciclos aberta

A cada corrente de corte determinada é necessário atribuir valores iniciais da vazão, temperatura, pressão e composição. Sendo assim, o programa apresenta duas formas diferentes para a introdução dos dados referentes a cada corrente de corte. Primeira opção: Todos os dados referente àquela corrente de corte são fornecidos pelo operador, sendo que, para isto, o programa cria automaticamente uma página igual à figura 3.6. Segunda opção: O programa procura a corrente, que já possui valores e que é a mais próxima da de corte, e atribui os valores desta corrente à corrente de corte.

O fluxograma, referente à adequação da matriz de adjacência à abertura dos reciclos, é representado pela figura 10 do anexo, onde: $ma[i][j]$, matriz de adjacência e $mar[i][j]$ corresponde a matriz de adjacência adequada à abertura de reciclos.

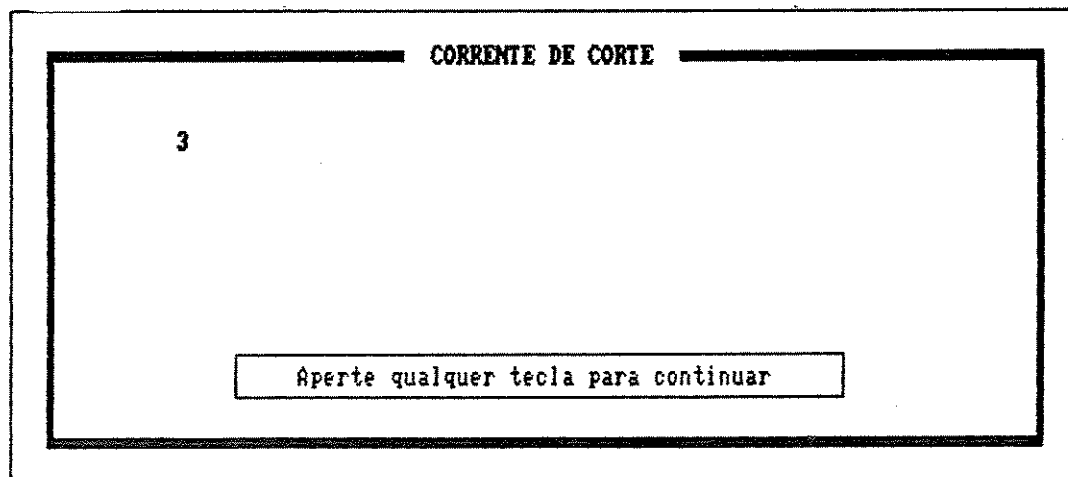


FIG 3.10 - TELA CORRENTE DE CORTE

3.7.2.d - DETERMINAÇÃO DA SEQUÊNCIA DE CÁLCULO

A determinação da sequência de cálculo fornece a ordem de acesso das unidades modulares. Para melhor representar a hierarquia de cálculo utiliza-se uma forma matricial que possui as seguintes características:

- Cada linha corresponde a um subsistema e cada coluna a uma unidade pertencente a este subsistema.
- Se a linha contém apenas uma unidade esta é independente, caso contrário, podemos dizer que estas unidades pertencem ao mesmo subsistema e que elas são interdependentes.
- As unidades estão na seguinte ordem de cálculo:

Execução de todas as unidades referentes a uma linha (subsistema).

Avanço para as unidades referentes às linhas subseqüentes.

A matriz sequência de cálculo ($mf[i][j]$, fig. 3.11) foi obtida a partir das matrizes: de adjacência $ma[i][j]$, de adjacência adequada a abertura de ciclos $mar[i][j]$ e ciclos $me[i][j]$ através do algoritmo representado pela figura 11 do anexo.

As diversas seções anteriores têm como objetivo final a determinação da sequência de cálculo. Concluída esta etapa todas as informações importantes, referente ao processo, são armazenadas no arquivo, cujo o nome foi definido pelo usuário no início do programa.

Estas informações são armazenadas no arquivo na forma

de:

Título do processo, número de unidades, número de correntes, número máximo de correntes associadas a uma unidade, número de componentes, nome dos componentes, matriz do processo, matriz de incidência, matriz de adjacência, valores das propriedades das correntes de alimentação, correntes de corte, número de subsistemas e matriz sequência de cálculo.

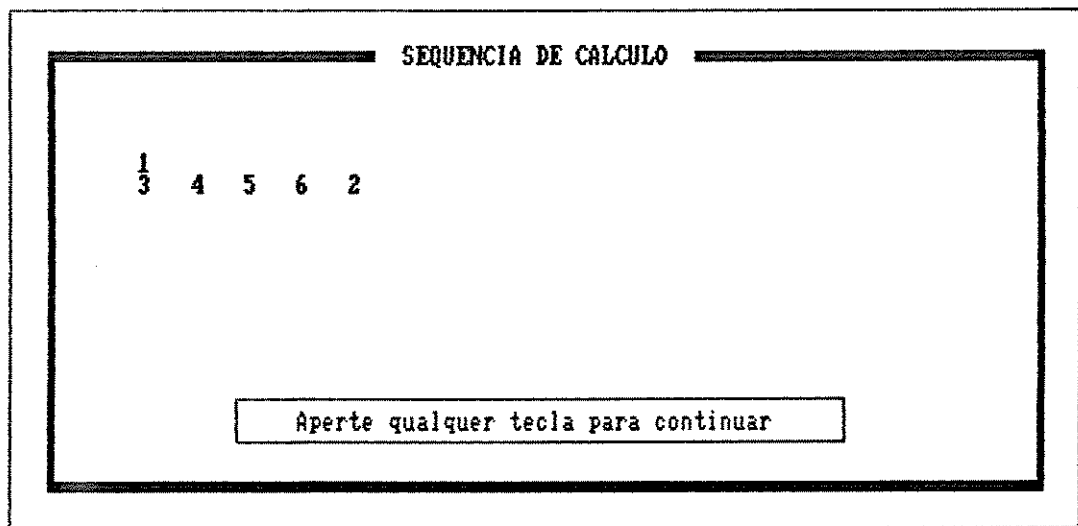


FIG 3.11 - TELA SEQUENCIA DE CALCULO

3.8 - GERENCIAMENTO DAS UNIDADES MODULARES

3.8.1 - ACESSO AS UNIDADES MODULARES

O gerenciamento das unidades modulares é feito através da matriz sequência de cálculo. Este começa quando o sistema lê o número da primeira unidade registrada na matriz. A partir deste número é identificada a unidade modular, os números das suas correntes associadas e seus respectivos valores de vazão, temperatura, pressão e composição. Estes dados são arquivados (no

arquivo PROC.DAD) e utilizando-se o vetor (uni[i]), é identificado o subprograma correspondente à aquela unidade. Assim sendo, o programa gerenciador passa o controle de computador ao programa executável definido no vetor uni[i]. O programa lê o arquivo, é executado e novos valores de dados são obtidos e conseqüentemente novamente armazenados no arquivo (PROC.DAD) a fim de retornar estes valores para a matriz de dados do programa executivo. Este procedimento, como mencionado anteriormente, traz grande flexibilidade de operação do gerenciador.

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

Se a unidade for independente, esta é acessada apenas duas vezes, a primeira para a entrada de parâmetros e a segunda para o cálculo. Caso a unidade for dependente, após o término do cálculo da última unidade registrada no subsistema, é feito um teste de convergência, se o critério adotado for atingido, as unidades do subsistema seguinte serão acionadas, caso contrário, retorna-se ao início do subsistema e uma nova iteração será executada.

Depois da convergência do último subsistema da matriz seqüência de cálculo o sistema computacional procederá a impressão do relatório final. Maiores informações sobre o acesso das unidades modulares serão descritos na seção referente aos programas.

3.8.2 - TESTE DE CONVERGÊNCIA

O teste de convergência é feito ao término de cada subsistemas que contém unidades dependentes. A análise é realizada através dos cálculos dos desvios relativos ou absolutos (a critério do usuário) das variáveis: vazão, temperatura, pressão e fração mássica de cada componente, em cada corrente de corte referente àquele subsistema.

Os desvios são calculados segundo as equações:

$$\text{Desvio relativo} = \left| \frac{X^{(i-1)} - X^{(i)}}{X^{(i-1)}} \right|$$

$$\text{Desvio absoluto} = \left| X^{(i)} - X^{(i-1)} \right|$$

Onde: X valor da variável; i, última iteração e i-1 penúltima iteração.

Se o desvio entre a iteração "i" e "i-1" for menor que o critério de tolerância admitido, houve uma convergência dos valores para aquele subsistema e a etapa seguinte é a avaliação dos subsistemas seguintes. Caso contrário uma nova iteração é realizada.

Para acelerar a convergência algébrica foi introduzido no programa, opcionalmente, o método de Wegstein (Lapidus, (1962)), que é representado pela fig.14 do anexo:

FORNECER CRITERIO DE CONVERGENCIA	
Numero Maximo de iteracoes =	tolerancia
Tipo de desvio (1 ou 2) =	Vazao Temperatura Pressao Fracao massica
Numero do Metodo (1 ou 2) =	
Desvio 1 - Relativo	Desvio 2 - Absoluto
Metodo 1 - substituicao sucessiva	Metodo 2 - Wegstein
Mensagem	
O metodo de Wegstein objetiva a aceleracao da convergencia algebrica	

FIG 3.12—TELA CRITERIO DE CONVERGENCIA

3.9 - GERENCIAMENTO DOS ARQUIVOS

Durante a execucao dos programas, uma serie de arquivos serao criados. Com o objetivo de permitir ao usuario selecionar estes arquivos foi introduzido o gerenciamento (Fig. 3.12). As opcoes oferecidas sao as de apagar ou permanecer com os dados na biblioteca, referente aos arquivos:

- Processo simulado;
- Os arquivos criados pelo programa executivo, exceto o do processo;
- Parametros das unidades modulares.

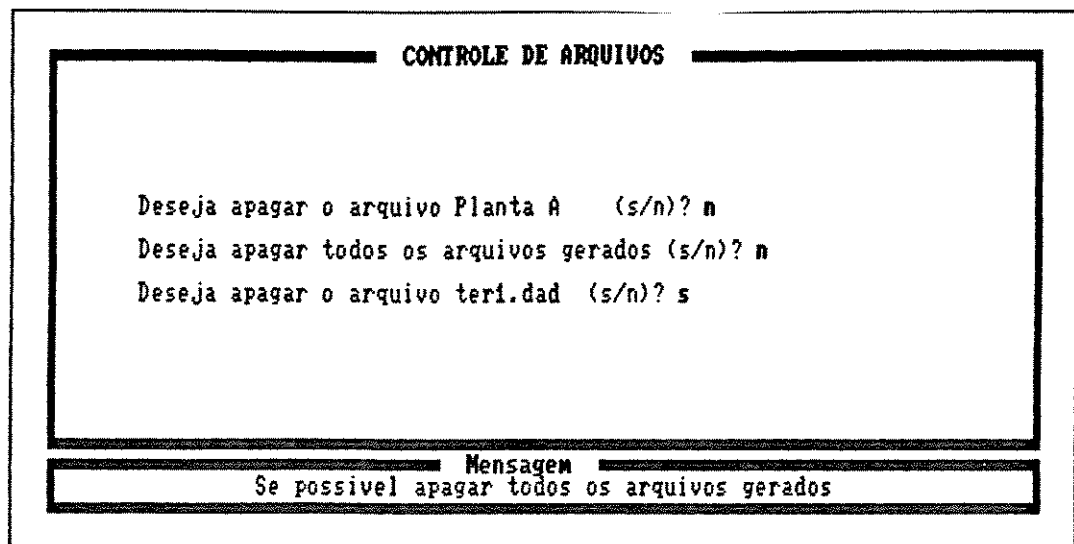


FIG 3.13 - TELA GERENCIAMENTO DE ARQUIVOS

3.10 - APRESENTAÇÃO DO RELATÓRIO FINAL

Após atingir a convergência para todos os subsistemas, é apresentado um relatório final, contendo todas as correntes do processo e seus respectivos valores de vazão, temperatura, pressão e fração mássica.

4 - UNIDADES MODULARES

4.1 - INTRODUÇÃO

A unidade modular é um modelo matemático que representa o equipamento existente no processo, escrito cada um deles através de um programa. Estes programas são compostos de um programa principal que é responsável pelo acesso dos parâmetros da operação unitária, gerenciamento dos cálculos das propriedades termodinâmicas e dos modelos e sub-rotinas. Os programas foram escritos em linguagem Turbo C e Fortran e estes procuram representar os equipamentos que se encontram com maior frequência na indústria química. Muitos destes programas foram desenvolvidos anteriormente e foram adaptados para serem gerenciados pelo programa executivo. A seguir descreveremos as etapas das unidades modulares, isto é, acesso aos parâmetros das operações unitárias e os cálculos dos modelos matemáticos e também apresentaremos estas etapas para cada unidade modular específica que se encontram na biblioteca de módulos.

4.2 - ACESSO AOS PARÂMETROS DAS OPERAÇÕES UNITÁRIAS

A introdução dos parâmetros quando requisitados, é feita durante a primeira iteração. A cada unidade modular que for sendo chamada de acordo com a sequência de cálculo definida, o sistema computacional solicita ao usuário os parâmetros referentes àquela unidade e após a sua introdução estes valores são arquivados para posterior uso nas iterações seguintes. Os nomes dos arquivos criados correspondem a abreviação do nome da unidade + número da unidade + .dad, isto é, será criado o arquivo rea5.dad quando a operação unitária reator obtiver o número 5 em um determinado

processo. O melhor esclarecimento dos parâmetros das unidades modulares serão descritos para cada unidade modular específica.

4.3 - CÁLCULO DOS MODELOS MATEMÁTICOS

Para cada equipamento existente em um processo, pode se ajustar uma ou mais equações matemáticas para representá-los, e quanto mais representativas forem as equações, melhor a aproximação dos resultados obtidos via simulação com os dados experimentais colhidos junto à planta. Os cálculos dos modelos são executados a partir da segunda iteração em diante de acordo com sequência de cálculo definida pelo programa executivo. As unidades modulares são divididas em: Simples - balanço simplificado (equações lineares) e Detalhadas - com cálculos de propriedades físicas e termodinâmicas dos componentes e modelagem com sistemas de equações não lineares.

As unidades modulares desenvolvidas correspondem aos seguintes equipamentos: divisor (DIV), misturador (MIT), reator (REA), separador (DESTIL) e (SEP), absorvedor (ABSORÇÃO) e (ABSI), tanque flash (FLASHF) e (FLASH), termostato (TER), bomba ou compressor (PRES).

4.4 - CLASSIFICAÇÃO

4.4.1 - DIVISOR DE CORRENTES (DIV)

O divisor de correntes tem por objetivo dividir a vazão mássica da corrente de alimentação em uma série de correntes, permanecendo com as propriedades, tais como, temperatura, pressão e composição iguais à corrente de entrada.

O número de correntes de saída não deve ultrapassar a seis, sendo que este é especificado na matriz do processo. Os fatores de divisão das correntes resultantes deverão ser fornecidos pelo usuário como parâmetros da unidade modular DIV, sendo obrigatoriamente a soma destes parâmetros igual à um.

O DIV é uma unidade extremamente importante na simulação de processos e a sua presença é verificada em todas as bibliotecas de módulos dos simuladores comerciais.

A representação esquemática e a modelagem da unidade modular divisor de correntes (DIV, n correntes de saída) são apresentadas a seguir, onde G, T, P, Fmas, j e FD correspondem respectivamente à vazão mássica, temperatura, pressão, fração mássica de cada componente j e fator de divisão. O índice i identifica a corrente de entrada e s a de saída.

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

$$T_e = T_{ei}$$

$$P_e = P_{ei}$$

$$F_{mase,j} = F_{mass,j}$$

$$G_{si} = F_{Di} * G_e$$

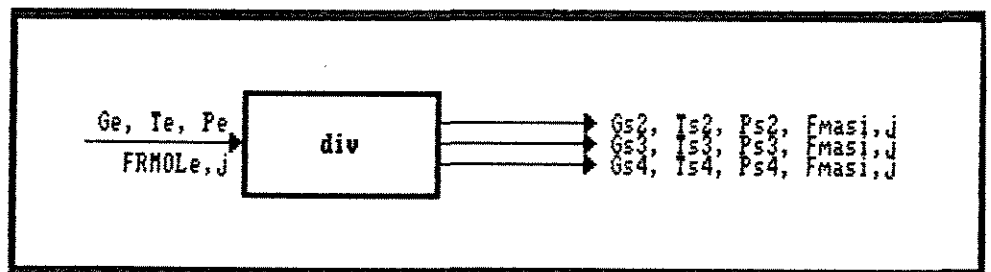


FIG 4.1 - DIVISOR DE CORRENTES

4.4.2 - MISTURADOR (MIT)

O misturador tem por objetivo acumular as vazões das correntes de alimentação em uma corrente de saída, acarretando assim uma variação nas propriedades de temperatura, pressão e frações mássicas da corrente de saída em relação as de entradas.

As correntes devem ser especificadas na matriz do

processo e em se tratando de correntes de alimentação, estas não devem ultrapassar a seis. O parâmetro principal para a unidade modular MIT é o tipo de misturador a ser empregado. Misturadores adiabáticos e isotérmico estão disponíveis na unidade. A temperatura também é um parâmetro a ser considerado para o misturador isotérmico e os calores específicos médios (cps) de cada componente deve ser fornecido para cada componente do processo nos misturadores adiabáticos.

