



## INTEGRAÇÃO DO SOFTWARE AUTO COM O SIMULADOR DE PROCESSOS EMSO

\*RAMMINGER<sup>1</sup>, G. O.; SECCHI<sup>2</sup>, A. R.

<sup>1</sup>Alunos do DEQUI/UFRGS    <sup>2</sup>Professor do DEQUI/UFRGS  
Departamento de Engenharia Química - Universidade Federal Do Rio Grande do Sul  
Rua Engenheiro Luiz Englert, s/nº - Campus Central  
90040-040 – Porto Alegre – RS  
e-mail: [arge@enq.ufrgs.br](mailto:arge@enq.ufrgs.br)

**RESUMO** – Neste trabalho foram feitas modificações no código fonte do AUTO 2000, escrito em linguagem C, baseado nas modificações feitas por von Clausbruch *et al.* (2006)<sup>(1)</sup> no AUTO 97, escrito em FORTRAN para que o AUTO 2000 pudesse trabalhar com sistemas de equações algébrico-diferenciais e então foi feita a integração desse programa modificado, o AUTO DAE 2000 com o simulador de processos EMSO (*Environment for Modeling Simulation Optimization*), programado em C++.

**Palavras Chaves:** bifurcação, estabilidade, continuação.

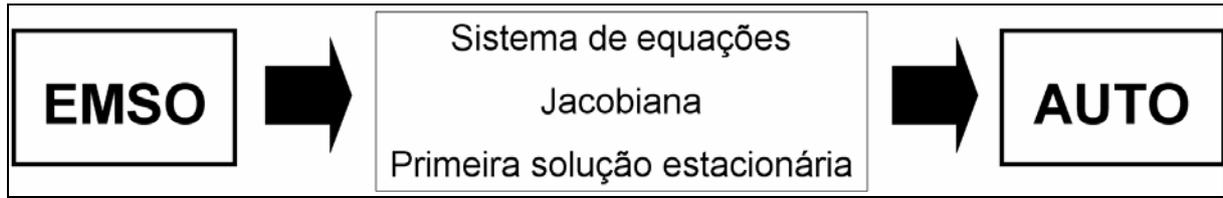
### INTRODUÇÃO

A modelagem dos diversos processos da indústria química mostra a existência de multiplicidade de estados estacionários, presença de ciclos limites e outros comportamentos não-lineares. Além disso, grande parte dos modelos dos processos é descrito por sistemas de equações algébrico-diferenciais (EAD's) muitos deles com índice superior a um. Esses dois aspectos são problemas para os simuladores de processos comerciais conhecidos, o primeiro porque os simuladores não são capazes de detectar aquelas particularidades. Quanto ao segundo aspecto, o problema existe quando o índice do sistema é superior a um. Dessa forma, o objetivo deste trabalho é adaptar e integrar o *software* AUTO, que é capaz de obter os múltiplos estados estacionários e construir diagramas de bifurcação, com o simulador de processos

EMSO (*Environment for Modeling Simulation Optimization*), que é capaz de resolver EAD's de índice elevado.

### METODOLOGIA

O primeiro passo para a obtenção do *software* integrado foi a adaptação do código do AUTO 2000, escrito em linguagem C, para que este pudesse tratar de EAD's. Essa adaptação foi feita baseada no trabalho de von Clausbruch *et al.* (2006)<sup>(1)</sup> realizado no AUTO 97 (em FORTRAN). Posteriormente, o AUTO 2000 modificado foi integrado ao simulador de processos EMSO, programado em C++ e que tem a função de prover os modelos de processos na forma de EAD's, conforme esquema da Figura 1. Com isso obteve-se o AUTO DAE 2000, que tem a possibilidade de realizar análises de estabilidade de EAD's de índice um.



