

## **Integração auto-emso: construindo uma interface gráfica**

*Carlos Magno Molinaro Fonseca<sup>1</sup>*

*SECCHI<sup>2</sup>, A. R.<sup>2</sup>*

*BISCALA JR.<sup>3</sup>, E.C.<sup>3</sup>*

### **RESUMO**

#### **INTEGRAÇÃO AUTO-EMSO: CONSTRUINDO UMA INTERFACE GRÁFICA**

A modelagem dos diversos processos da indústria química mostra a existência de diversos comportamentos não-lineares. O estudo destas situações é extremamente importante, visando à minimização de acidentes e à otimização dos processos. Grande parte das modelagens aplicadas à Engenharia Química são descritas por EAD's (equações algébrico-diferenciais – no inglês “DAE's”). O objetivo deste trabalho é dar prosseguimento à integração entre o simulador de processos EMSO (*Environment for Modeling Simulation Optimization*), desenvolvido pelo grupo de pesquisa, que é capaz de resolver EAD's de índice elevado, e o software AUTO, que permite identificar as particularidades dos sistemas não-lineares através da geração de diagramas de bifurcação. Na integração, o EMSO fornece, como dados de entrada para o AUTO, o sistema de EAD's, a matriz jacobiana, uma primeira solução estacionária e um arquivo de constantes. Para que o AUTO consiga utilizar esses dados, está em andamento uma adaptação do EMSO para transcrever os modelos escritos em EML (*EMSO Modeling Language*) para arquivos de leitura compatíveis com o AUTO2000\_DAE. A etapa atual do projeto visa à criação de uma interface gráfica no EMSO, escrita em linguagem de computação C++, que contenha comandos para a geração de diagramas de bifurcação no próprio simulador, utilizando as funcionalidades do AUTO2000\_DAE.

**Palavras chave:** bifurcação, não-linear, C++.

---

1Aluno da EQ/UFRJ, bolsista PIBIC/CNPq.

2Docente do PEQ-COPPE/UFRJ

3Docente do PEQ-COPPE/UFRJ - Centro de Tecnologia - Universidade Federal do Rio de Janeiro - *Endereço* – Av Athos da Silveira Ramos, 149 - 21941-598 - Cidade Universitária - Rio de Janeiro, RJ

## ABSTRACT

### AUTO-EMSO INTEGRATION: DEVELOPING A GRAPHIC INTERFACE

The modeling of the various processes of the chemical industry shows the existence of several non-linear behaviours. The study of these situations is extremely important in the search for optimization and to minimize accidents in processes. Much of the modelling applied to chemical engineering is described by DAE's (differential-algebraic equations). The objective of this work is to continue the integration between the process simulator EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization), developed by the research group, which is able to solve high index DAE's, and the AUTO software, which allows to identify the particularities of non-linear systems by generating bifurcation diagrams. As part of the integration EMSO provides, as input to AUTO, the system's DAE's, the Jacobian matrix, a first stationary solution and a constants file. So that AUTO is able to use these data is in progress and adaptation of EMSO to transcribe the models written in EML (EMSO Modeling Language) to reading files compatible with AUTO2000\_DAE. The current stage of the project aims to create a GUI in EMSO, written in C++ computer language, which contains commands to generate bifurcation diagrams in the simulator using the features from AUTO2000\_DAE.

**Key-Words:** bifurcation; non-linear; C++.

## INTRODUÇÃO

A modelagem e simulação de processos são, nos dias de hoje, importantes aliadas na área das engenharias em geral, especialmente na Engenharia Química. A previsão do comportamento de uma reação pode, por exemplo, evitar acidentes, otimizar a produção e reduzir custos. No entanto, existem obstáculos de vários tipos que inviabilizam a adequação dos modelos computacionais já existentes a certos processos. A análise de regimes permanentes, por exemplo, nos mostra a existência de múltiplos estados estacionários (ou seja, para um mesmo valor de entrada de determinado parâmetro obtém-se mais de um valor possível para a variável de saída) e a presença de órbitas periódicas (situação na qual a variável analisada nunca se mantém constante no tempo, mas varia segundo um período fixo).