As equações envolvidas na unidade e a representação do MIT (n correntes de entrada) são apresentadas a seguir, onde G, T, P, F_{mas, j}, e e e possuem as mesmas correspondências adotadas na unidade divisor.

- Misturador adiabático

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

$$F_{masj} = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} G_{ei} * F_{mas_{ei,j}}}{\sum_{i=1}^{i=n} G_{ei}}$$

$$T_s = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} \sum_{j=1}^{j=nc} G_{ei} * T_{ei} * C_{pj} * F_{mas_{ei,j}}}{\sum_{j=1}^{j=nc} G_s * F_{mas_{e,j}} * C_{pj}}$$

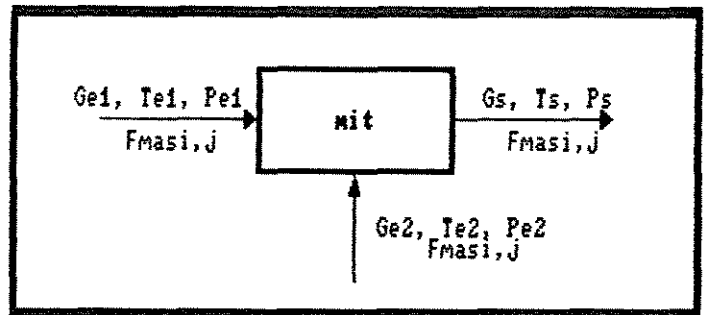


FIG 4.2 - MISTURADOR ADIABATICO

- Misturador isotérmico

$$G_0 = \sum_{i=1}^{i=n} G_{0i}$$

$T_0 = T$ do misturador

$$F_{masj} = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} G_{0i} * F_{mas0i,j}}{\sum_{i=1}^{i=n} G_{0i}}$$

4.4.3 - REATOR (REA)

O reator representa um equipamento onde ocorre alterações químicas sofridas em uma etapa do processo, é uma unidade extremamente importante na simulação de processos, e é imprescindível a sua presença na biblioteca de módulos.

As simplificações adotadas na unidade modular foram as seguintes:

- Reator adiabático ou isotérmico.
- É indiferente quanto a sua classificação, reator batelada, tubular e de mistura.
- A reação pode ser, tanto homogênea como heterogênea.
- Não há necessidade de se conhecer a equação da taxa de velocidade de reação.
- Para a execução do módulo é necessário que se forneça as seguintes informações (parâmetros):
- Identificação dos reagentes e produtos, com seus respectivos pesos moleculares e coeficientes estequiométricos e a determinação do reagente limitante

com o valor da sua taxa de conversão.

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

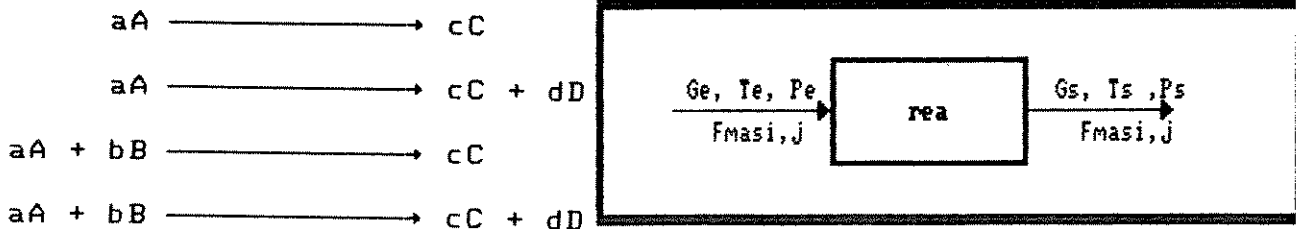


FIG 4.3 - REATOR

Reator isotérmico

Ge = Gs Ts = T do reator Pe = Ps

Para os reagentes

$$F_{masi,j} = (F_{mase,j} / PM_j - (\nu_j / \nu) * X * (F_{masli} / PM_{li})) * PM_j$$

Para os produtos

$$F_{masi,j} = (F_{mase,j} / PM_j + (\nu_j / \nu) * X * (F_{masli} / PM_{li})) * PM_j$$

Reator adiabático

$$G_e = G_s \quad T_e = \frac{\sum_{j=1}^{j=nc} T_e * C_{pj} * F_{mase,j} + (F_{maseli} - F_{massli}) * Q}{\sum_{j=1}^{j=nc} F_{mase,j} * C_{pj}}$$

Pe = Ps

Para os reagentes

$$F_{masi,j} = (F_{mase,j} / PM_j - (\nu_j / \nu) * X * (F_{masli} / PM_{li})) * PM_j$$

Para os produtos

$$F_{masi,j} = (F_{mase,j} / PM_j + (\nu_j / \nu) * X * (F_{masli} / PM_{li})) * PM_j$$

onde:

- PMj - Peso molecular do componente j.

- PM_i - Peso molecular do reagente limite
- ν_j - Coeficiente estequiométrico do componente j
- ν - Coeficiente estequiométrico do reagente limitante
- X - Taxa de conversão em relação ao reagente limitante
- F_{masli} - Fração mássica, reagente limitante
- Q - Calor da reação

4.4.4 - SEPARADOR

Nos processos químicos é comum após as reações a presença de componentes secundários junto com o produto principal, tornando-se necessário realizar etapas de purificação (separação) com objetivo de se obter um produto final desejado.

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

O separador está representado por duas unidades modulares, uma coluna de destilação multicomponente (DESTIL) e um modelo simplificado de simples balanço de massa (unidade(SEP)).

4.4.4.a - COLUNA DE DESTILAÇÃO (DESTIL)

Destilação Multicomponente - Método Rigoroso

A unidade que será apresentada aqui, foi adaptada para fazer interface com o programa executivo e é relacionada com a simulação de uma coluna de destilação multicomponente em estado estacionário.

O programa calcula, a partir das condições previamente estabelecidas pelo operador, o perfil de composição da fase líquida e vapor, temperatura e vazão de vapor e líquido para cada estágio da coluna de destilação, como também as cargas energéticas do refeedor e condensador.

O programa é baseado no método de TOMICH(1970), utilizando o método de Broyden(1965) para a solução do sistema de equações não lineares.

A entrada de dados é feita através de arquivo e um relatório detalhado a respeito das variáveis calculadas pelo programa é fornecida através do arquivo DESTIL (N da unidade).RES que é criado no decorrer da execução do programa.

DADOS DE ENTRADA

Os dados de entrada do programa devem ser fornecidos através do arquivo DESTIL (N da unidade).DAD na sequência indicada abaixo.

Número de estágios de equilíbrio incluindo refeedor e condensador (máximo de 25).

Localização da alimentação (Número do estágio).

Taxa de refluxo.

Fração de recuperação da alimentação total do destilado.

Pressão do sistema (KPa).

Para cada componente fornecer:

- Peso molecular
- Coeficientes do polinômio cúbico (4 coeficientes) para a entalpia molar de líquido em função da temperatura.
- Coeficientes do polinômio cúbico (4 coeficientes) para

a entalpia molar de vapor em função da temperatura.

- Coeficientes para a correlação do valor de K em função da temperatura para uma solução ideal (T em Kelvin e P em KPa).

Equação de K:

$$\ln(K \cdot P) = A + B/T + C \cdot T$$

- Estimativas de temperatura e vazão de vapor (em Kmoles por unidade de tempo) para o topo e base.

4.4.4.b - SEPARADOR (SEP) - BALANÇO SIMPLIFICADO

A unidade SEP, corresponde a um balanço simplificado de um equipamento de separação e admite um número variável de correntes de entrada e saída. Os fatores de separação de cada componente da mistura em relação a cada uma das correntes de saída deverão ser fornecidos pelo operador como parâmetros da unidade SEP.

As equações envolvidas na unidade e a representação do módulo (SEP) são apresentadas a seguir, onde: F, corresponde ao fator de separação e as demais variáveis possuem as mesmas correspondências adotadas pelas unidades anteriores.

$$GR_0 = \sum_{i=1}^{i=n} G_{0i}$$

$$F_{masr,j} = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} G_{0i} \cdot F_{masi,j}}{\sum_{i=1}^{i=n} G_{0i}}$$

$$G_{0i} = \sum_{j=1}^{j=n} F_{si,j} \cdot F_{masr,j} \cdot GR_0$$

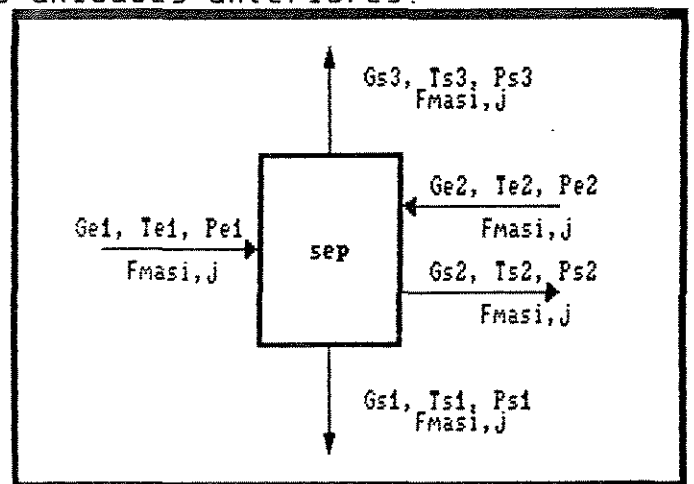


FIG 4.4 - SEPARADOR DE CORRENTES

$$F_{masi,j} = \frac{F_{ai,j} * F_{masre,j} * GR_e}{G_{ai}}$$

4.4.5 - ABSORVEDOR

Existem processos industriais que possuem matéria prima, sub-produto ou produto final sob a forma de mistura de gases. Às vezes, por obrigatoriedade do processo ou até mesmo de operação, torna-se necessário fazer a separação desses gases. O equipamento destinado a esta finalidade denomina-se absorvedor.

Absorção de um gás é uma operação em que uma mistura de gases é contactada com um líquido, com a intenção de transferir um ou mais componentes da mistura gasosa para a fase líquida.

Com o objetivo de representar um absorvedor foram desenvolvidas duas unidades modulares, coluna de absorção com recheio (ABSORÇÃO) e um modelo simplificado com simples balanço de massa (ABSI).

4.4.5.a - COLUNA DE ABSORÇÃO (ABSORÇÃO)

As unidades desenvolvidas até aqui são utilizadas somente para análise de processos. Já este programa, que foi adaptado para fazer interface com o programa executivo, também pode ser utilizado para o projeto de uma coluna de absorção, pois estima a altura de torres de recheio para absorção ou desorção de gases.

O programa calcula, a partir das condições previamente estabelecidas pelo operador, a altura da coluna, as temperaturas e composições de saída, como também o número de unidades de

transferências.

O programa é baseado no método rápido de Feintunch e Treybal (1978), aplicável a sistemas onde o efeito térmico não é muito grande.

A entrada de dados também é feita através de arquivo e um relatório com altura e número de unidade de transferência é fornecida através do arquivo ABSORÇÃO (Número da unidade).RES que é criado no decorrer da execução do programa.

DADOS DE ENTRADA

O arquivo de dados deve ter a seguinte sequência de dados:

Tipo de operação (1-absorção , 2-desabsorção).

Tipo de recheio.

- 1 - Carbono
- 2 - Cerâmica
- 3 - Vidro
- 4 - Parafina
- 5 - Polietileno
- 6 - PVC

Número de componente chave, grau de absorção deste.

Fração do componente chave (1), gás e líquido (entrada)

Fração do outro componente (2): gás e líquido
(entrada)

Para cada componente fornecer:

- Peso molecular
- Propriedades físicas de cada componente.

4.4.5.b - ABSORVEDOR ISOTÉRMICO (ABSI)

A unidade modular ABSI é um balanço simplificado de um absorvedor, onde a taxa de absorção não é calculada através dos dados referente ao equilíbrio do sistema gás-líquido, mas sim introduzida via parâmetro. O operador fornece o percentual em massa de cada componente que se transfere da fase gasosa para a fase líquida. Assim sendo:

$$T_e = T_s$$

$$P_e = P_s$$

$$M_{le,j} = F_{masle,j} * G_{le}$$

$$M_{ge,j} = F_{masge,j} * G_{ge}$$

$$M_{le,j} = M_{ge,j} * X_j + M_{le,j}$$

$$M_{ge,j} = M_{ge,j} - M_{ge,j} * X_j$$

$$G_{le} = G_{le} + \sum_{j=1}^{j=n} M_{ge,j} * X_j$$

$$G_{ge} = G_{le} - \sum_{j=1}^{j=n} M_{ge,j} * X_j$$

$$F_{masle,j} = M_{le,j} / G_{le}$$

$$F_{masge,j} = M_{ge,j} / G_{ge}$$

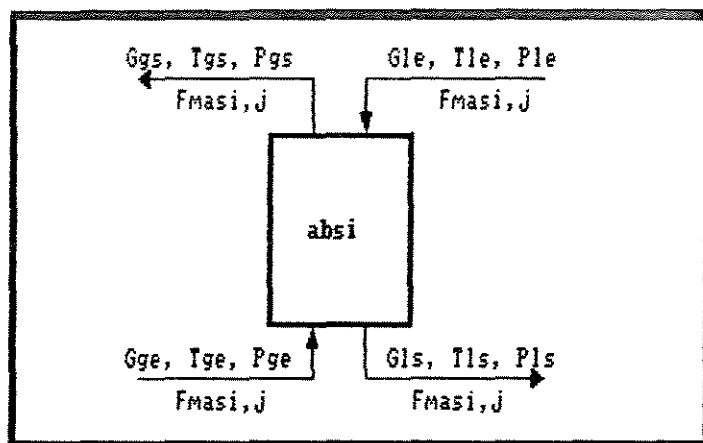


FIG 4.5 - ABSORVEDOR ISOTÉRMICO

4.4.6 - FLASH

A vaporização por flash é uma operação em simples estágio onde uma mistura líquida é vaporizada parcialmente, o vapor estabelece um equilíbrio com o líquido residual, resultando na separação da fase líquida da fase vapor.

O tanque flash é representado por duas unidades modulares, uma levando em consideração a análise do equilíbrio líquido-vapor (flashf) e a outra com modelo simplificado da

separação flash (flash).

4.4.6.a - FLASHF (FLASH)

Este programa (FLASHF.FOR) calcula o equilíbrio "FLASH" de uma mistura multicomponente, de no máximo 10 componentes, sendo especificado a composição da alimentação e os valores de pressão e temperatura. Com estes dados é calculado o valor de Beta (fator de vaporização (V/F)), onde (V/F) é a razão da vazão da fase vapor pela vazão de alimentação.

O método utilizado para o cálculo da constante de equilíbrio (K) admite que as fases líquida e vapor se comportam como ideais, e usa a equação de pressão de vapor de Antoine.

Os pesos moleculares e as constantes de Antoine (T em Kelvin e P em mmHg) para cada componente devem ser fornecidas através do arquivo FLASHF (Número da unidade).DAD.

Equação de Antoine:

$$\ln(P) = A - B / (C + T)$$

4.4.6.b - FLASH (FLASH)

Modelo simplificado, não levando em consideração a análise do equilíbrio líquido-vapor. O operador deve definir qual a corrente de vapor e também fornecer a temperatura, pressão e os fatores de separação de cada componente em relação a corrente de vapor.

As equações envolvidas na unidade (FLASH) e sua representação, são apresentadas a seguir, onde as variáveis possuem as mesmas correspondências adotadas pelo módulo separador

(SEP)

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

$$G_{si} = \sum_{j=1}^{j=n} F_{si,j} * F_{masi,j} * G_e$$

$$F_{masi,j} = \frac{F_{masi,j} * G_{si} * F_{si,j}}{G_{si}}$$

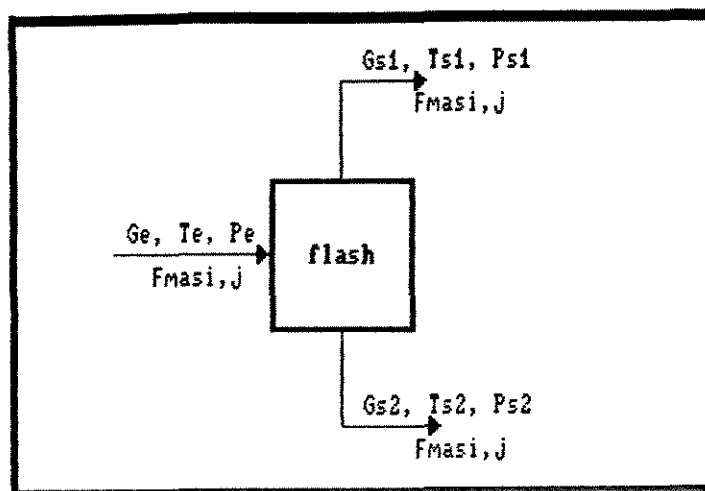


FIG 4.6 - FLASH

4.4.7 - TERMOSTATO (TER), BOMBA OU COMPRESSOR (PRES)

Estas unidades, têm como objetivo representar as variações de temperatura e/ou pressão que ocorrem em uma determinada corrente.