**Figura 1: Fluxo de informações para a solução problema após as modificações.**

A etapa de validação do programa foi feita baseada em dois sistemas de equações. O primeiro se baseia em um sistema reacional do tipo  $A \rightarrow B$ , cujas equações em variáveis adimensionalizadas estão enumeradas de 1 a 3.

$$\frac{du_1}{d\tau} = -u_1 + p_1(1-u_1)u_3 \quad (1)$$

$$\frac{du_2}{d\tau} = -u_2 + p_1p_2(1-u_1)u_3 - p_3u_2 \quad (2)$$

$$u_3 = \exp(u_2) \quad (3)$$

O diagrama de estados estacionários desse sistema foi feito variando o parâmetro  $p_1$  de 0 a 0,15. Os valores dos parâmetros  $p_2$  e  $p_3$  estão na Tabela 1.

**Tabela 1: Parâmetros do primeiro sistema de equações.**

$p_2$	14
$p_3$	2

O segundo sistema de equações utilizado para a validação do novo *software* se baseia no trabalho de Gamboa-Torres e Flores-Tlacuahuac (2000)<sup>(2)</sup>. Este trabalho traz apresenta a modelagem de um reator CSTR onde acontece a reação em série  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . As equações 4 a 9 mostram a modelagem desse sistema nas variáveis adimensionalizadas.

$$\frac{dx_1}{d\tau} = q(x_{1f} - x_1) - x_1\eta(x_3)\phi \quad (4)$$

$$\frac{dx_2}{d\tau} = q(x_{2f} - x_2) - x_2\phi S\eta_2(x_3) + x_1\phi\eta(x_3) \quad (5)$$

$$\frac{dx_3}{d\tau} = q(x_{3f} - x_3) + \delta(x_4 - x_3) + \beta\phi[x_1\eta(x_3) + \alpha x_2\eta_2(x_3)S] \quad (6)$$

$$\frac{dx_4}{d\tau} = \delta_1(q_c(x_{4f} - x_4) + \delta\delta_2(x_3 - x_4)) \quad (7)$$

$$\eta(x_3) = e^{\left[\frac{x_3}{1+x_3/\gamma}\right]} \quad (8)$$

$$\eta_2(x_3) = e^{\left[\frac{x_3^\psi}{1+x_3/\gamma}\right]} \quad (9)$$

O diagrama de estados estacionários foi obtido variando o parâmetro  $q_c$  de 0 a 5. Os parâmetros utilizados para a resolução das equações podem ser visualizados na Tabela 2.

**Tabela 2: Parâmetros do segundo sistema de equações.**

$\phi$	0,133	$\delta_1$	10
$\beta$	8	$\delta_2$	1
$\delta$	1	$\gamma$	1000
$q$	1	$x_{1f}$	1
$\alpha$	1	$x_{2f}$	0
$S$	0,01	$x_{3f}$	0
$\psi$	1	$x_{4f}$	-1

Esses sistemas de equações foram resolvidos no AUTO antes das modificações serem implementadas e também resolvidas como EAD's e EDO's

tanto no AUTO 2000 modificado como no AUTO DAE 2000 integrado com o EMSO.

A forma como deve ser estruturado o sistema de equações no AUTO antes e após as modificações (em linguagem C) e a estrutura no EMSO, exemplificadas para

o primeiro sistema de equações, podem ser visualizadas nas Figuras 2 a 5. onde *uprime* é o vetor das derivadas de *u* em relação ao tempo.

```

u1 = u[0];
u2 = u[1];
e = exp(u2);

f[0] = -u1 + par[0] * (1 - u1) * e;
f[1] = -u2 + par[0] * par[1] * (1 - u1) * e - par[2] * u2;

```

**Figura 2: Estrutura das equações no AUTO antes das modificações (em linguagem C).**

```

u1 = u[0];
u2 = u[1];
e = exp(u2);

f[0] = -u1 + par[0] * (1 - u1) * e - uprime[0];
f[1] = -u2 + par[0] * par[1] * (1 - u1) * e - par[2] * u2 - uprime[1];

```

**Figura 3: Estrutura no AUTO para EDO's após as modificações (em linguagem C).**

```

u1 = u[0];
u2 = u[1];
u3 = u[2];

f[0] = -u1 + par[0] * (1 - u1) * u3 - uprime[0];
f[1] = -u2 + par[0] * par[1] * (1 - u1) * u3 - par[2] * u2 - uprime[1];
f[2] = -u3 + exp(u2);