Existem dois softwares atualmente, dentre tantos outros, que realizam importantes simulações. Um deles é o EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*), um simulador dinâmico de processos orientado por equações, voltado para problemas da Engenharia Química, que pode ser utilizado para simulações estacionárias e dinâmicas, otimizações estacionárias e

estimação de parâmetros de modelos estacionários e dinâmicos (Soares e Secchi, 2003). O outro chama-se AUTO e trata-se de um software de continuação paramétrica e bifurcação para equações diferenciais ordinárias (Doedel et al., 1994).

A funcionalidade do AUTO consiste em calcular estados estacionários de processos a partir de uma série de parâmetros, definidos pelo usuário, apresentando inclusive gráficos de fácil visualização para, por exemplo, identificação da existência de múltiplos estados estacionários. No entanto, este software é pouco acessível, devido à falta de interface gráfica (sua execução dá-se através de linhas de comando) e ao fato de ser compatível somente com Linux, sistema operacional pouco difundido frente ao Windows. Outro problema do AUTO é a necessidade da entrada de certos parâmetros para funcionamento do programa, que devem ser primeiramente calculados com algum simulador, como o EMSO.

Com a criação de uma interface de comunicação entre os dois programas previamente citados, visa-se facilitar e acelerar o acesso às funcionalidades do AUTO, contornando os problemas descritos. Portanto, o objetivo do projeto consiste em dar prosseguimento à criação de uma interface gráfica para concluir a integração entre os programas, já iniciada. Para construção desta interface, é utilizado o programa Fox Toolkit (Fox-Toolkit, 2011; Arantes, 2008), que contém uma biblioteca de elementos básicos para a construção de uma GUI (*Graphical User Interface*), totalmente escrita em linguagem de programação C++.

## OBJETIVOS

Promover a integração entre os dois programas, de modo a unir os recursos presentes no AUTO a um *software* de aparência mais amigável, aprendizado mais rápido e presente fora do Linux, além de possibilitar o uso de unicamente um programa para geração de diagramas de bifurcação.



Figura 1 – Modelo da Interface

## RESULTADOS

A seguir, apresenta-se a comparação entre diagramas gerados pelo AUTO e os gerados pela versão atual da interface.

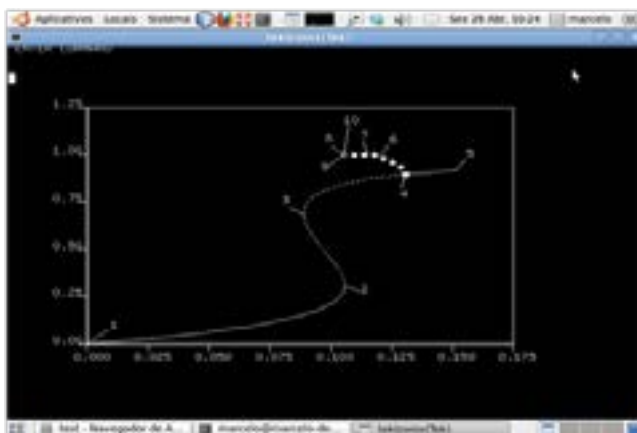


Figura 2 – AUTO: Reação A->B em reator CSTR (Uppal, Ray & Poore - 1974)

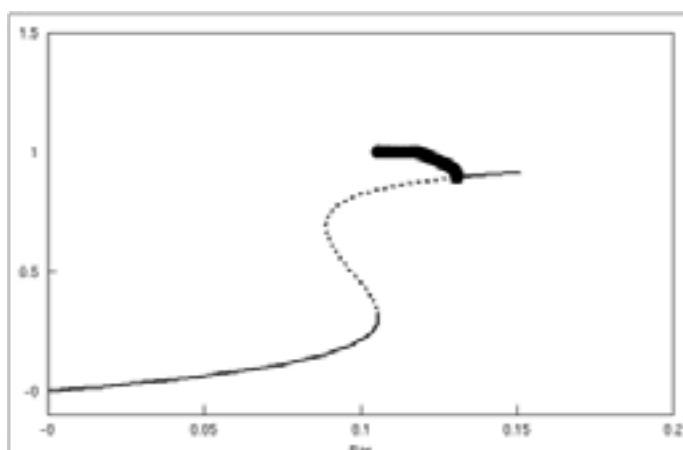


Figura 3 – Reação A->B em reator CSTR (obtido pelo projeto)