Na unidade TER, a temperatura da corrente de saída foi considerada como uma constante e no módulo PRES, a pressão na corrente de saída é que foi considerada como uma constante, sendo estas, atribuídas pelo usuário como um parâmetro.

Termostato

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

Bomba e compressor

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

4.5 - CONCLUSÃO

As unidades modulares desenvolvidas e adaptadas para trabalharem com o programa executivo, têm como finalidade, representar os equipamentos do processo e principalmente verificar a eficiência do programa.

Unidades simplificadas servirão de teste para os critérios de convergência do programa e são usadas em estimativas de balanços do processo. As unidades mais elaboradas testarão a versatilidade do programa e são responsáveis por simulações detalhadas das plantas. Como foi dito anteriormente novas unidades poderão ser criadas e/ou adaptadas para trabalharem com o programa executivo, permitindo ao usuário obter balanços de massa e energia e simulações mais adequadas do processo.

Como mencionado anteriormente, no desenvolvimento de novos módulos só é necessário a criação de um programa executável correspondente a este novo módulo, não sendo necessária quaisquer alteração no programa gerenciador ou nos demais módulos já existentes.

5 - SIMULAÇÃO

5.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados dos testes de simulação, com objetivo de verificar a eficácia do programa executivo proposto, como também a sua generalidade.

Estes testes foram divididos em três etapas:

1 - Simulação com malha de reciclos - Tem por finalidade testar as etapas do programa até a determinação da sequência de cálculo;

2 - Balanços simplificados de processos - Utilizando as unidades modulares de simples balanço de material, este teste permite verificar a consistência dos métodos de convergência, bem como a viabilidade do programa executivo;

3 - Cálculo de unidades modulares com modelagens mais elaboradas - Permite verificar a flexibilidade de interface deste com vários outros tipos de programas.

5.2 - SIMULAÇÃO COM MALHAS DE RECICLOS

As malhas testadas como exemplos foram escolhidas mediante os seguintes critérios:

- Grau razoável de entrelaçamento de reciclos, permitindo avaliar a flexibilidade do programa na determinação das malhas de reciclo, das correntes de corte e da sequência de cálculo.

- Evitou-se malhas altamente complexas, com um número elevado de reciclos, pois como já foi mencionado na análise da literatura, os simuladores sequenciais são impróprios para trabalhar com este tipo de sistema.

A figura 5.1 representa o fluxograma referente a malha 1.

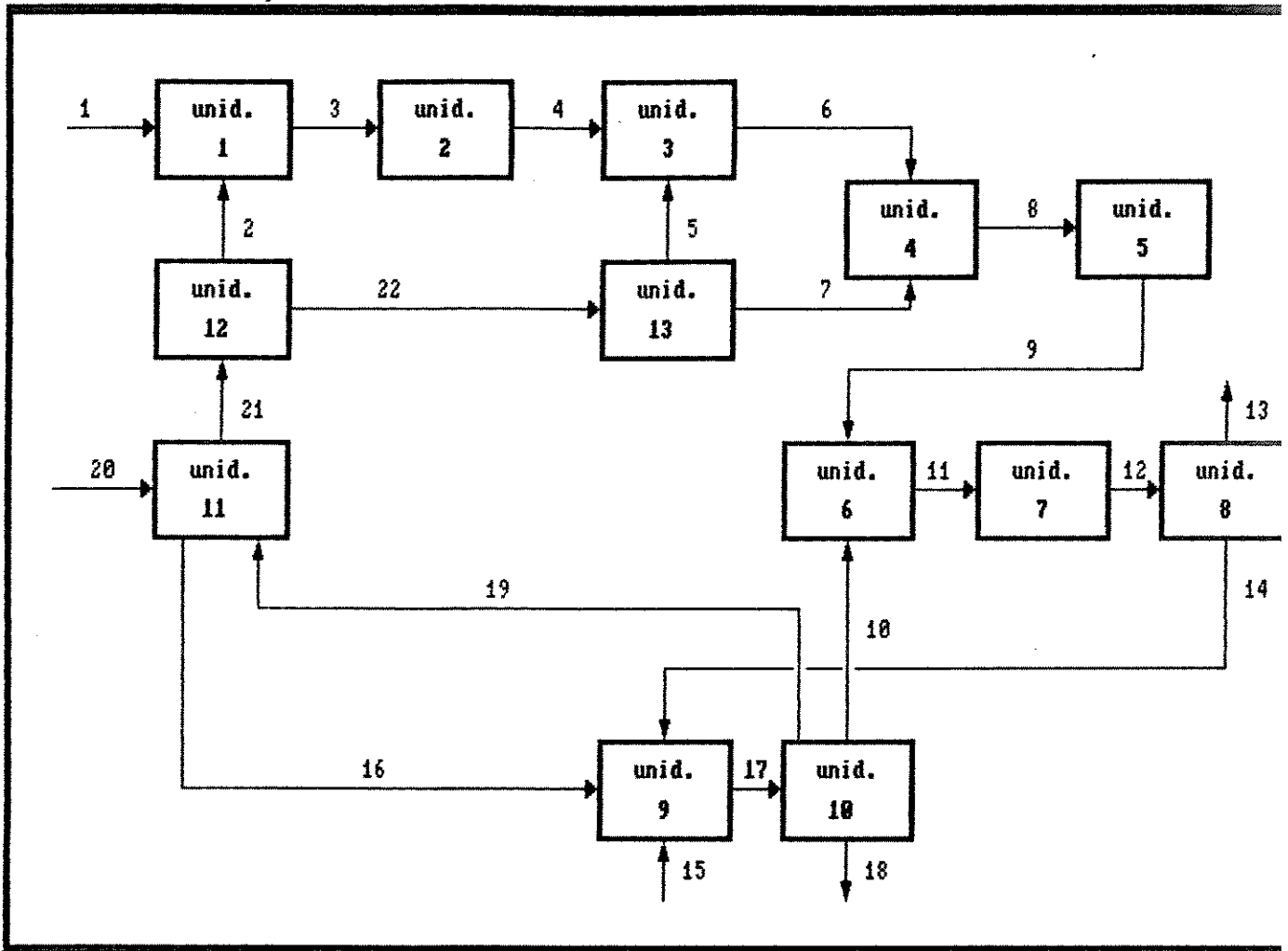


FIG 5.1 - REPRESENTAÇÃO MODULAR DA MALHA 1

Esta malha apresentou os seguintes resultados:

Foram identificados 5 ciclos e apresentadas as unidades que fazem parte de cada ciclo.

- reciclo 1 - unidades: 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12
- reciclo 2 - unidades: 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13
- reciclo 3 - unidades: 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13
- reciclo 4 - unidades: 6 7 8 9 10
- reciclo 5 - unidades: 9 10 11

A corrente de corte determinada foi a 17 e as unidades de toda a malha foram caracterizadas como interdependentes, com a seguinte sequência de cálculo:

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

Já a figura 5.2 representa o fluxograma referente a malha 2.

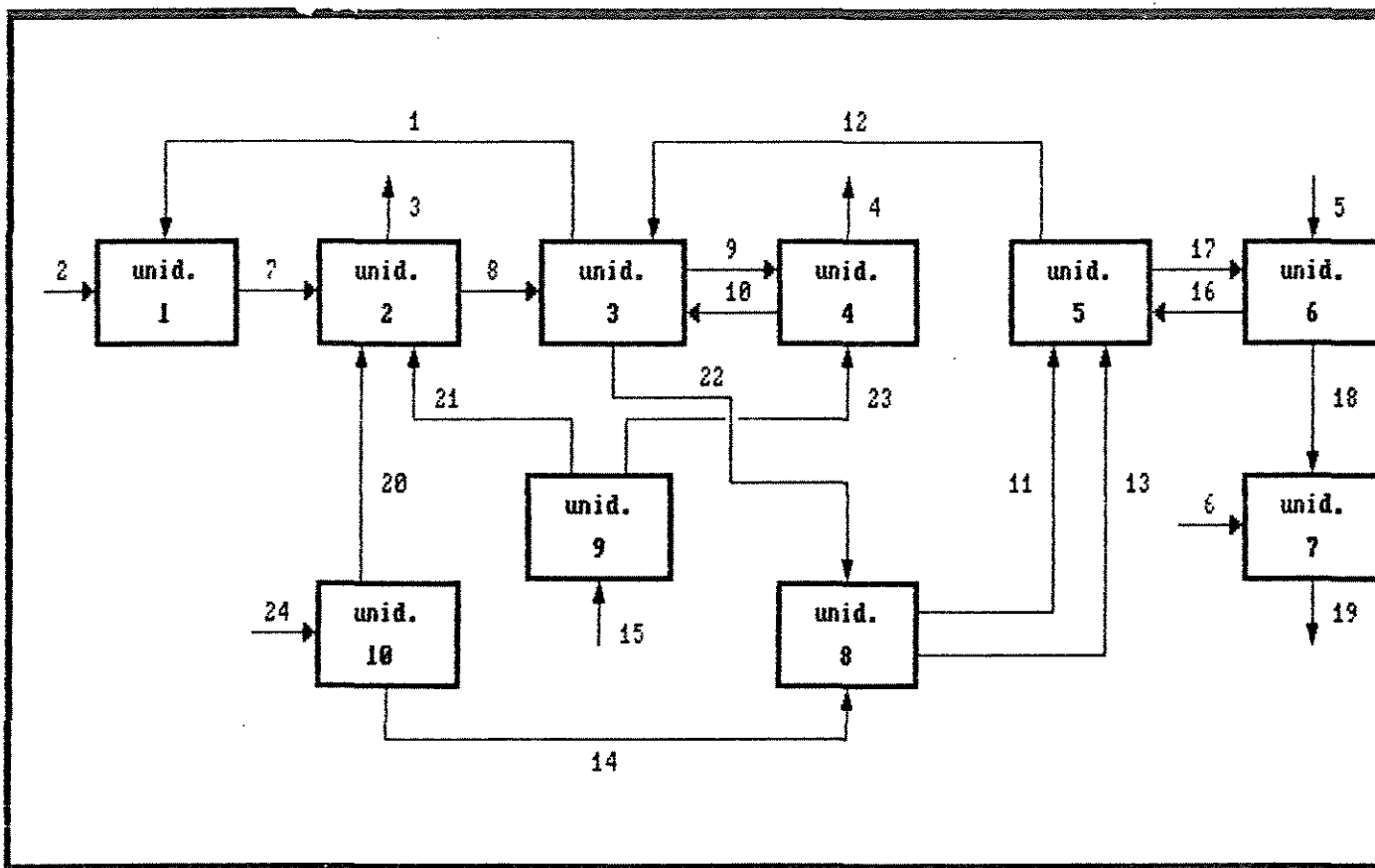


FIG 5.2 - REPRESENTAÇÃO MODULAR DA MALHA 2

Esta malha apresentou os seguintes resultados:

Foram registrados 4 ciclos e apresentadas as unidades que compõem estes ciclos.

reciclo 1 - unidades: 1 2 3

reciclo 2	-	unidades:	3	4	
reciclo 3	-	unidades:	3	8	5
reciclo 4	-	unidades:	5	6	

Foram determinadas 4 correntes de corte: 7 9 22 17

As unidades 9, 2 e 7 foram caracterizadas como independentes e as unidades 2, 4, 8, 6, 5, 3 e 1 foram definidas como interdependentes. A sequência de cálculo apresentada foi a seguinte:

unidade independente	9
unidade independente	10
cálculo iterativo entre as unid.	2 4 8 6 5 3 1
unidade independentes	7

5.4 - BALANÇOS SIMPLIFICADOS DE PROCESSOS

Esta etapa tem por objetivo testar a interface entre programa executivo e unidades modulares, bem como verificar a consistência dos métodos e critérios de convergência adotados.

Para cada balanço efetuado foram feitos testes, utilizando os métodos de substituição sucessiva direta e de Wegstein (a fim de compará-los) adotando, a cada método, critérios de convergências diferentes (desvio relativo e absoluto).

BALANÇO 1

O primeiro exemplo consiste no balanço de massa entre duas unidades modulares: DIV (divisor de correntes) e MIT (misturador), onde são analisadas as variações de vazão. Este

o sistema é constituído por apenas um subsistema, que contém duas unidades interdependentes.

A figura 5.3 apresenta o fluxograma do balanço 1, onde a vazão das correntes: alimentação (1) e corte (2, valor inicial), adotadas, são de 100 kg/min.

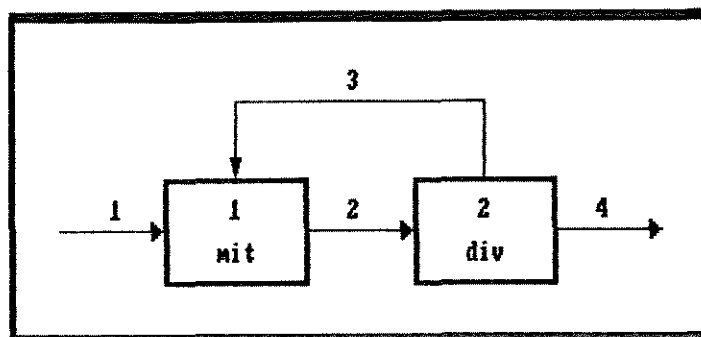


FIG 5.3 - BALANÇO 1

Foram feitos testes utilizando vários fatores de divisão (unidade divisor), com os seguintes resultados:

Para o método de substituição sucessiva direta com desvio relativo de 1% (em relação a vazão), obteve-se 13 iterações com erro máximo nos valores de vazão das correntes de 4,4%.

Para o método de substituição sucessiva direta com desvio absoluto de 1 kg/min (em relação a vazão), obteve-se 20 iterações com 0,9% de erro.

Para o método de Wegstein, tanto com desvio relativo quanto absoluto de uma unidade, o número de iterações obtidas foi de 2 e houve 0% de erro.

BALANÇO 2

O segundo exemplo consiste no balanço de massa entre quatro unidades modulares: dois divisores de corrente (DIV) e dois misturadores (MIT), onde também são analisadas as variações de

vazão. Este sistema é constituído por dois subsistemas idênticos ao do balanço anterior. Observe a figura 5.4.

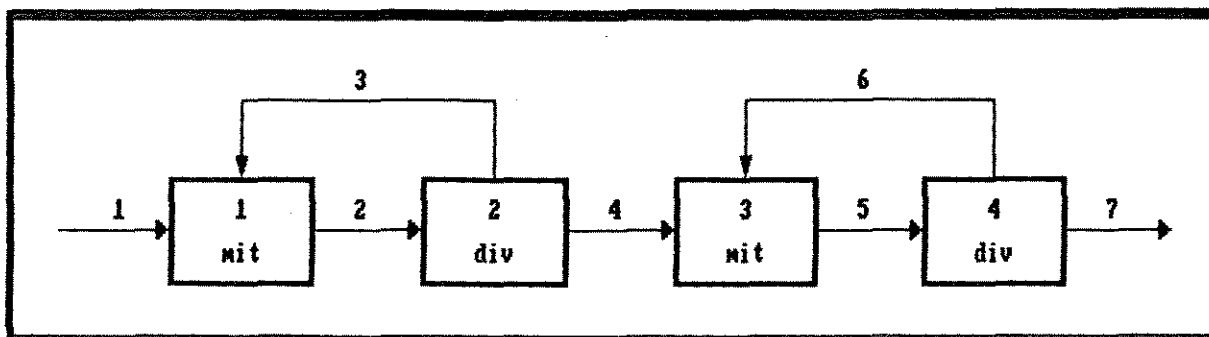


FIG 5.4 - BALANÇO 2

Através da ordem de cálculo estipulada, o programa gerencia e calcula as unidades referentes ao primeiro subsistema até obter-se a convergência. A seguir, o programa efetua o próximo subsistema, utilizando os métodos e critérios de convergência adotados pelo usuário (para cada subsistema).

O sistema 2 corresponde a dois sistemas 1 em série, sendo que, os resultados obtidos neste balanço apresentaram semelhanças aos anteriores. O número de iterações para cada subsistema foram iguais ao do balanço 1 e os erros encontrados foram praticamente duplicados, como pode ser verificado na tabela 5.1.

TAB 5.1 - RESULTADOS DO BALANÇO 2

Subsistema 1		Subsistema 2		erro (%)
Método	Desvio	Método	Desvio	
S. sucessiva	absoluto	S. sucessiva	absoluto	1,8
S. sucessiva	relativo	S. sucessiva	relativo	8,5
Wegstein	rel. e absol.	S. sucessiva	absoluto	0,9
Wegstein	rel. e absol.	Wegstein	rel. e absol.	0,0

BALANÇOS 3 E 4

O terceiro e quarto exemplos consistem também, em balanços referentes às unidades anteriores (MIT e DIV), porém arranjadas de forma diferente. Observe as figuras 5.5 e 5.6.