```

**Figura 4: Estrutura no AUTO para EAD's após as modificações (em linguagem C).**

```

using "types";
FlowSheet ab_dae
PARAMETERS
p1 as Real;
p2 as Real;
p3 as Real;

VARIABLES
u1 as Real;
u2 as Real;
u3 as Real;

SET
p1 = 0;
p2 = 14;
p3 = 2;

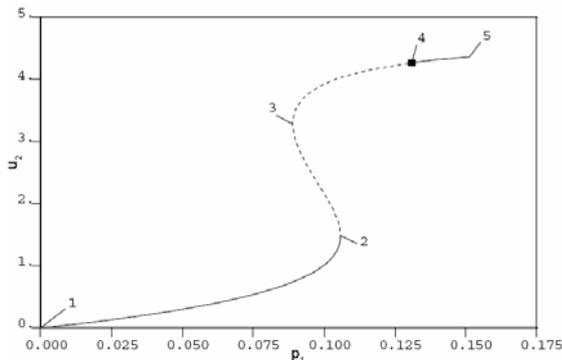
EQUATIONS
diff(u1)*'s' = -u1 + p1 * (1 - u1) * u3;
diff(u2)*'s' = -u2 + p1 * p2 * (1 - u1) * u3 - p3 * u2;
u3 = exp(u2);

```

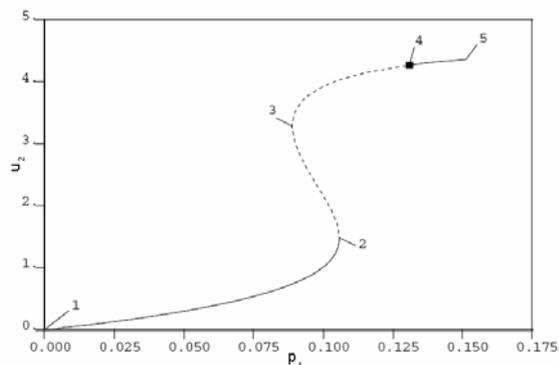
**Figura 5: Estrutura do equacionamento no EMSO.**

## RESULTADOS

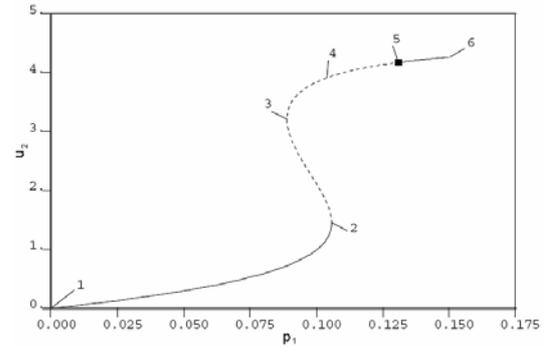
O diagrama de estados estacionários para o primeiro sistema de equações, obtido antes e após as modificações do AUTO pode ser visualizado nas Figuras 6 a 8. O diagrama da Figura 6 foi construído usando o sistema de EDO's da Figura 2 e o diagrama da Figura 7 é resultado do sistema de EDO's da Figura 3. A Figura 8 reproduz os diagramas obtidos pelo AUTO DAE 2000 tanto pelo sistema de EAD's da Figura 4 quanto pelo sistema modelado no EMSO, de acordo com a Figura 5, usando a interface da Figura 1.



**Figura 6: Estados estacionários do primeiro sistema de equações feito no AUTO antes das modificações.**



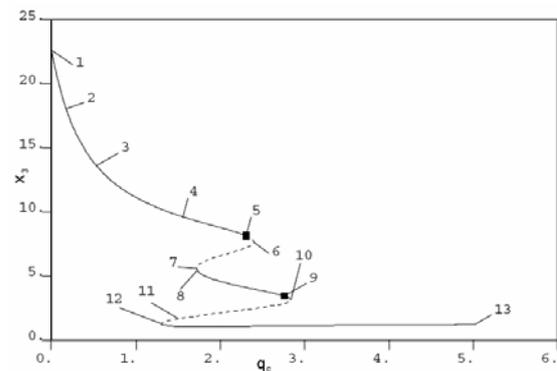
**Figura 7: Estados estacionários do primeiro sistema de equações como EDO's feito no AUTO DAE 2000.**