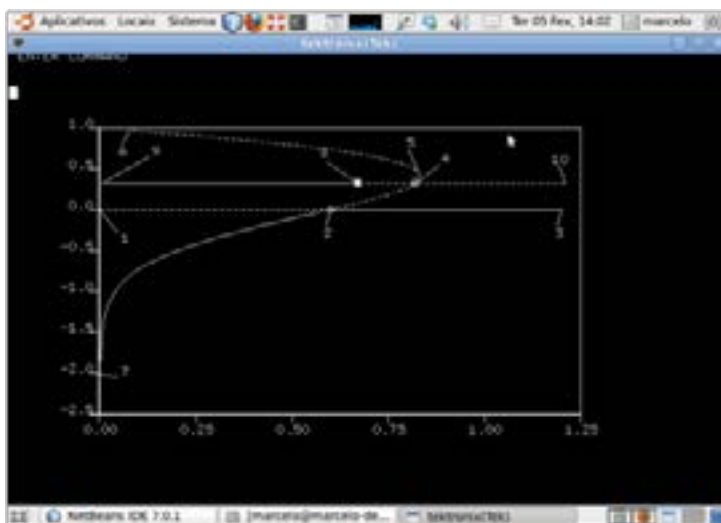


Figura 4 – AUTO: Sistema predador-presa com colheita

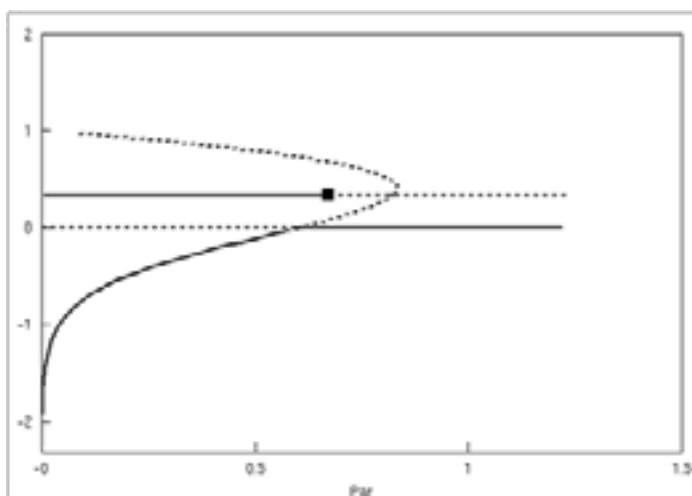


Figura 5 – Sistema predador-presa com colheita (obtido pelo projeto)

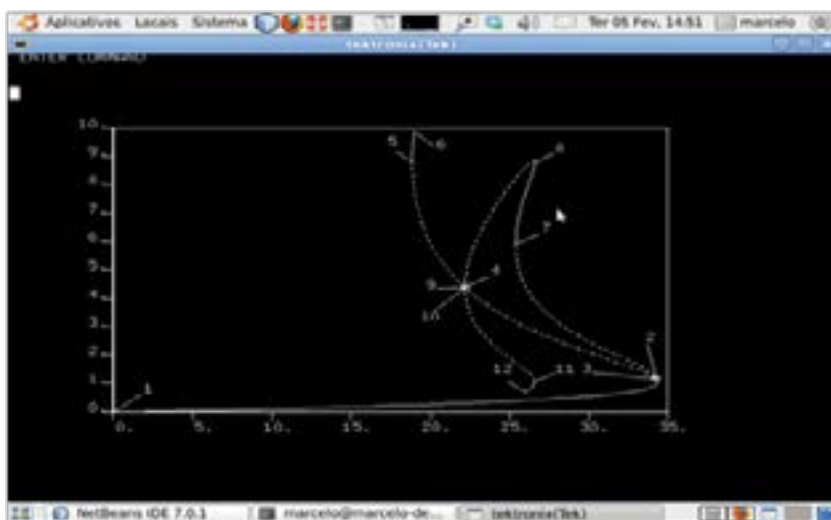


Figura 6 – AUTO: Modelo enzimático com dois compartimentos (Kernévez – 1980)