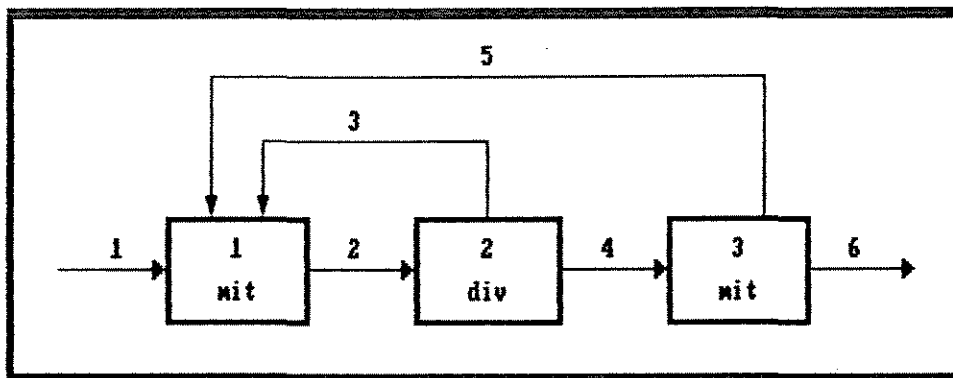


FIG 5.5 - BALANÇO 3

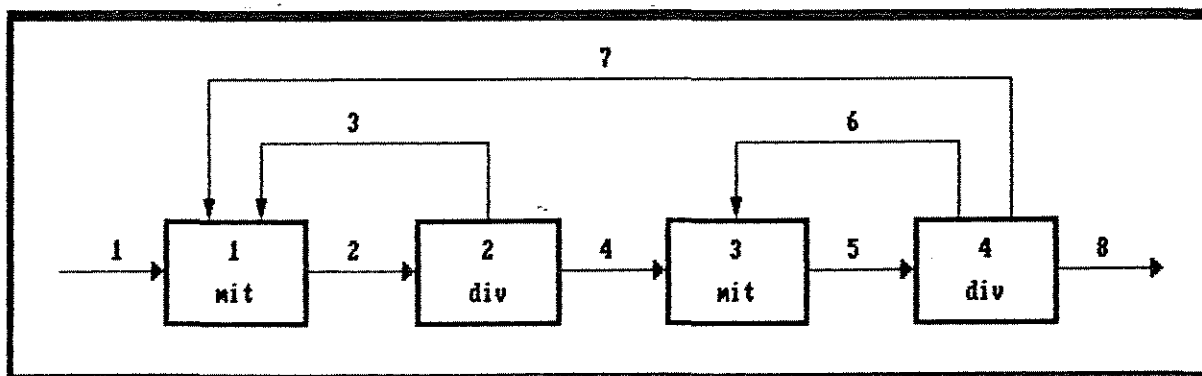


FIG 5.6 - BALANÇO 4

O sistema 3 é constituído por um subsistema que contém dois laços de reciclos. Já o sistema 4 também possui um subsistema, mas com três laços de reciclos.

Foram feitos testes utilizando vários fatores de divisão e também com vários valores iniciais para a corrente de corte, com os seguintes resultados:

Balanço 3

Para o método de substituição sucessiva direta com desvio relativo de 1% (em relação a vazão) e absoluto de 1 kg/min, obteve-se 26 e 55 iterações com erros máximos de 10,5% e 0,94% respectivamente.

Para o método de Wegstein, tanto com o desvio relativo quanto com o absoluto de uma unidade, o número de iterações foi de 2 e houve 0% de erro.

Balanço 4

Para o método de substituição sucessiva direta com desvio relativo de 1% (em relação a vazão) e absoluto de 1 kg/min, obteve-se 28 e 53 iterações com erros máximos de 11,1% e 1,52% respectivamente.

Para o método de Wegstein, tanto com o desvio relativo quanto com o absoluto de uma unidade, não houve convergência dos resultados.

BALANÇO 5 E 6

Estes exemplos foram criados não só para analisar as variações da vazão, temperatura, pressão, e composição das correntes do processo como, também, para testar a operacionalidade

das unidades modulares desenvolvidas.

BALANÇO 5

A figura 5.7 apresenta o fluxograma do balanço 5, sendo os resultados da simulação deste processo mostrado na tabela 5.2.

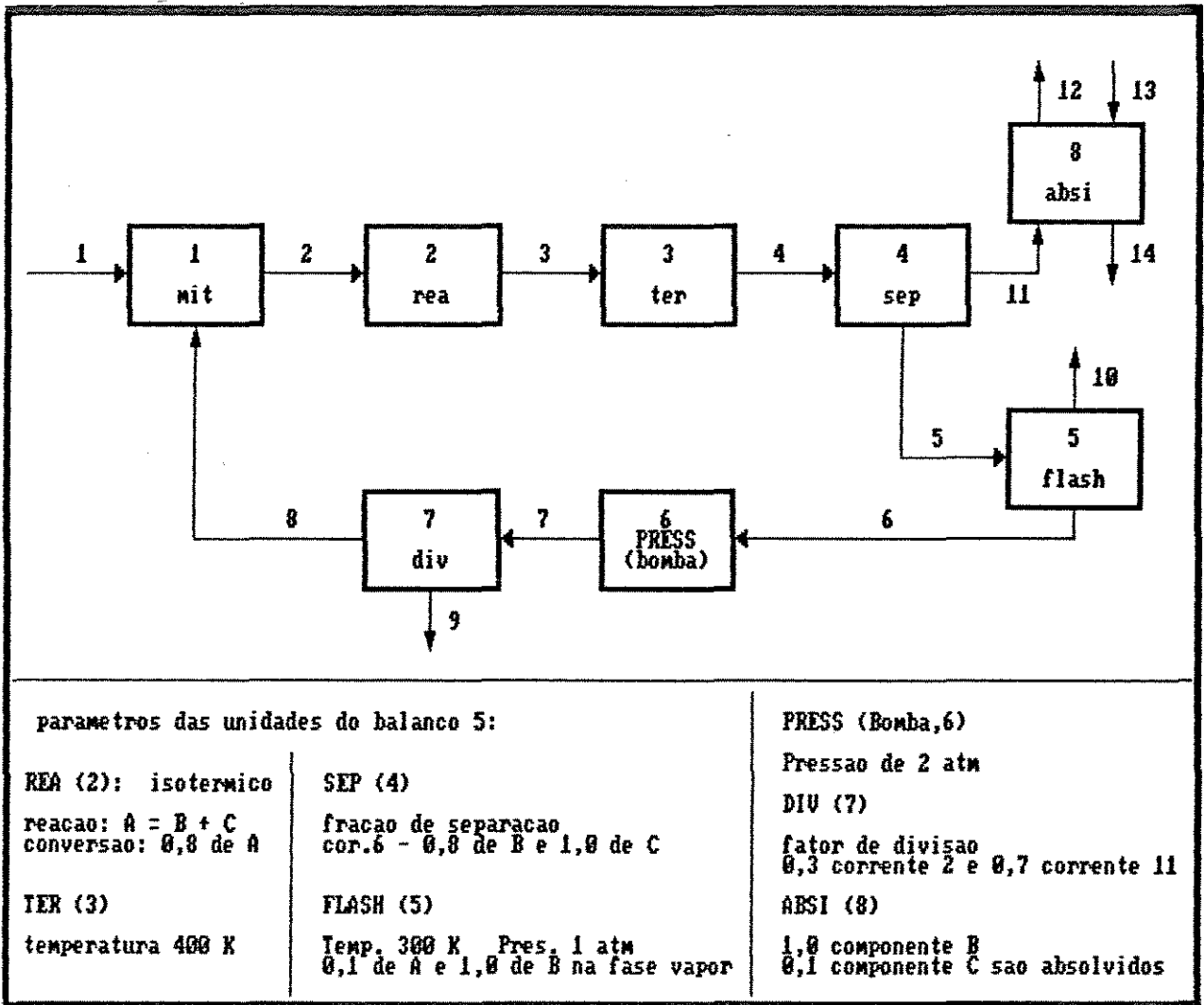


FIG 5.7 - REPRESENTACAO MODULAR DO BALANÇO 5.

TAB 5.2 - RELATORIO FINAL (BALANÇO 5 -METODO DE WEGSTEIN, TOL 1%)

RELATÓRIO FINAL - BALANÇO_5					
Componentes		N ^o de iterações = 3			
		Vz - vazão (kg/min)			
		Te - temperatura (K)			
		Pr - pressão (atm)			
		x - fração mássica			
		c. - corrente			
1 - A	5 - E				
2 - B					
3 - C					
4 - D					
c. 1	Vz=100,00	Te=300,0	Pr=2,00		
	x1=0,6000	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,4000	x5=0,0000
c. 2	Vz=20,54	Te=300,0	Pr=2,00		
	x1=0,1657	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,8343	x5=0,0000
c. 3	Vz=120,20	Te=300,0	Pr=2,00		
	x1=0,5256	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,4744	x5=0,0000
c. 4	Vz=120,34	Te=300,0	Pr=2,00		
	x1=0,1047	x2=0,3142	x3=0,1047	x4=0,4747	x5=0,0000
c. 5	Vz=120,34	Te=400,0	Pr=2,00		
	x1=0,1047	x2=0,3142	x3=0,1047	x4=0,4747	x5=0,0000
c. 6	Vz=42,86	Te=400,0	Pr=2,00		
	x1=0,0000	x2=0,7059	x3=0,2941	x4=0,0000	x5=0,0000
c. 7	Vz=77,29	Te=400,0	Pr=2,00		
	x1=0,1630	x2=0,0979	x3=0,0000	x4=0,7391	x5=0,0000
c. 8	Vz=8,82	Te=300,0	Pr=1,00		
	x1=0,1430	x2=0,8570	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,0000
c. 9	Vz=68,47	Te=300,0	Pr=1,00		
	x1=0,1657	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,8343	x5=0,0000
c. 10	Vz=68,47	Te=300,0	Pr=2,00		
	x1=0,1657	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,8343	x5=0,0000
c. 11	Vz=47,93	Te=300,0	Pr=2,00		
	x1=0,1657	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,8343	x5=0,0000
c. 12	Vz=100,00	Te=300,0	Pr=2,00		
	x1=0,0000	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=1,0000
c. 13	Vz=11,38	Te=400,0	Pr=2,00		
	x1=0,0000	x2=0,0000	x3=1,0000	x4=0,0000	x5=0,0000
c. 14	Vz=131,51	Te=300,0	Pr=2,00		
	x1=0,0000	x2=0,2300	x3=0,0096	x4=0,0000	x5=0,7604

A figura 5.8 apresenta o fluxograma do balanço 6, sendo os resultados da simulação deste processo mostrado na tabela 5.3.

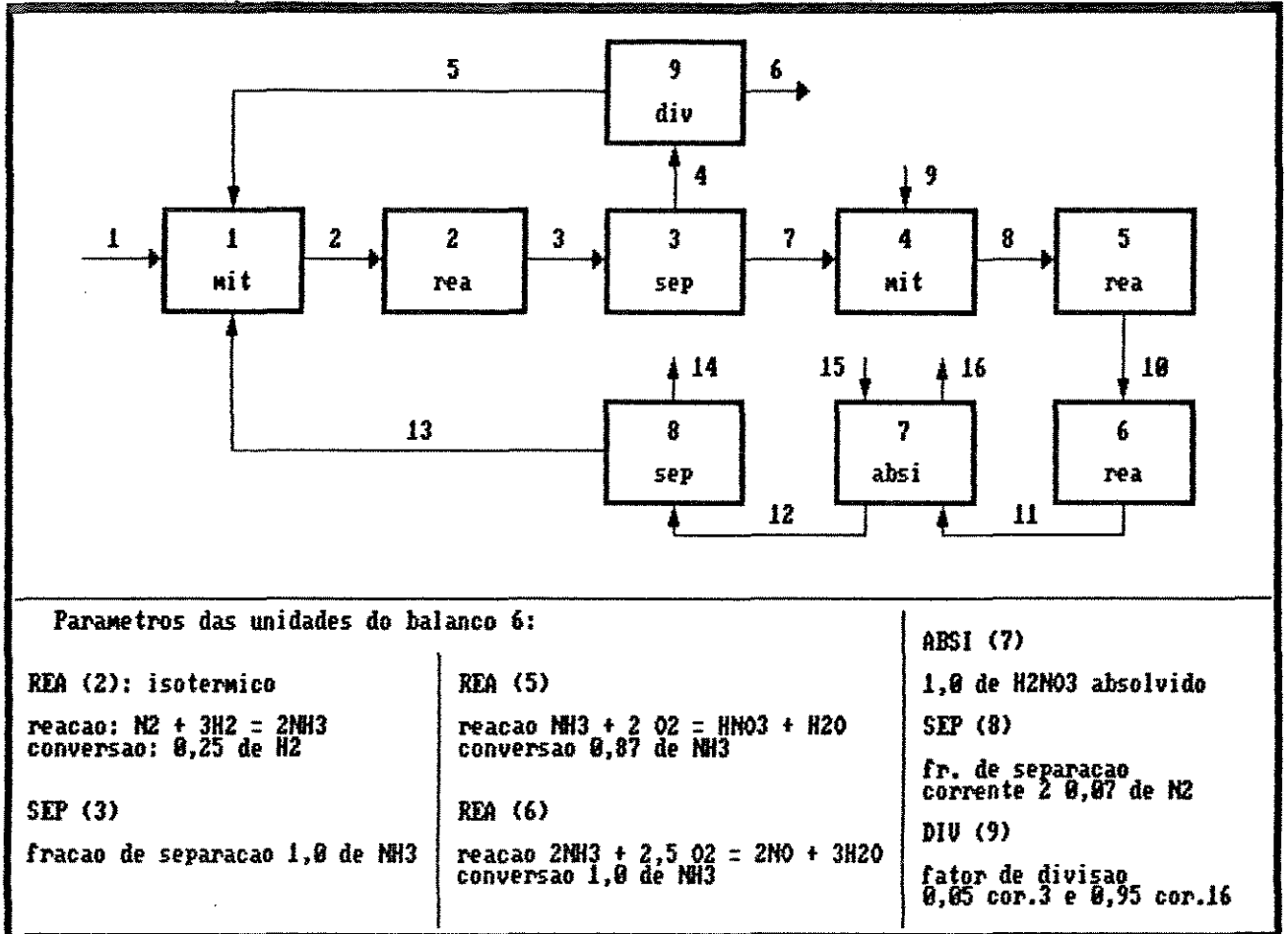


FIG 5.8 - REPRESENTACAO MODULAR DO BALANCO 6

TAB 5.3 - RELATORIO FINAL (BALANÇO 6- METODO S. SUCESSIVA, TOL 1%)

RELATÓRIO FINAL - BALANÇO_6						
Componentes				N ^o de iterações = 9		
1 - N2	5 - HNO3			Vz - vazão (kg/s)		
2 - H2	6 - H2O			Te - temperatura (K)		
3 - NH3	7 - NO			Pr - pressão (atm)		
4 - O2				x. - fração mássica		
				c. - corrente		
c.1	Vz=0,44	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,0000	x2=1,0000	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.2	Vz=17,42	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,9120	x2=0,0880	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.3	Vz=17,27	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,8074	x2=0,0667	x3=0,1260	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.4	Vz=15,09	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,9237	x2=0,0763	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.5	Vz=14,34	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,9237	x2=0,0763	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.6	Vz=0,75	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,9237	x2=0,0763	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.7	Vz=2,17	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,0000	x2=0,0000	x3=1,0000	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.8	Vz=51,20	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,7373	x2=0,0000	x3=0,0425	x4=0,2202	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.9	Vz=49,03	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,7700	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,2300	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.10	Vz=51,20	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,7373	x2=0,0000	x3=0,0055	x4=0,0811	x5=0,1369	x6=0,0391	
x7=0,0000						
c.11	Vz=51,20	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,7373	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,0681	x5=0,1369	x6=0,0479	
x7=0,0097						
c.12	Vz=41,74	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,9045	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,0836	x5=0,0000	x6=1,0000	
x7=0,0120						
c.13	Vz=2,64	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=1,0000	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0000						
c.14	Vz=39,10	Te=300,0	Pr=1,00			
x1=0,8980	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,0892	x5=0,0000	x6=0,0000	
x7=0,0128						

TAB 5.3 - CONTINUAÇÃO

c.15Vz=1,98	Te=300,00	Pr=1,00				
x1=0,0000	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,0000	x6=1,0000	x7=0,0000
c.16Vz=11,44	Te=300,00	Pr=1,00				
x1=0,0000	x2=0,0000	x3=0,0000	x4=0,0000	x5=0,6127	x6=0,3873	x7=0,0000

5.4 - CÁLCULOS DE UNIDADES MODULARES COM MODELAGENS MAIS ELABORADAS

Com o objetivo de verificar a flexibilidade de interface do programa executivo com outros tipos de programas, foi feita a simulação do fracionamento de uma mistura de n-butano, n-pentano e n-hexano através de duas colunas de destilação em série (Fig 5.5).