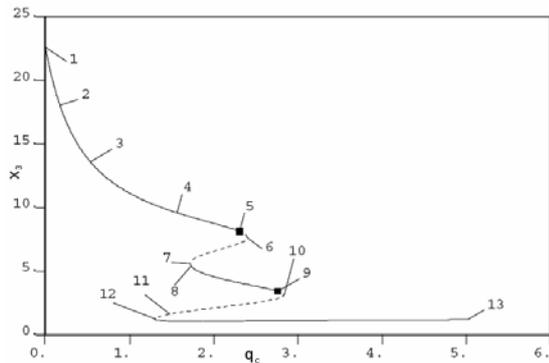
**Figura 8: Estados estacionários do primeiro sistema de equações como EAD's feito no AUTO DAE 2000.**

A análise das figuras mostra que o diagrama de estados estacionários, pontos Hopf e regiões de estabilidade foram os mesmos antes e após a etapa de modificações do AUTO.

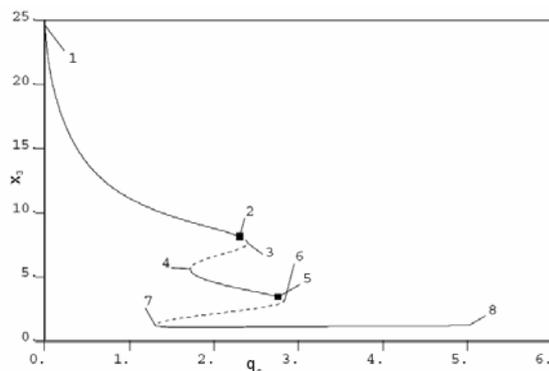
Os diagramas de estados estacionários também foram obtidos para o segundo sistema de equações e podem ser visualizados nas Figuras 9 a 11. A Figura 11 reproduz tanto o resultado para o AUTO DAE 2000 com o modelo na forma de EAD's implementado em linguagem C quanto para o modelo implementado no EMSO.



**Figura 9: Estados estacionários do segundo sistema de equações feito no AUTO antes das modificações.**



**Figura 10: Estados estacionários do segundo sistema de equações como EDO's feito no AUTO DAE 2000.**



**Figura 11: Estados estacionários do segundo sistema de equações como EAD's feito no AUTO DAE 2000.**

Da mesma forma que para o primeiro sistema de equações, os diagramas obtidos para o segundo sistema de equações são iguais antes (Figura 9) e depois das modificações (Figura 10) no AUTO. Os diagramas obtidos também foram os mesmos antes e depois de ser feita a integração com o EMSO.

## CONCLUSÕES

Os resultados apresentados mostram que a adaptação do AUTO 2000 para que ele pudesse trabalhar com sistemas de EAD's e a integração com o EMSO foram feitas com sucesso, haja vista a equivalência dos resultados obtidos em todos os passos da fase de adaptação do *software* com aqueles obtidos com o AUTO antes de iniciarem as alterações no seu código fonte. Os próximos passos desse trabalho é iniciar uma nova etapa de alterações no código fonte do programa para que este possa trabalhar com sistemas de equações com índice superior a um, o que ainda é uma limitação do *software* na fase em que se encontra.

## REFERÊNCIAS

- (1) VON CLAUSBRUCH, B.C., BISCAIA JR., E.C., MELO, P.A. (2006). "Stability Analysis of Differential-Algebraic Equations in AUTO\_DAE", *Computer Aided Chemical Engineering*, 21, 297-302.
- (2) GAMBOA-TORRES, A.E., FLORES-TLACUAHUAC, A. (2000). "Effect of Process Modeling on the Nonlinear Behavior of a CSTR Reactions  $A \rightarrow B \rightarrow C$ ", *Chemical Engineering Journal*, 77, 153-164.

## AGRADECIMENTOS

À FAPERGS pela bolsa concedida.