

## **AVALIAÇÃO DE SIMULADORES DE PROCESSO LIVRES DE LICENÇA PARA A SIMULAÇÃO DE PROCESSOS TÍPICOS DE ENGENHARIA QUÍMICA.**

Ana Flávia Baliski Pereira (PIBIC/CNPq), Caliane Bastos Borba Costa (Orientador), e-mail: anaflaviabalisk@gmail.com.

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Tecnologia /Maringá, PR.

**Área e subárea do conhecimento: Processos Industriais de Engenharia Química.**

**Palavras-chave:** simulação, software, licença gratuita.

### **Resumo:**

Na Engenharia Química, o uso de programas capazes de simular processos é essencial. As simulações vêm desempenhando um papel importante e os avanços nos programas comerciais que realizam tal atividade fizeram com que os mesmos se tornassem cada vez mais caros e de mais difícil acesso quando se tem em mente projetos de pesquisa com orçamentos limitados. Algumas alternativas gratuitas a essas ferramentas já estão presentes e vêm conquistando espaço dentro de universidades, empresas e indústrias. Dessa maneira, o objetivo deste estudo foi avaliar a eficiência de três delas (DWSIM, iiSE e COCO), além de estudar a possibilidade de aplicação dessas ferramentas nas atividades fim da universidade, especificamente na área de engenharia de processos assistida por computador. Os resultados do projeto mostraram que o DWSIM é o simulador que mais se assemelha aos softwares comerciais mais utilizados no Brasil, tendo como base características como a facilidade de compreensão da interface, da construção de fluxogramas e comunicação com outros programas.

### **Introdução**

Os simuladores de processos utilizam fluxogramas que são representados internamente por um conjunto de equações não lineares (na grande maioria dos casos) que descrevem a conectividade das unidades do fluxograma, as equações específicas para cada unidade de processo e as relações de propriedades físicas que definem entalpias, constantes de equilíbrio e outras propriedades termodinâmicas. Para lidar com esse conjunto numeroso de equações, existem duas classes de simuladores, que se utilizam de diferentes métodos para a simulação de processos. Esses métodos são conhecidos como sequencial modular e orientado por equações (BIEGLER et al., 1997).

Ambientes gratuitos de simulação surgem como uma atraente alternativa às ferramentas pagas para a aplicação na indústria e academia (em suas atividades fim, de ensino, pesquisa e extensão). Entretanto, em virtude do ainda limitado conhecimento que se tem sobre a abrangência das ferramentas gratuitas disponíveis, a comunidade de Engenharia Química ainda faz uso limitado das mesmas, seja por falta de familiaridade ou por falta de comprovação da sua eficiência, tanto em termos de poder de cálculo e de confiabilidade na previsão de propriedades, quanto em termos de facilidade de inserção de dados de entrada (especificações) e de visualização de resultados.

O projeto em questão visou à avaliação de simuladores de processos de licença gratuita quando comparados aos softwares de simulação pagos, particularmente os mais difundidos no Brasil, da empresa AspenTech. Trabalhando com três softwares (iiSE, COCO e DWSIM), o intuito do projeto foi, além de verificar o desempenho destes programas, avaliar a interface, a facilidade na construção dos fluxogramas, na inserção de especificações e a exibição de dados. Dos simuladores utilizados, apenas o iiSE caracteriza-se por ser orientado por equações, sendo os demais sequenciais modulares.

## **Materiais e métodos**

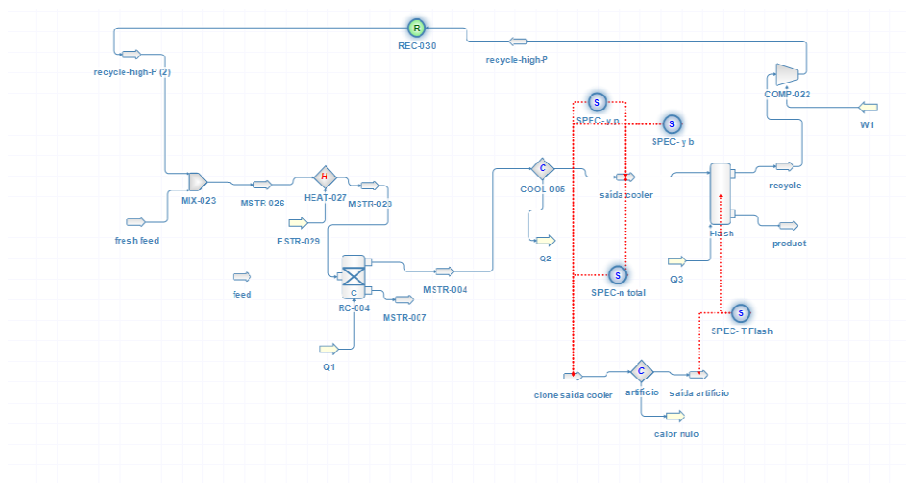
O projeto fez uso de três simuladores (iiSE, COCO e DWSIM) e, no início de seu desenvolvimento, foram feitas pesquisas bibliográficas na busca de problemas relevantes a serem resolvidos via simulador, além do acompanhamento de vídeos tutoriais com processos que exemplificavam o uso dos simuladores em questão. Muitos desses exemplos dos vídeos foram reproduzidos e a implementação de outros casos de estudo também foi efetuada.