As características operacionais das colunas de destilação utilizadas foram:

TAB 5.4 - CARACTERÍSTICAS OPERACIONAIS DAS COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Características operacionais	Coluna 1	Coluna 2
Número de estágios (incl. refeedor)	21	23
Estágio de alimentação	11	11
Pressão do sistema	5 atm	5 atm
Condensador	parcial	parcial
Taxa de refluxo	1.37	1.37

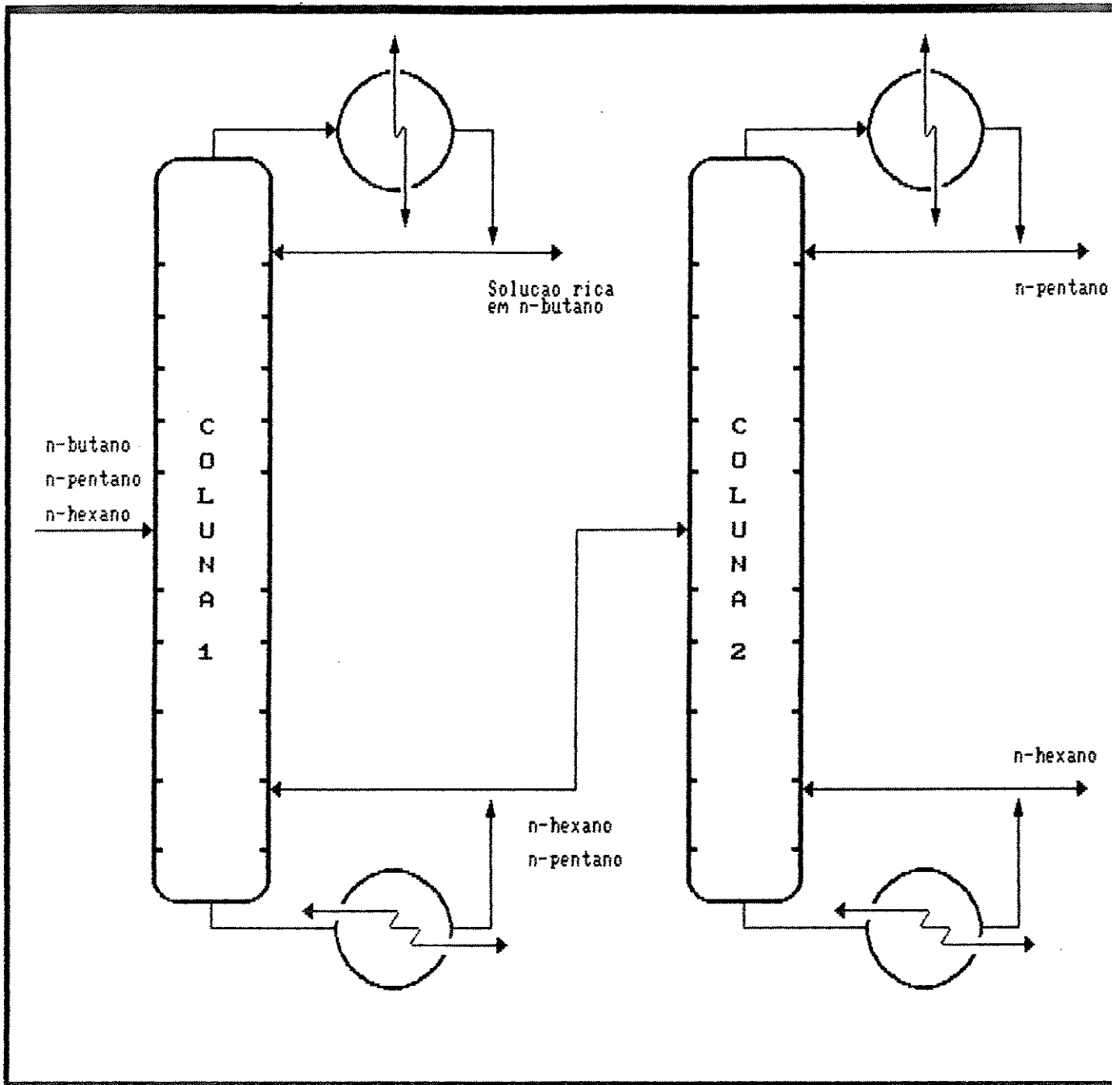


FIG 5.9 - FRACIONAMENTO DE N-C4, N-C5 E N-C6 ATRAVES DE DUAS COLUNAS EM SERIE

A coluna 1 é alimentada com a mistura ternária e esta é separada em uma corrente de topo (2) rica em n-butano e outra contendo n-pentano e n-hexano. A corrente (3) serve de alimentação para a segunda coluna (coluna 2) onde pentano e hexano são separados.

A alimentação do processo possui as seguintes características:

TAB 5.5 - CARACTERÍSTICAS DA ALIMENTAÇÃO

Características	Alimentação
Vazão (Kg/h)	19.705
Temperatura (K)	341
Pressão (atm)	5
Fração mássica:	
n-butano	0.2417
n-pentano	0.3500
n-hexano	0.4083

Depois de introduzir os valores da alimentação através do programa executivo, este executa o programa DESTIL para as colunas 1 e 2. Ao término da execução de cada coluna é criado um relatório no arquivo DESTIL (número da col.).RES com os valores de temperatura, vazão e composição das fases líquida e vapor, como também o calor retirado no condensador e fornecido no refeedor.

A seguir é apresentado o relatório final do programa executivo, bem como os relatórios referentes às colunas para o fracionamento de n-butano, n-pentano e n-hexano.

TAB 5.6 - RELATORIO FINAL (COLUNAS DE DESTILACAO EM SERIE)

RELATÓRIO FINAL - FRACIONAMENTO_DE_N-C4,_N-C5_E_N-C6			
Componentes	N-º de iterações = 0		
1 - nbutano	Vz - vazão (kg/h)		
2 - npentano	Te - temperatura (K)		
3 - nhexano	Pr - pressão (atm)		
	x. - fração mássica		
	c. - corrente		
c.1	Vz=19705,40	Te=341,0	Pr=5,00
	x1=0,2417	x2=0,3500	x3=0,4083
c.2	Vz=5760,15	Te=327,0	Pr=5,00
	x1=0,8178	x2=0,1822	x3=0,0000
c.3	Vz=13945,25	Te=385,4	Pr=5,00
	x1=0,0038	x2=0,4193	x3=0,5770
c.4	Vz=5751,19	Te=359,8	Pr=5,00
	x1=0,0091	x2=0,9908	x3=0,0001
c.5	Vz=8194,06	Te=418,7	Pr=5,00
	x1=0,0000	x2=0,0182	x3=0,9818

DESTILACAO MULTICOMPONENTE EM REGIME ESTACIONARIO
Metodo de Tomich

- 1 nbutano
- 2 npentano
- 3 nhexano

Numero de estagios de equilibrio (incluido o refervedor) = 23

No.	Prato	SL	SV	FEEDL	FEEDV	HLFEED	HVFEI
1	11	.000	.000	273.143	.000	.3178E+05	.000001

Composicao (fracao molar)

Alimentacao liquida:

Prato	11	3000	3500	3500
Prato 11		.3000	.3500	.3500

Taxa de refluxo = 1.37

Vazao de destilado = .9560E+02 KMol

Vazao de produto de fundo = .1775D+03 KMol

Pressao do sistema = .5065E+03 KPa

Condensador: parcial

Convergiu em 9 iteracoes

Prato	T	V	L
1	326.8	.9560D+02	.1310D+03
2	332.1	.2266D+03	.1173D+03
3	335.7	.2129D+03	.1100D+03
4	337.7	.2056D+03	.1067D+03
5	338.6	.2023D+03	.1053D+03
6	339.0	.2009D+03	.1047D+03
7	339.2	.2003D+03	.1044D+03
8	339.4	.2000D+03	.1040D+03
9	340.2	.1996D+03	.1027D+03
10	343.0	.1983D+03	.9850D+02
11	350.8	.1941D+03	.4007D+03
12	353.8	.2231D+03	.3901D+03
13	357.1	.2126D+03	.3802D+03
14	360.4	.2026D+03	.3715D+03
15	363.5	.1939D+03	.3644D+03
16	366.2	.1868D+03	.3589D+03
17	368.4	.1814D+03	.3548D+03
18	370.1	.1773D+03	.3518D+03
19	371.5	.1743D+03	.3496D+03
20	372.5	.1721D+03	.3480D+03
21	373.5	.1705D+03	.3466D+03
22	374.7	.1691D+03	.3448D+03
23	377.6	.1673D+03	.3419D+03
24	385.6	.1644D+03	.1775D+03

Composicao da fase liquida

Prato	1	2	3
1	.6833	.3167	.0000
2	.5407	.4593	.0000
3	.4531	.5469	.0000
4	.4092	.5908	.0000
5	.3894	.6105	.0001
6	.3808	.6188	.0004
7	.3769	.6216	.0015
8	.3740	.6196	.0064
9	.3678	.6062	.0261
10	.3477	.5563	.0960
11	.2990	.4314	.2695
12	.2542	.4660	.2798
13	.2085	.5013	.2902
14	.1653	.5347	.2999
15	.1271	.5644	.3085
16	.0951	.5894	.3156
17	.0694	.6094	.3212
18	.0497	.6248	.3255
19	.0348	.6363	.3289
20	.0239	.6439	.3322
21	.0159	.6464	.3377
22	.0101	.6370	.3529
23	.0059	.5920	.4022
24	.0027	.4588	.5385

Composicao da fase vapor

1	.8522	.1478	.0000
2	.7545	.2455	.0000
3	.6806	.3194	.0000
4	.6386	.3614	.0000
5	.6185	.3815	.0000
6	.6096	.3903	.0000
7	.6058	.3940	.0002
8	.6041	.3951	.0008
9	.6031	.3936	.0033
10	.6013	.3852	.0135
11	.5962	.3551	.0487
12	.5348	.4096	.0556
13	.4642	.4721	.0637
14	.3889	.5385	.0726
15	.3142	.6042	.0816
16	.2453	.6648	.0900
17	.1855	.7172	.0974
18	.1363	.7602	.1035
19	.0975	.7940	.1085
20	.0679	.8193	.1127
21	.0459	.8367	.1174
22	.0298	.8434	.1268
23	.0180	.8261	.1559
24	.0093	.7357	.2550

Calor retirado no condensador = .1757E+07 KJ
 Calor fornecido no refeedor = .1293E+08 KJ

DESTILACAO MULTICOMPONENTE EM REGIME ESTACIONARIO
Metodo de Tomich

- 1 nbutano
- 2 npentano
- 3 nhexano

Numero de estagios de equilibrio (incluido o refervedor) = 23

No.	Prato	SL	SV	FEEDL	FEEDV	HLFEED	HVFE
1	11	.000	.000	177.543	.000	.4289E+05	.0000

Composicao (fracao molar)

Alimentacao liquida:

Prato 11 .0027 .4588 .5385

Taxa de refluxo = 1.37

Vazao de destilado = .7989E+02 KMol

Vazao de produto de fundo = .9765D+02 KMol

Pressao do sistema = .5065E+03 KPa

Condensador: parcial

Convergiu em 11 iteracoes

Prato	T	V	L
1	359.9	.7989D+02	.1095D+03
2	360.0	.1893D+03	.1093D+03
3	360.1	.1892D+03	.1092D+03
4	360.3	.1891D+03	.1088D+03
5	360.7	.1887D+03	.1080D+03
6	361.6	.1879D+03	.1064D+03
7	363.6	.1863D+03	.1035D+03
8	367.2	.1834D+03	.9984D+02
9	372.4	.1797D+03	.9655D+02
10	378.2	.1764D+03	.9470D+02
11	383.1	.1746D+03	.2718D+03
12	383.3	.1741D+03	.2717D+03
13	383.4	.1740D+03	.2717D+03
14	383.7	.1740D+03	.2716D+03
15	384.3	.1739D+03	.2715D+03
16	385.4	.1738D+03	.2715D+03
17	387.5	.1738D+03	.2718D+03
18	390.9	.1741D+03	.2731D+03
19	395.9	.1754D+03	.2767D+03
20	402.1	.1790D+03	.2832D+03
21	408.3	.1856D+03	.2918D+03
22	413.2	.1942D+03	.3003D+03
23	416.7	.2027D+03	.3070D+03
24	418.7	.2094D+03	.9765D+02

Composicao da fase liquida

Prato	1	2	3
1	.0026	.9969	.0004
2	.0017	.9970	.0012
3	.0015	.9952	.0032
4	.0015	.9907	.0077
5	.0014	.9800	.0185
6	.0014	.9559	.0426
7	.0014	.9066	.0919
8	.0013	.8215	.1771
9	.0012	.7076	.2912
10	.0011	.5938	.4051
11	.0010	.5055	.4934
12	.0005	.5046	.4948
13	.0002	.5023	.4974
14	.0001	.4973	.5024
15	.0000	.4875	.5122
16	.0000	.4689	.5309
17	.0000	.4357	.5641
18	.0000	.3820	.6179
19	.0000	.3075	.6925
20	.0000	.2226	.7776
21	.0000	.1441	.8561
22	.0000	.0842	.9160
23	.0000	.0447	.9554
24	.0000	.0211	.9789

Composicao da fase vapor

1	.0060	.9938	.0001
2	.0040	.9956	.0003
3	.0035	.9956	.0008
4	.0034	.9946	.0019
5	.0034	.9920	.0045
6	.0034	.9859	.0107
7	.0034	.9722	.0244
8	.0034	.9446	.0519
9	.0034	.8981	.0984
10	.0034	.8372	.1594
11	.0033	.7768	.2197
12	.0016	.7772	.2211
13	.0007	.7759	.2232
14	.0003	.7723	.2272
15	.0002	.7646	.2350
16	.0001	.7494	.2502
17	.0000	.7204	.2792
18	.0000	.6682	.3315
19	.0000	.5829	.4170
20	.0000	.4637	.5363
21	.0000	.3285	.6717
22	.0000	.2059	.7944
23	.0000	.1146	.8857
24	.0000	.0557	.9445

Calor retirado no condensador = .2531E+07 KJ
 Calor fornecido no refeedor = .1241E+08 KJ

CONCLUSÕES E
SUGESTÕES

6.1 - CONCLUSÕES

O programa executivo com suas respectivas unidades modulares está apto em calcular o balanço de massa global de processos químicos com reciclos. Simulações mais elaboradas poderão ser executadas a partir da incorporação de novas unidades modulares com modelagens mais complexas na biblioteca de módulos.

O programa executivo proposto apresentou uma grande versatilidade em trabalhar com tipos de unidades diferentes e também de possuir um grande potencial em fazer interface com banco de dados, cálculo de propriedades termodinâmicas, entre outros. Uma grande vantagem do programa é que este trabalha com unidades modulares totalmente independentes que podem ser simuladas separadamente sem a presença do programa executivo. Outra grande vantagem é que a incorporação de novos módulos é muito fácil de ser realizada.

Vários testes foram realizados e, propositalmente, escolhidos exemplos bem variados e de características diferenciadas, tais como: simulação com malha de reciclos, balanços simplificados de processos e cálculos de unidades modulares com modelagens mais elaboradas. Em todos os testes o programa apresentou resultados idênticos aos existentes na literatura. Assim sendo, pode-se afirmar que o programa atende aos objetivos para os quais foi proposto.

6.2 - SUGESTÕES

Para unidades modulares que possuem cálculos de propriedades físicas e termodinâmicas, é necessário que o usuário

entre com os valores do peso molecular, coeficientes do polinômio cúbico para entalpia molar de vapor e líquido em função da temperatura, entre outros. Para evitar que isto ocorra seria interessante criar uma interface do programa executivo com algum banco de dados. Ainda referente às unidades com modelagens detalhadas, seria oportuno o desenvolvimento de programas independentes de predição de propriedades físicas e termodinâmicas.