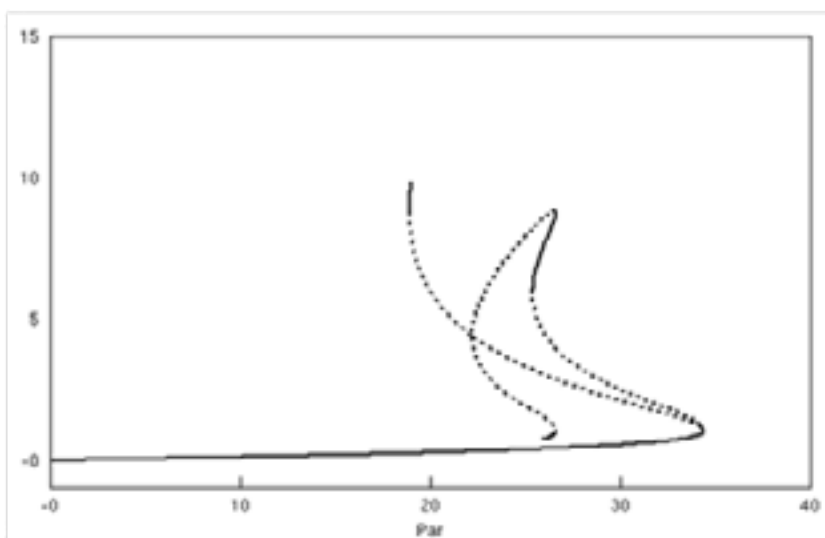


Figura 7 – Sistema enzimático com dois compartimentos (obtido pelo projeto)

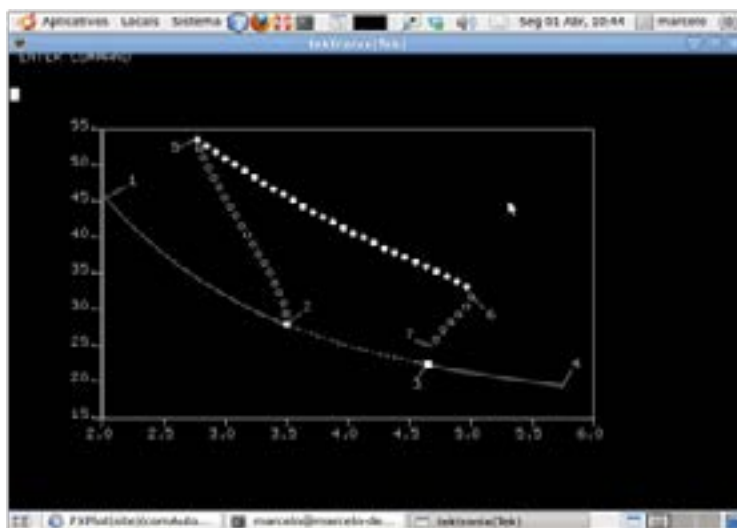


Figura 8 – Auto: Sistema ativador-inibidor com um compartimento (Kernévez – 1980)

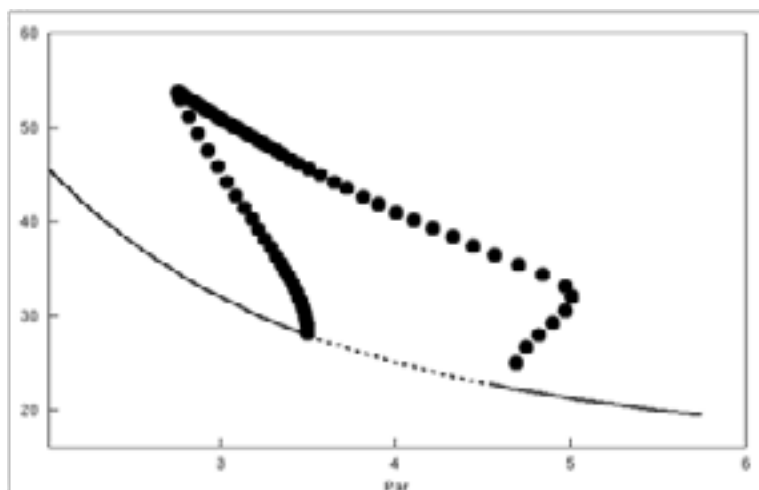


Figura 9 – Sistema ativador-inibidor com um compartimento (obtido pelo projeto)