Além disso, foram realizados seminários para o acompanhamento do desenvolvimento da pesquisa e reuniões com a orientadora a fim de identificar as dificuldades relacionadas tanto aos conceitos utilizados quanto à implementação nos ambientes de simulação.

A finalização do projeto contou com os testes de desempenho dos programas e com as análises finais.

## **Resultados e Discussão**

Para melhor verificar a eficiência dos ambientes de simulação avaliados nesse projeto, foram simulados os mesmos processos nos três simuladores. A Figura 1 representa o processo de produção de cumeno executado no DWSIM. Esse processo também foi implementado no iiSE e no COCO, mas, por conta do espaço limitado, as imagens referentes aos fluxogramas nesses programas não estão apresentadas.



**Figura 1:** Simulação do processo de produção do cumeno no DWSIM.

**Fonte:** Figura elaborada pelo próprio autor.

Através de estudos de caso como este, foi possível perceber as principais características destes simuladores e analisar o comportamento dos mesmos em diferentes situações, como, por exemplo, na presença de reciclo.

O iiSE, apesar de possuir interface de fácil compreensão, sendo bastante interativo ao mostrar, por exemplo, as variáveis candidatas a especificação e possibilitar o acompanhamento dos graus de liberdade globais e locais, exhibe desvantagens devido à falta de praticidade na construção dos fluxogramas, pelo fato de não renomear as novas correntes e equipamentos adicionados, por ser um tanto trabalhoso na realização de conexões entre as operações e também por não usar cores indicativas de erros ou convergência, o que torna difícil a identificação de onde ocorrem os problemas. Esse simulador apresenta comunicação com o Excel, como muitos simuladores de licença paga (programas proprietários). Além disso, ao iniciar o programa, uma sequência de procedimentos padrões que devem ser efetuados é colocada como, por exemplo, a adição das substâncias que farão parte da simulação e a seleção do pacote de propriedades termodinâmicas adequado. No entanto, o simulador iiSE é executado na web (roda em nuvem), o que muitas vezes compromete sua agilidade e eficiência. Ademais, o iiSE demanda maiores conhecimentos de termodinâmica, exigindo do usuário a determinação de alguns parâmetros e informações necessárias para a convergência do processo.

O DWSIM aparenta estar um pouco mais próximo dos simuladores comerciais (de licença paga, especialmente um dos mais utilizados no Brasil, o Aspen Hysys), apresentando interface bem semelhante e uma mesma sequência de procedimentos padrões. Esse simulador proporciona comunicação com outros programas, como, por exemplo, o ChemSep e o Excel, utilizando também os padrões CAPE-OPEN. Além disso, o DWSIM é caracterizado por ser *open-source*, ou seja, caracteriza-se por apresentar codificação disponível. O simulador também conta com um grande número de operações unitárias, o que o aproxima ainda mais dos simuladores comerciais. Nesse ambiente de simulação, a exportação dos resultados é

feita de forma mais eficaz, através de relatórios melhor organizados e mais completos. Ademais, o DWSIM contém maior número de operações unitárias quando comparado com os outros dois simuladores e exibe maior facilidade na inserção de especificações. Uma das desvantagens desse simulador está visível na Figura 1. Na simulação do processo de produção de cumeno, foi necessário usar de um artifício, com uso de ligações dinâmicas de especificação, para determinação da temperatura de operação do *flash* adiabático, visto que não é possível informar, no modelo *flash* do programa, que a operação é adiabática. Esse problema ocorreu apenas no DWSIM, pois a especificação de operação *flash* adiabática é possível no iiSE e no COCO. O evidente potencial do DWSIM instigou o uso dessa ferramenta de simulação em sala de aula, proporcionando aos alunos esse conhecimento logo nos anos iniciais da graduação.

Em relação ao COCO, sua interface não é muito intuitiva, de modo que alguns itens ou informações necessários não estão tão evidentes como nos demais simuladores, o que acaba dificultando a construção dos fluxogramas. Uma vantagem do simulador COCO é que, por usar o padrão CAPE-OPEN, pode utilizar pacotes termodinâmicos e operações unitárias de outros programas como, por exemplo, os modelos de processos de separação do ChemSep. No entanto, este simulador ainda é limitado em relação ao uso de pacotes termodinâmicos, exigindo do usuário a inserção de vários parâmetros de interação para muitos dos sistemas usuais de aparecerem em simulação de processos. Além disso, diferentemente dos outros simuladores utilizados, o COCO não apresenta a sequência de procedimentos padrões que geralmente é realizada no início da simulação e a inserção de algumas especificações é um tanto confusa, assim como o relatório gerado com os resultados.

## Conclusões

Os objetivos do projeto foram alcançados com êxito. O trabalho realizado permitiu reconhecer o potencial das ferramentas gratuitas de simulação. O DWSIM foi o ambiente de simulação que mais se assimilou aos simuladores comerciais, evidenciando ser possível habilitar seu uso na Engenharia Química.

## Agradecimentos

As autoras agradecem a UEM e o CNPq, que tornaram possível a existência e o desenvolvimento desse projeto.

## Referências

BIEGLER, L.T.; GROSSMANN, I.E.; WESTERBERG, A.W. **Systematic Methods of Chemical Process Design**. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1997.