ANEXO

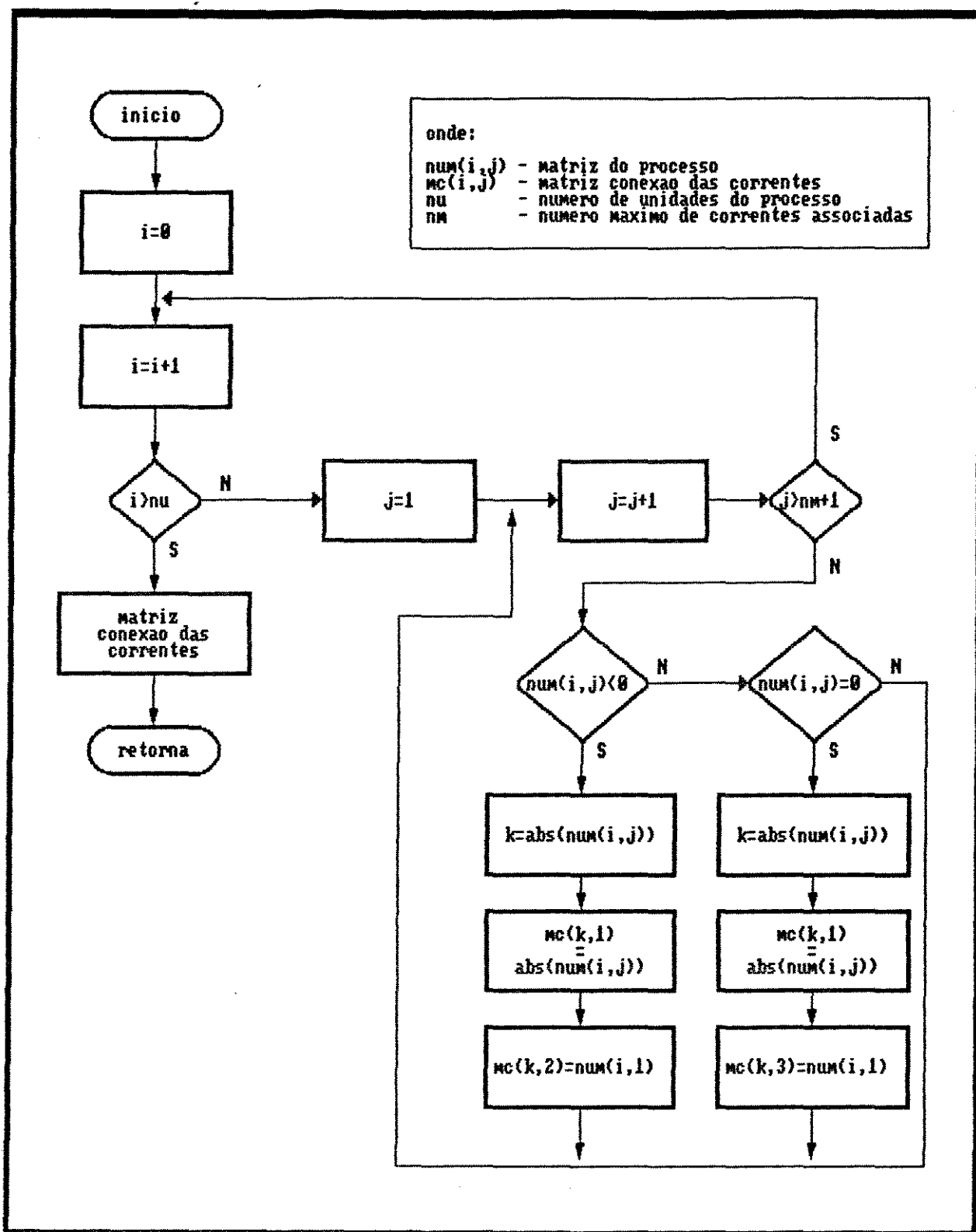


FIG 1 - FLUXOGRAMA PARA O CALCULO DA MATRIZ CONEXAO DAS CORRENTES

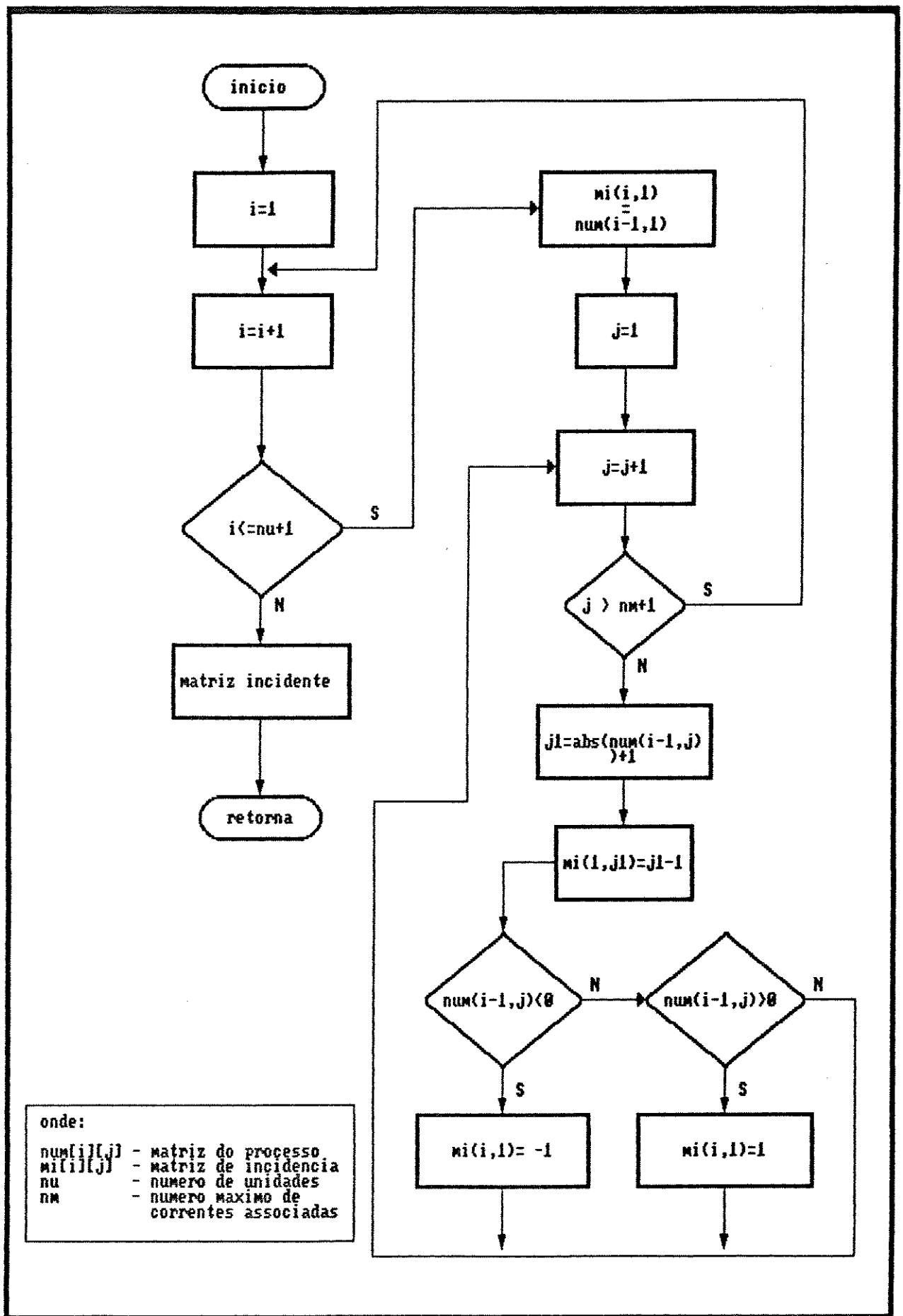


FIG 2 - FLUXOGRAMA PARA O CALCULO DA MATRIZ DE INCIDENCIA

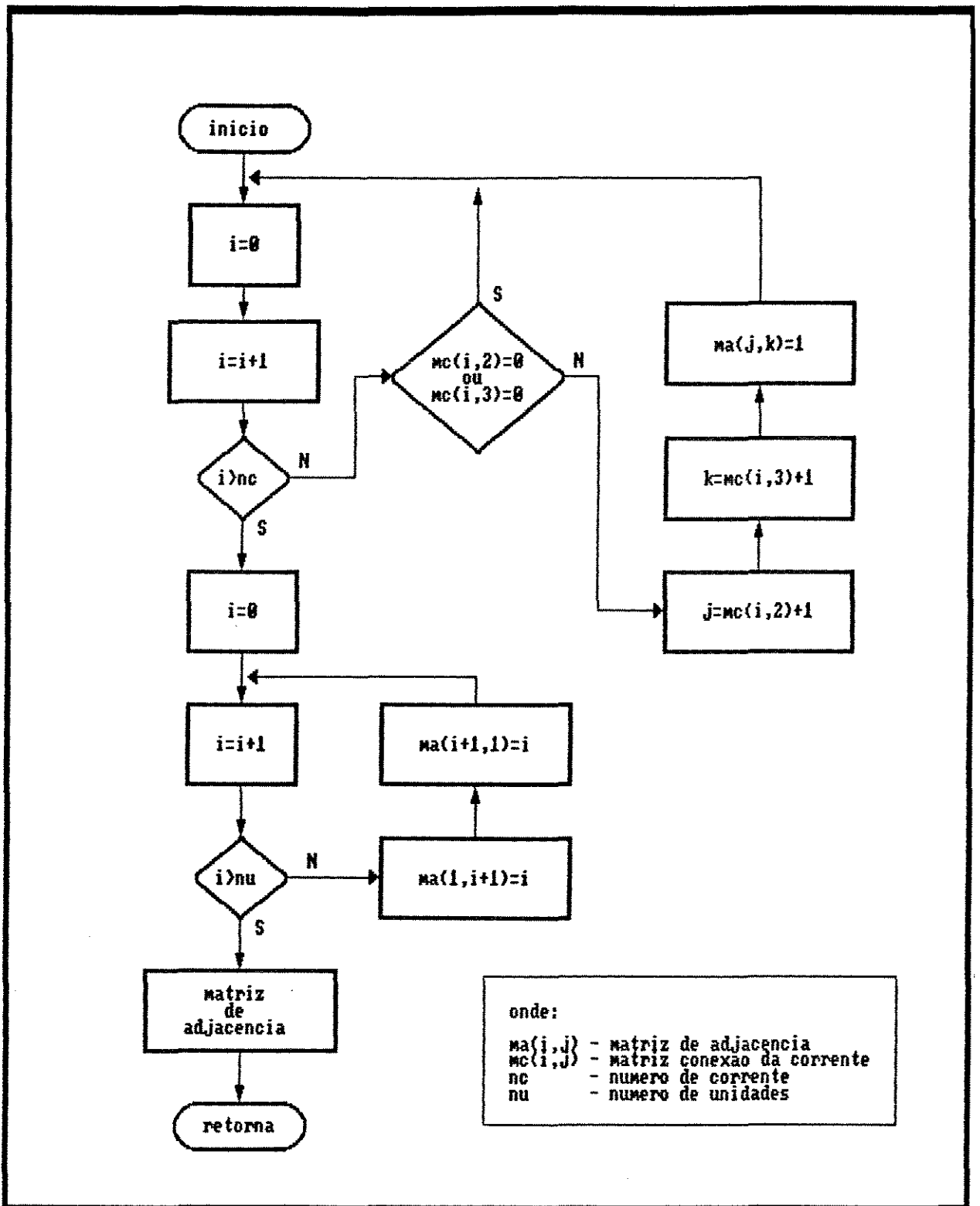


FIG 3 -FLUXOGRAMA PARA O CALCULO DA
 MATRIZ DE ADJACENCIA

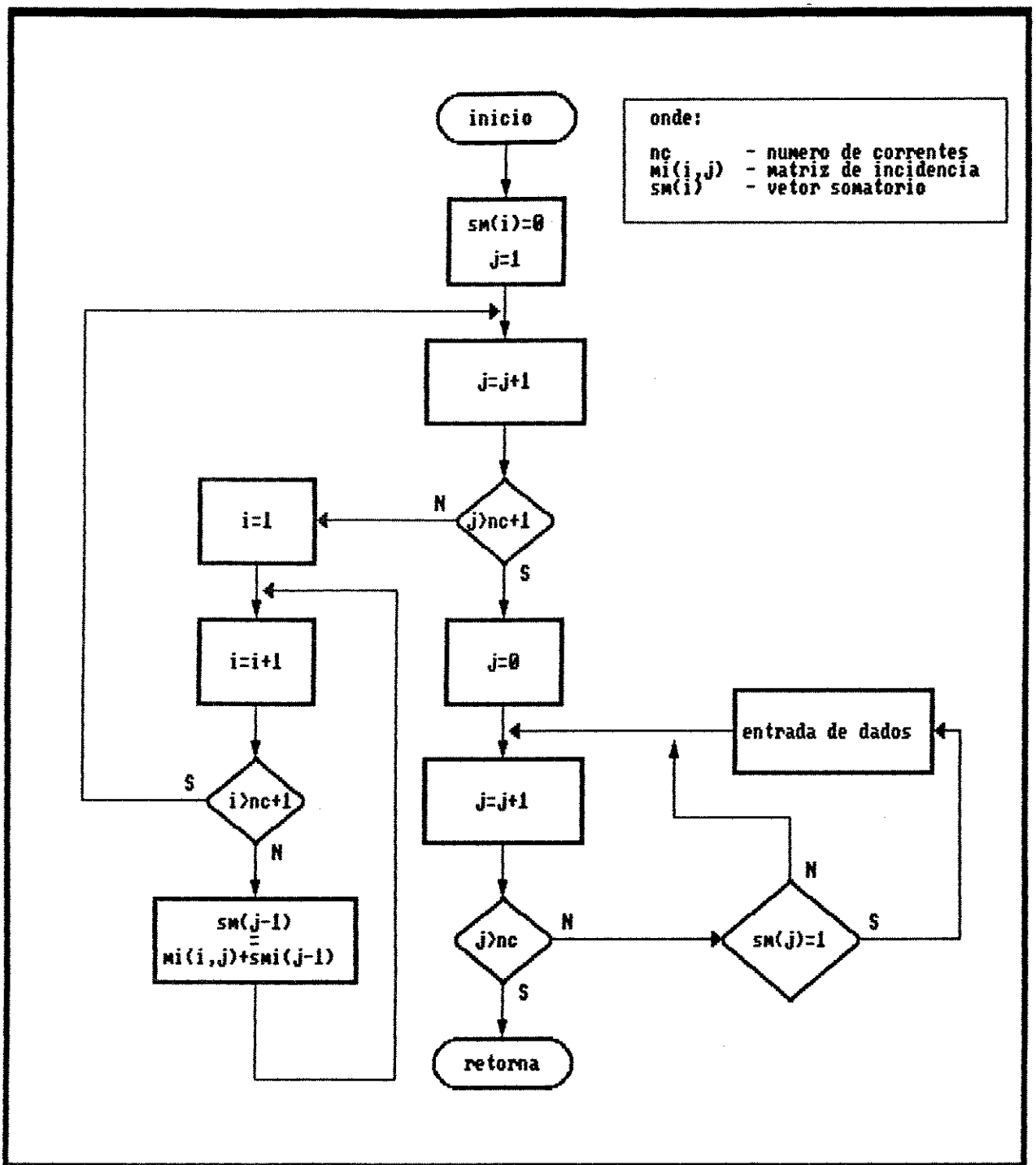


FIG 4 - FLUXOGRAMA PARA A DETERMINACAO DAS CORRENTES DE ENTRADA

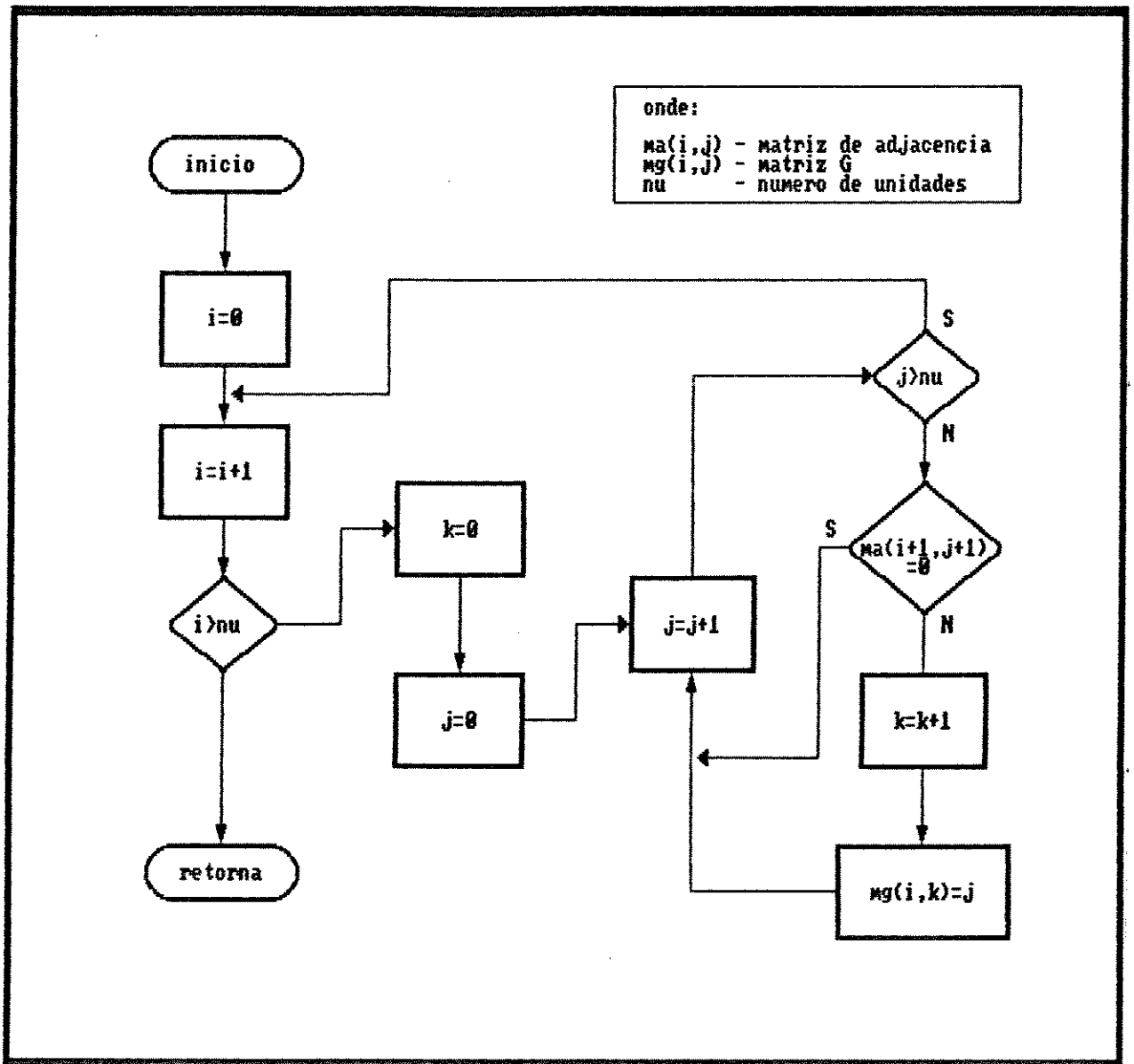