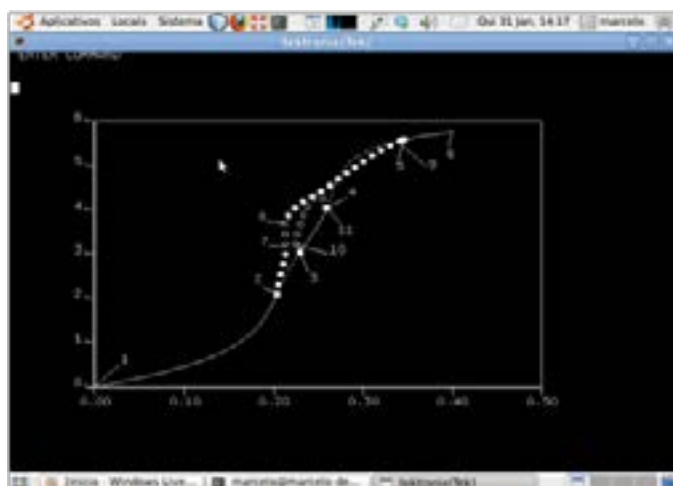


Figura 10 – AUTO: Reação A->B->C (Doedel & Heinemann – 1983)

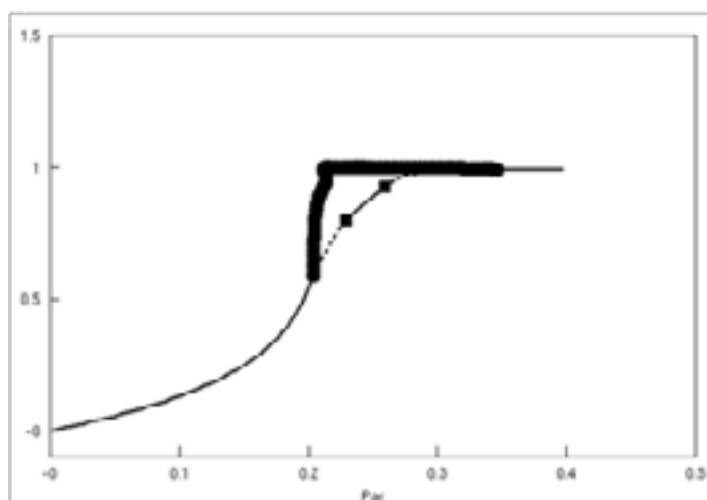


Figura 11 – Reação A->B->C (obtido pelo projeto)

Todos os modelos utilizados para a construção dos diagramas foram retirados do manual presente no AUTO (Doedel et al., 2001). Quando disponível, foi referenciado a origem de cada modelo.

Estes casos são de quase total sucesso. No entanto, alguns poucos problemas persistem: as esferas das órbitas periódicas estão muito próximas e ainda não foi possível implementar uma legenda eficiente. Além disso, como é possível ver na figura 11, existem questões sérias a serem solucionadas quando se tratam sistemas com mais de uma bifurcação.



## CONCLUSÃO

É notável a semelhança entre a maioria dos diagramas, mostrando o enorme progresso que já foi realizado, e indicando que a integração total não está distante de ser completa. Em breve, deve estar disponível esta melhora do EMSO, a fim de facilitar a análise de sistemas não lineares.

## REFERÊNCIAS

ARANTES, I.B. (2008), **Desenvolvimento de uma interface gráfica para geração de mapas de ambientes navegáveis por uma cadeira de rodas robóticas**. Projeto final de curso, Departamento de Engenharia Elétrica, UFES, Vitória, Espírito Santo.

DOEDEL, E.J.; WANG, X.; FAIRGRIEVE, T. (1994), Auto 94 software for continuation and bifurcation problems in ordinary differential equations. **In Applied Mathematics Report**. Pasadena, California: California Institute of Technology.

FOX-TOOLKIT (2011), Graphical User Interface toolkit.<http://www.fox-toolkit.org>, acessado em 20/01/2011.

SOARES, R.P.; SECCHI, A.R. (2003), EMSO: A New Environment for Modeling, Simulation and Optimization, **Anais do 13th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE 13)**, Lappeenranta, Finlândia, 947-952.

DOEDEL, E.J.; PAFFENROTH, R.C.; CHAMPNEYS, A.R.; FAIRGRIEVE, T.F.; KUZNETSOV, Y.A.; SANDSTEDE, B.; WANG, X. (2001), "AUTO 2000: Continuation and Bifurcation Software for Ordinary Differential Equations"

## AGRADECIMENTOS

PIBIC/UFRJ - CNPq