FIG 5 - FLUXOGRAMA PARA O CALCULO DA MATRIZ G

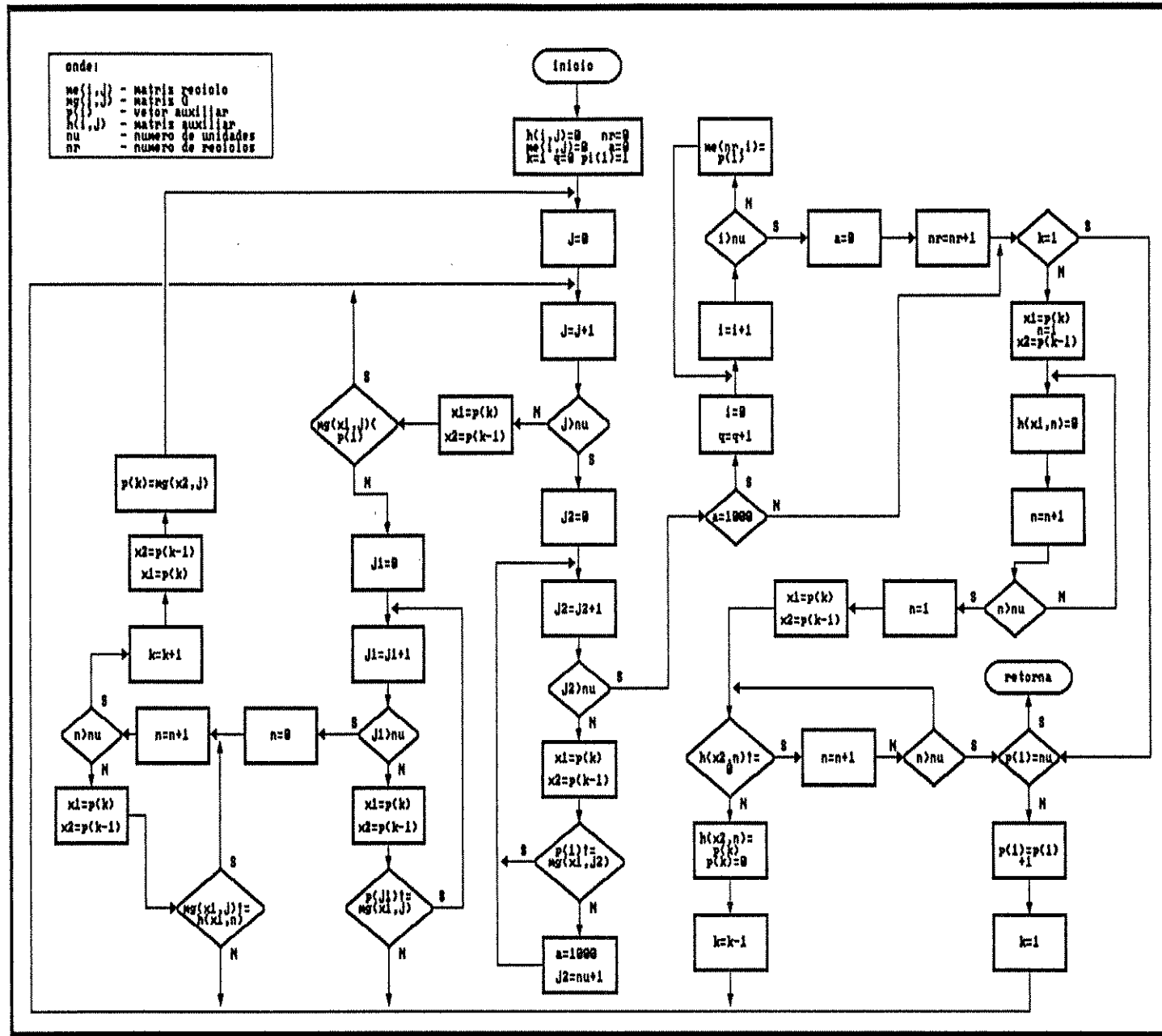


FIG 6 - FLUXOGRAMA DE TIERNAN PARA IDENTIFICACAO DOS RECICLOS

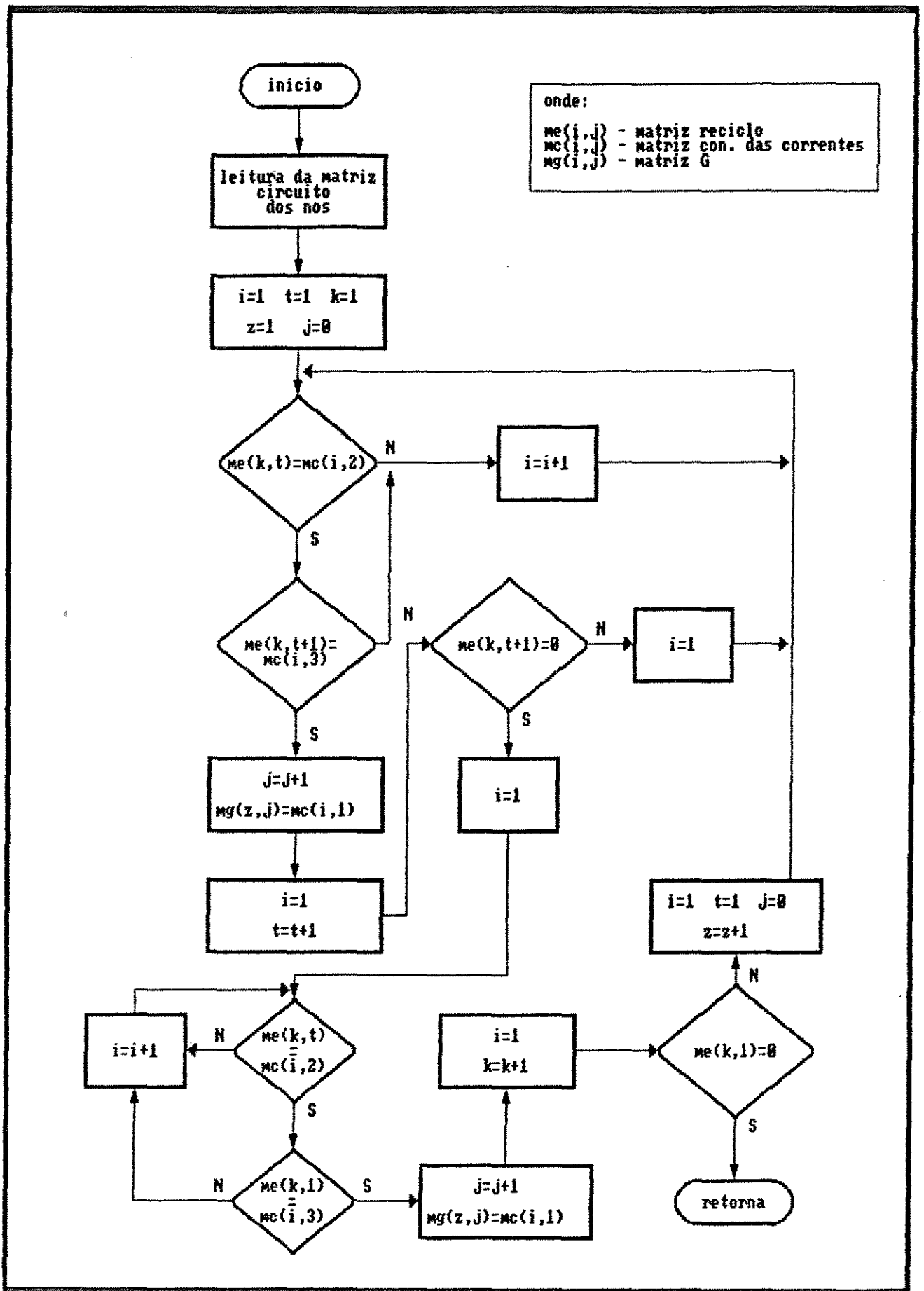


FIG 7 - FLUXOGRAMA PARA OBTENCAO DA MATRIZ RECICLOS (CORRENTES)

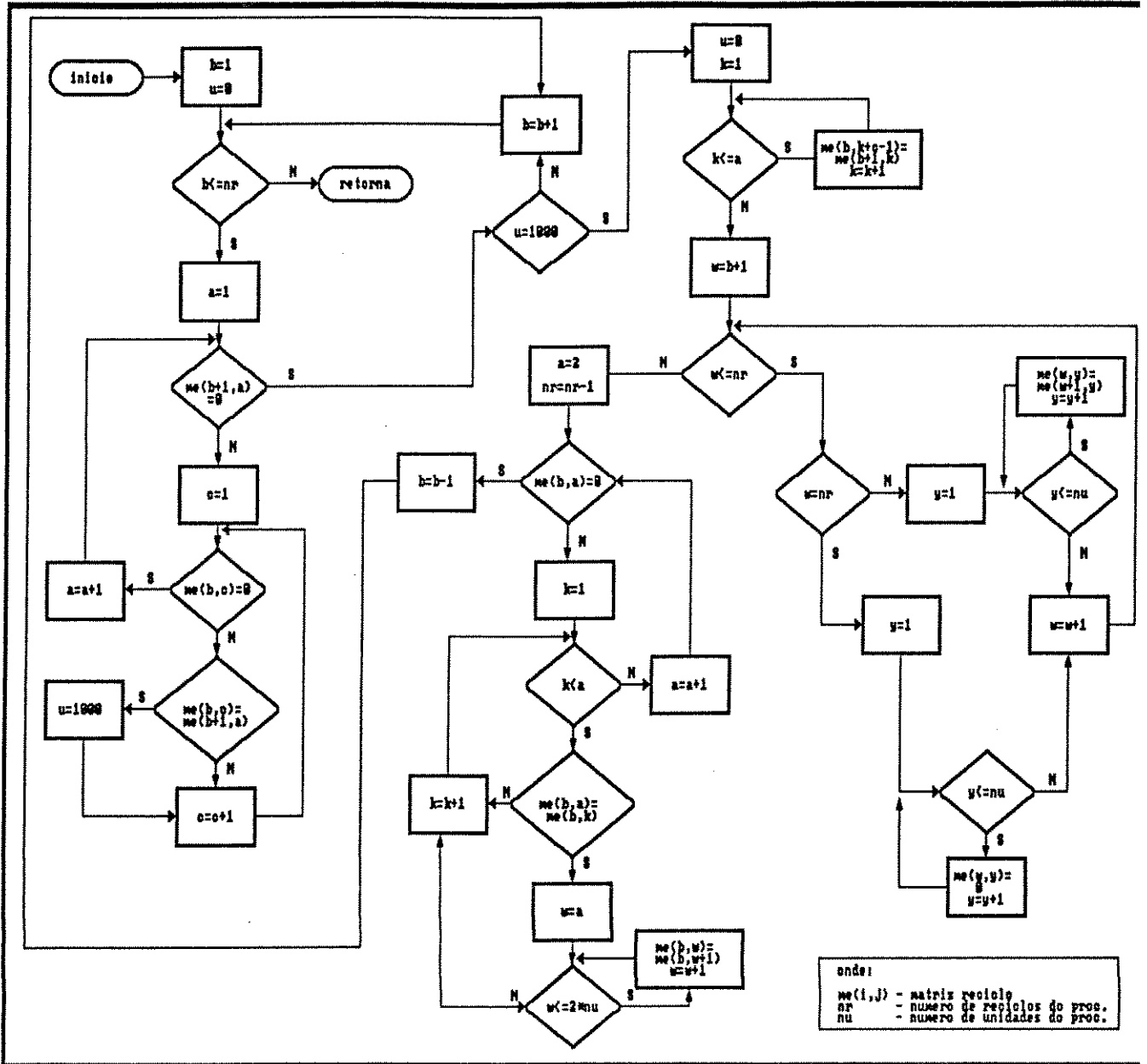


FIG 8 - IDENTIFICACAO DAS UNIDADES DEPENDENTES

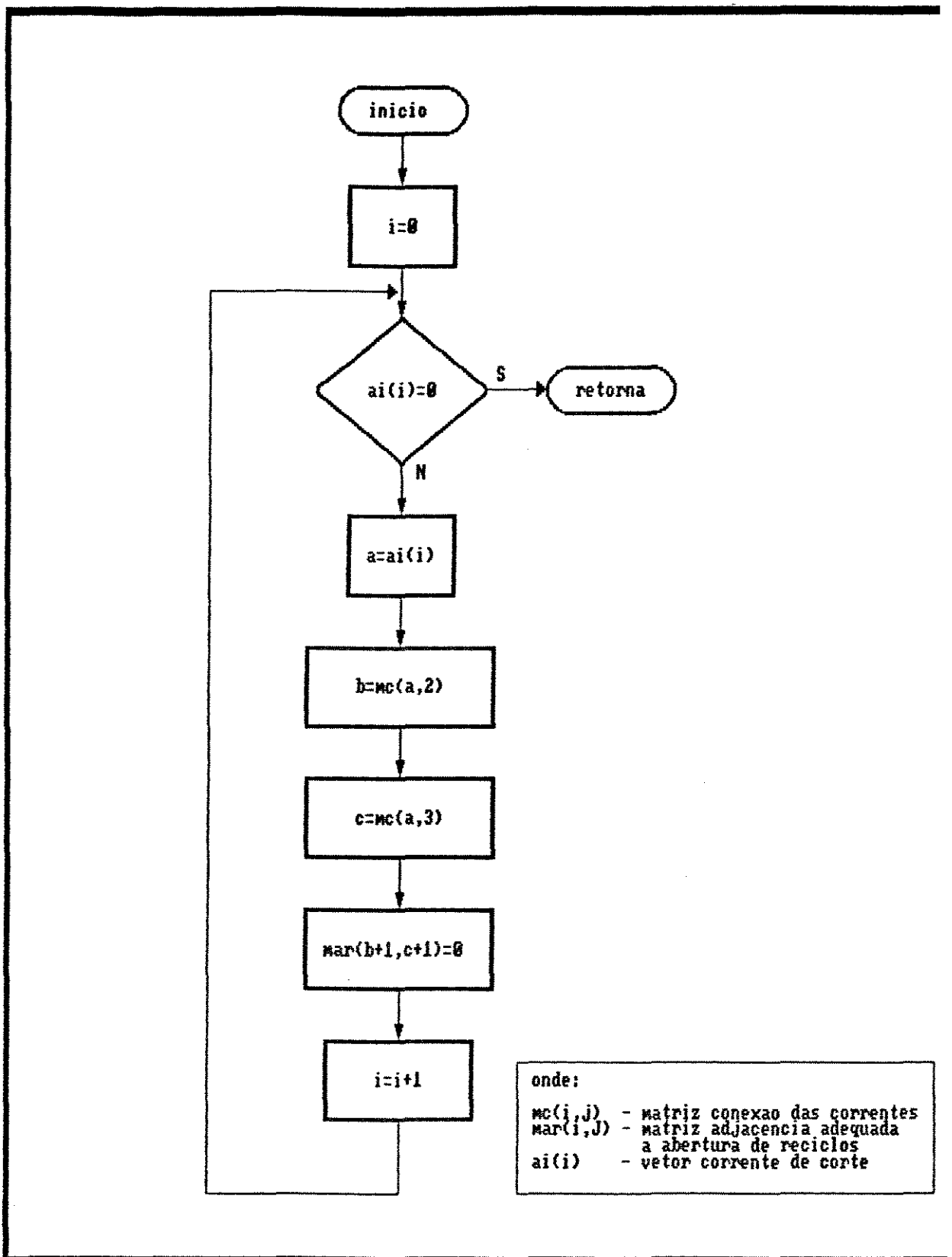
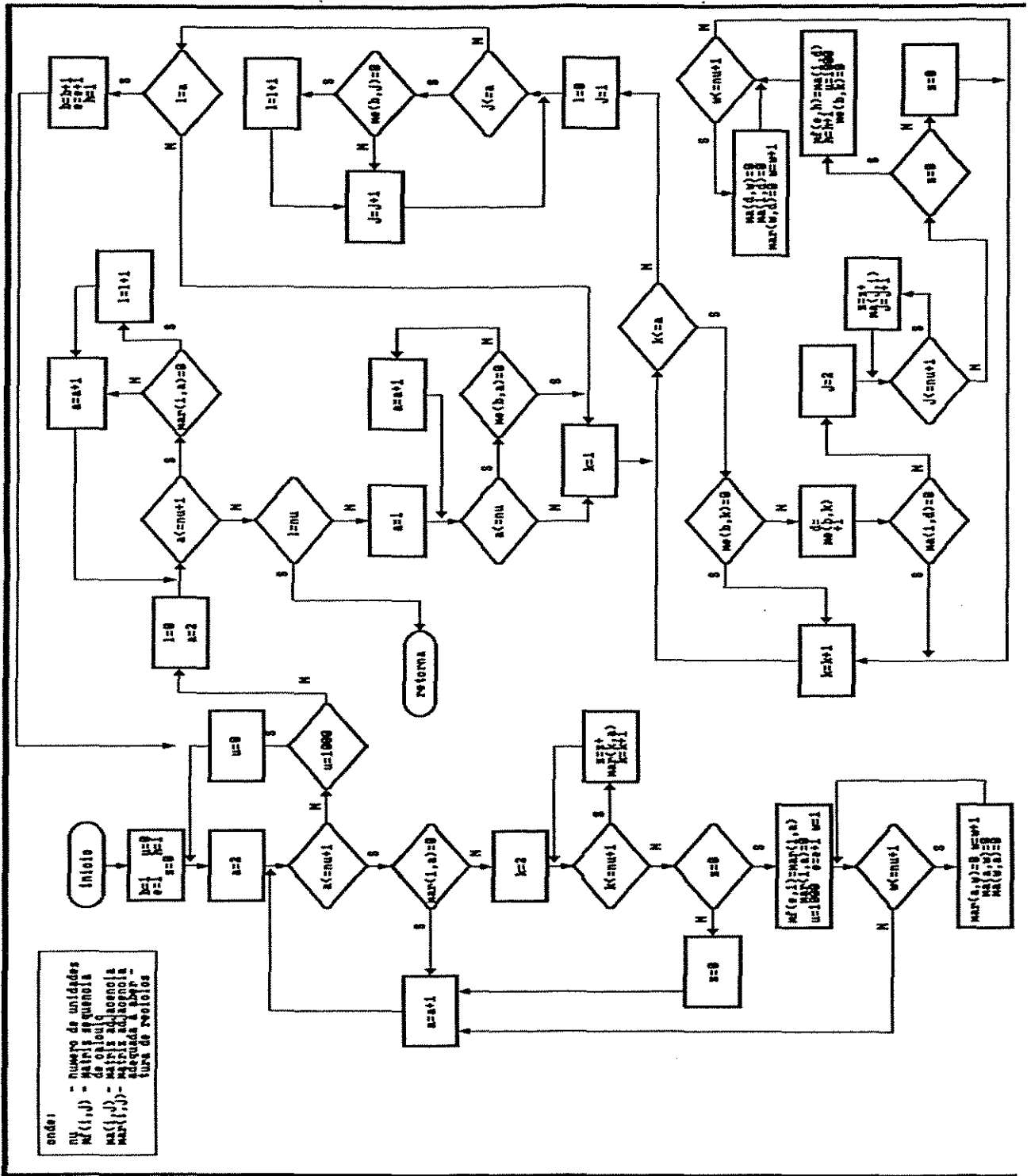


FIG 10 - FLUXOGRAMA PARA A ADEQUACAO DA MATRIZ DE ADJACENCIA A ABERTURA RECICLOS



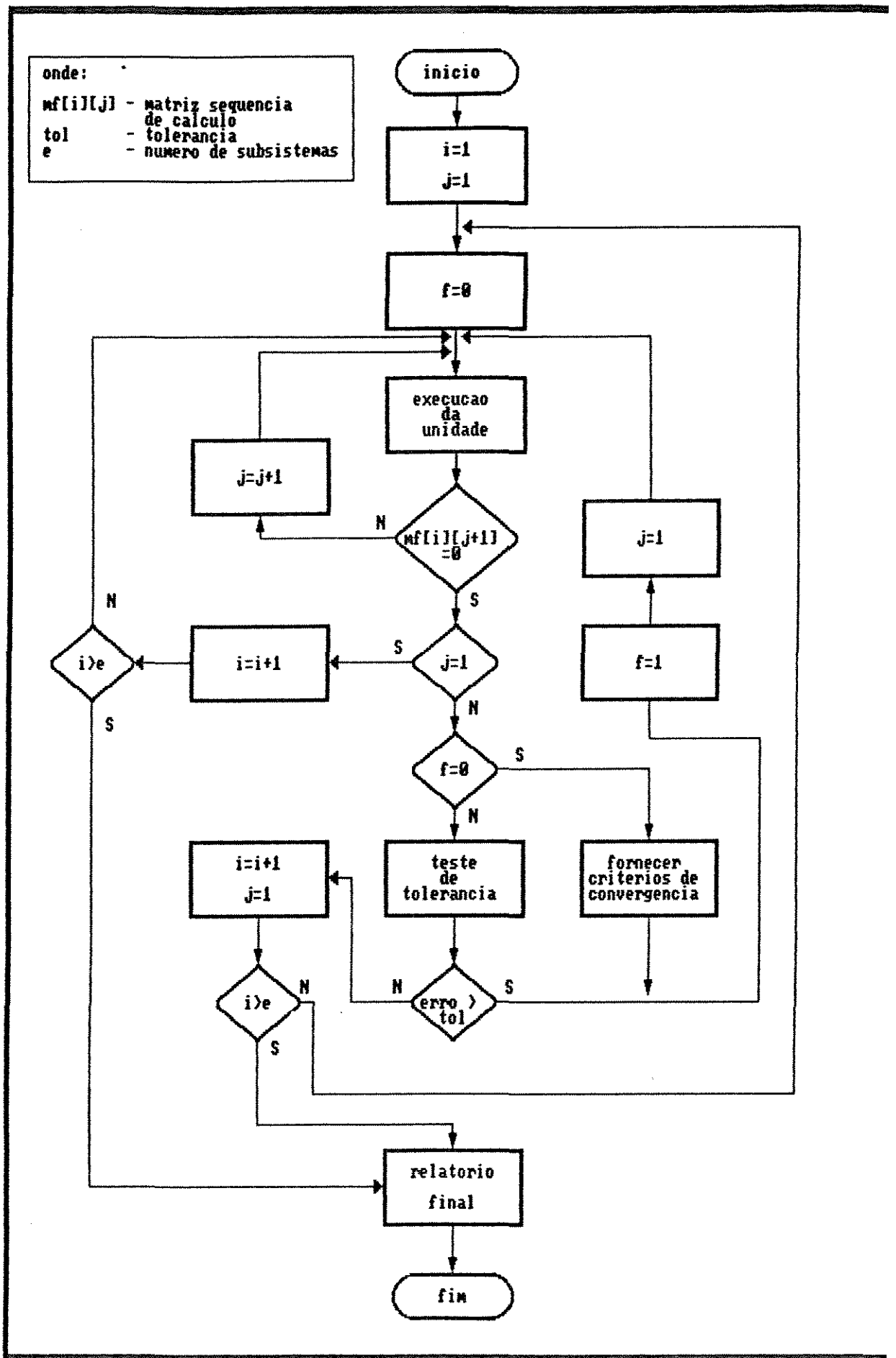


FIG 12 - GERENCIADOR DE UNIDADES.

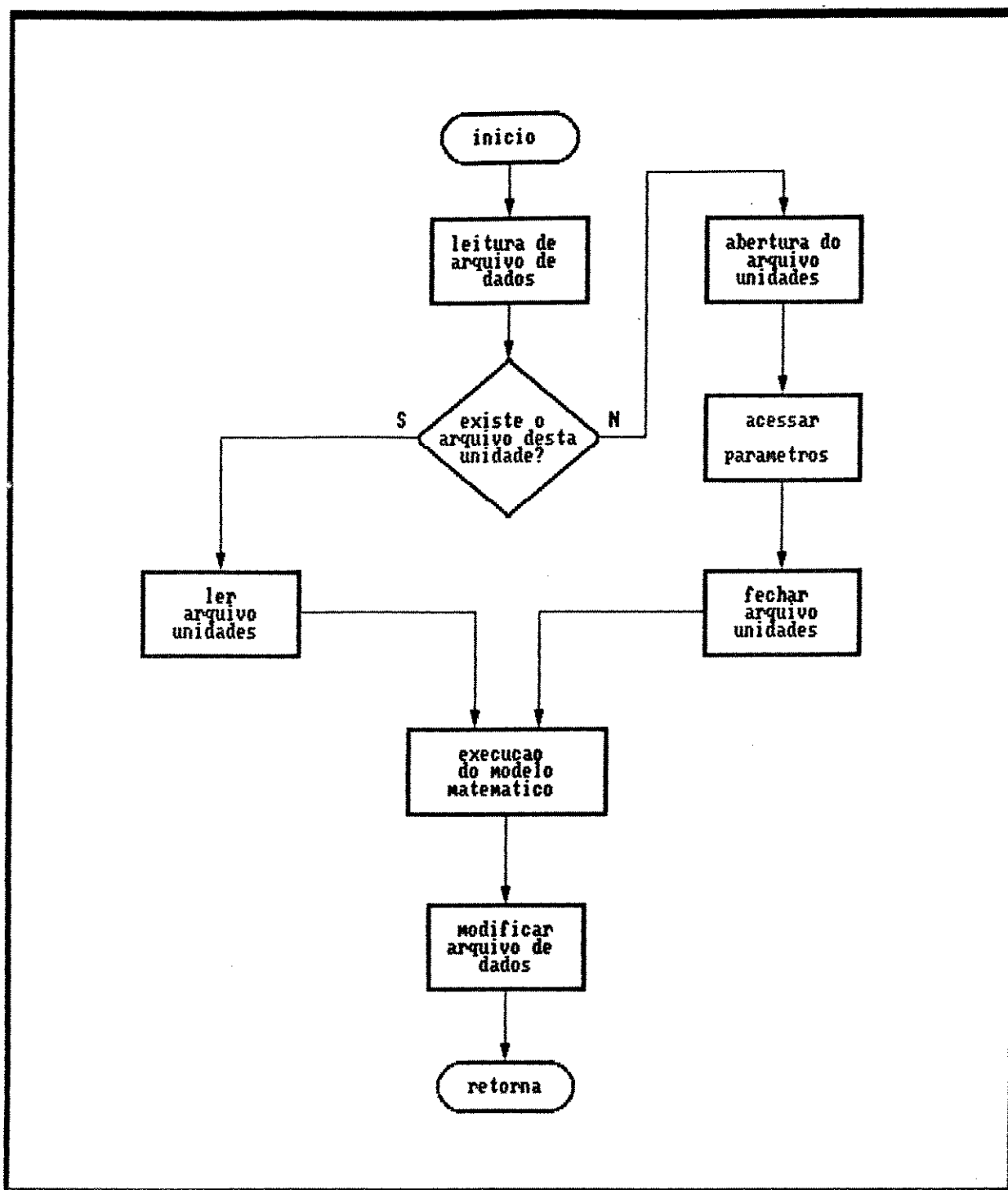


FIG 13 - FLUXOGRAMA PARA A EXECUCAO DA UNIDADE MODULAR

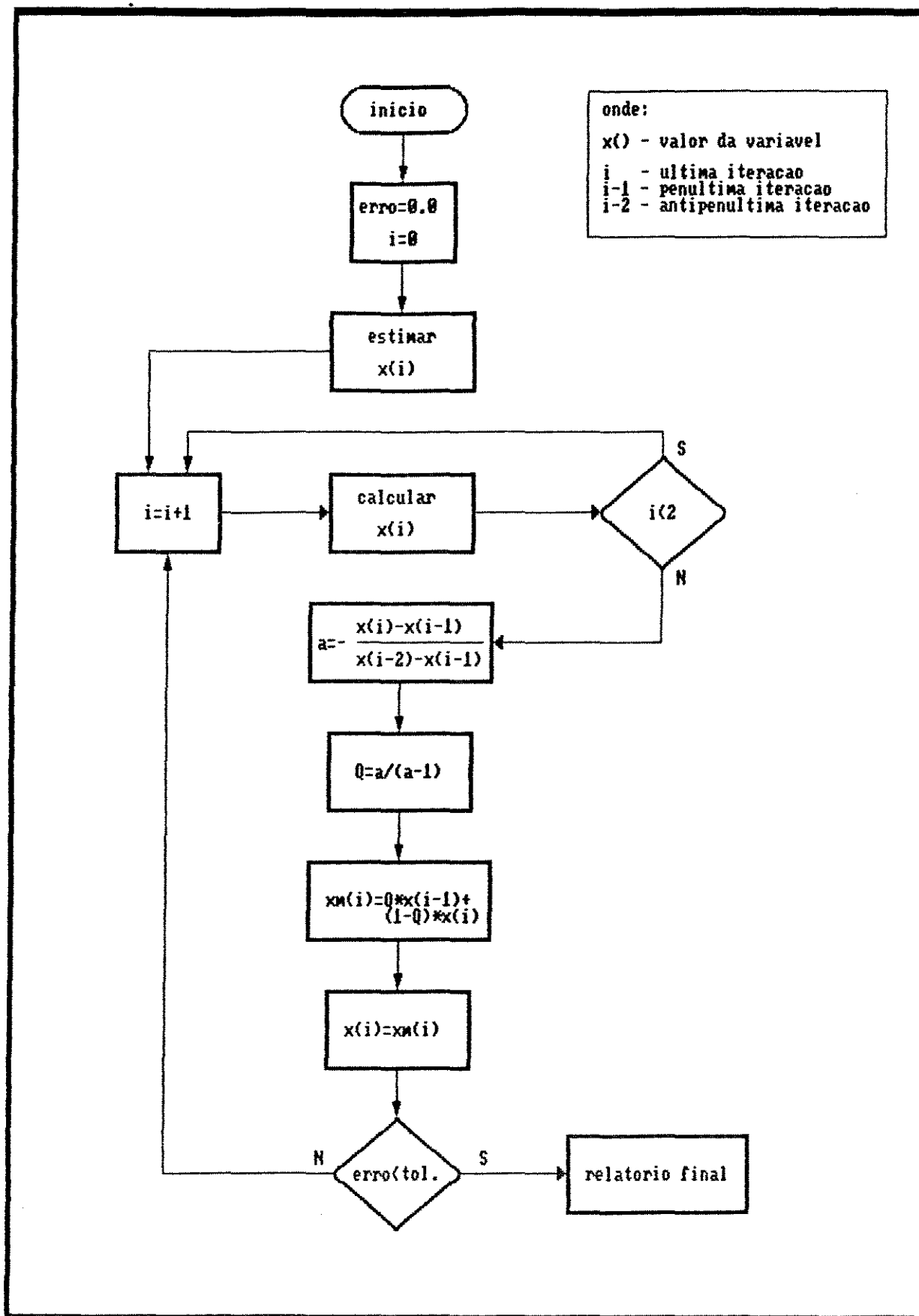


FIG 14 - FLUXOGRAMA DO METODO DE WEGSTEIN.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1 - All Stevens, Dr. Dobb's Journal, vol. 15, 9 , 116,
1988.

2 - Biegler Lorentz T., Chemical Engineering Progress,
vol , 10, 50, 1989.

3 - Carvalho, F.R., Desenvolvimento de um Programa para
Simulação Macroscópica de Processos Químicos Complexos, Tese de
Mestrado, UNICAMP, 1989.

4 - Crowe, C.M. , Hamielec, A.E. , Hoffman, T.W. , Jonhson,
A.I. , Shannon, P.T. e Woods, D.R. , Chemical Plant Simulation, New
Jersey, Prentice Hall, 1971.

5 - Feintuch, H.M., Treybal, R.E. , Ind. Eng. Chem.
Process Des. Dev., vol 17, 4, 1978.

6 - Himmelblau, D.M. e Bischoff, K.B, Process Analysis and
Simulation, New York, Jonh Wiley, 1968.

7 - Husain, Asghar, Chemical Process Simulation, New
Delhi, Wiley Eastern, 1986.

8 - Lapidus, L, Digital Computation for Chemical
Engineers, New York, Mc Graw Hill, 1962.

9 - Leesley, Michael E., Computer-Aided Process Plant Design, Houston, Gulf Plub. co, 1982.

10 - Mah, R.S.H. e Seider, W.D., Foundations of Computers-Aided Chemical Process Design, vol 2, New York, Engineering Foundation, 1981.

11 - Motard, R.L., Shacham, M e Rosen, E.M., AICHE J., vol. 2, 1, 417, 1975.

12 - Raman, Raghu, Chemical Process Computations, Londres, Elsevier Applied Science, 1985.

13 - Tiernan, James C., Communications of the ACM, California, vol 13, 12, 722, 1970.

14 - Tomich, J.F., Aiche Journal, vol. 16, 2, 229, 1970.

15 - Treybal, R.E., Mass-Transfer Operations, New York, Mc Graw-Hill, 1980.

16 - Westeberg, A.W, Hutchison, H.P. Motard, R.L. e Winter, P. Process Flowsheeting, Cambridge, Cambridge University Press, 1979.

NOMENCLATURA

Variáveis:

- C_{pi} - Calor específico de cada componente
- e - Número de subsistemas
- F_{mas} - Fração mássica de cada componente do processo
- G - Vazão mássica (Kg/unidade de tempo)
- n_c - Número de correntes do processo
- n_{com} - Número de componentes envolvidos em todo o processo
- n_m - Número máximo de correntes associadas a uma unidade
- n_r - Número de ciclos
- n_u - Número de unidades do processo
- P - Pressão (atm)
- PM - Peso molecular
- T - Temperatura
- Tol - Tolerância
- i, k, j - Contadores

Matrizes:

- $ai[i]$ - Matriz unidimensional corrente de corte
- $ma[i][j]$ - Matriz de adjacência
- $mar[i][j]$ - Matriz de adjacência adequada à abertura de ciclos
- $mc[i][j]$ - Matriz conexão das correntes

md[i][j] - Matriz correntes
me[i][j] - Matriz reciclós
mf[i][j] - Matriz sequêncía de cálculo
mg[i][j] ou matriz G, P[i] e h[i][j] ou matriz H
- matrizes auxiliares
mi[i][j] - Matriz de incidêncía
num[i][j]- matriz do processo