



COBENGE 2005

XXXIII - Congresso Brasileiro de Ensino de Engenharia

"Promovendo e valorizando a engenharia em um cenário de constantes mudanças"

12 a 15 de setembro - Campina Grande - Pb

Promoção/Organização: ABENGE/UFPE

O SOFTWARE LIVRE, OCTAVE, NO AUXÍLIO À DISCIPLINAS CLÁSSICAS DE ENGENHARIA QUÍMICA

Andrade, C. M. G.- e-mail- cid@deq.uem.br

Departamento de Engenharia Química - Universidade Estadual de Maringá

Departamento de Eng. Química – Av.Colombo, nº 5790, Zona 07

CEP: 87020-900 - Maringá-PR – Brasil

Jorge, L. M. M.- e-mail- lmj@deq.uem.br

***Resumo:** O Octave é um software livre, sob licença GPL, que recebe contribuições em seu desenvolvimento e aperfeiçoamento de pessoas e entidades do mundo todo. O termo "software livre" refere-se ao fato do usuário poder executar, copiar, distribuir, estudar, mudar e aperfeiçoar o software. Pode-se dizer que é o similar livre do proprietário MATLAB[®]. O Octave é um software interativo, no qual o elemento básico são matrizes (que não requerem dimensionamento) usado para cálculos computacionais, científicos e de engenharia e visualização gráfica. Apresenta uma estrutura sintática similar às linguagens de alto nível como o BASIC, FORTRAN e C, porém sua utilização é mais simples principalmente devido a facilidade na entrada e saída de dados. O Octave é uma plataforma de desenvolvimento de aplicações, onde temos conjuntos de funções para aplicações específicas (toolbox) como: controle de sistemas, estatística e processamento de sinais. O objetivo deste trabalho é apresentar o Octave, e mostrar sua utilização no auxílio à resolução de problemas básicos nas disciplinas de engenharia química: Introdução a Engenharia Química, Termodinâmica, Fenômenos de Transportes, Engenharia das Reações Químicas, Operações Unitárias, Controle de Processos. O critério para a escolha dos problemas nas disciplinas foi baseado no que a resolução envolvia, fundamentalmente: análise numérica, estruturas de controle, e o uso do toolbox, o Control. Sua utilização mostrou-se simples, inclusive no tamanho físico dos programas gerados e eficiente principalmente na entrada e saída de dados. Desta forma, o Octave apresenta-se como uma boa ferramenta no auxílio às disciplinas de Engenharia Química focalizadas.*

Palavras-chave: Software livre, Octave, Engenharia química.

1. INTRODUÇÃO

O Octave, EATON (1997), é um software livre, sob a licença GPL, tendo sido desenvolvido inicialmente por James B. Rawling, da Universidade de Wisconsin-Madison, e John G. Ekerdt, da Universidade do Texas. Atualmente o gerenciamento do projeto Octave esta a cargo de John Eaton, da Universidade de Wisconsin, e recebe contribuições em seu desenvolvimento e aperfeiçoamento de inúmeras pessoas e entidades no mundo todo. Pode-se dizer que é o similar livre ao proprietário MATLAB[®].

O Octave é um software interativo, cujo elemento básico são matrizes (que não precisam de dimensionamento) utilizados para cálculos computacionais, científicos e de engenharia, e visualização gráfica.

O software apresenta estruturas sintáticas de programação similares às linguagens de alto nível como o BASIC, o FORTRAN, o PASCAL, e o C; porém sendo sua utilização muito mais simples, devido principalmente pela facilidade de entrada e saída de dados.

O Octave é uma plataforma de desenvolvimento de aplicações, no qual conjuntos de ferramentas inteligentes de resolução de problemas para aplicações específicas, denominadas toolboxes, podem ser desenvolvidas com relativa facilidade. Alguns dos toolboxes mais importantes são: sistemas de controle, estatística, redes neurais, etc.

O objetivo deste trabalho é apresentar o software livre Octave (versão 2.1.50) e mostrar a sua utilização no auxílio à resolução de uma série de problemas básicos nas disciplinas: Introdução a Engenharia Química, Termodinâmica da Engenharia Química, Fenômenos de Transportes, Engenharia das Reações Químicas, Operações Unitárias e Controle de Processos. O critério para a escolha dos exercícios por disciplina baseou-se no fato de que a sua resolução envolvia, fundamentalmente, em análise numérica, comandos de fluxo de controle de comandos e utilização de toolbox, no caso o Control.

2. RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS BÁSICOS DE ENGENHARIA QUÍMICA

A seguir o Octave é utilizado na resolução de problemas clássicos da engenharia química, relacionados às disciplinas de Introdução à Engenharia Química, Termodinâmica da Engenharia Química, Fenômenos de Transportes, Engenharia das Reações Químicas, Operações Unitárias e Controle de Processos Químicos.

2.1 Introdução à engenharia química

Aqui apresentamos um problema que envolve balanços de massa e energia que é visto, normalmente, na disciplina introdução à engenharia química, ou similares, que caracteriza-se pela resolução de sistema de equações algébricas lineares.

Exemplo adaptado a partir do Exercício 6.28, do HIMMELBLAU (1996). Resolver os sistema de equações algébricas lineares equações (1) a (14), provenientes dos balanços de massa, energia e restrições operacionais de uma planta industrial.

$$\begin{aligned}
-x_3 - x_4 - x_5 &= -43,93 & (1) \\
1,17x_3 - x_6 &= 0 & (2) \\
-0,745x_7 &= -71,37 & (3) \\
x_5 + x_7 - x_8 - x_9 - x_{10} + x_{15} &= 99,1 & (4) \\
x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} - x_{12} - x_{13} &= -8,4 & (5) \\
x_6 - x_{15} &= 24,2 & (6) \\
x_3 - x_6 + x_{12} + x_{16} &= 189,14 & (7) \\
-4,594x_{12} - 0,11x_{16} &= -146,55 & (8) \\
x_{11} &= 10,56 & (9) \\
x_4 &= 2,91 & (10) \\
x_8 - 0,0147x_{16} &= 0 & (11) \\
x_5 - 0,07x_{14} &= 0 & (12) \\
x_9 &= 14,62 & (13) \\
x_{12} - x_{14} + x_{16} &= 97,9 & (14)
\end{aligned}$$

Estas equações podem ser implementadas no Octave na forma $Ax = b$, apresentada a seguir:

```

>>A=[-1 -1 -1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
>>1.17 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
>>0 0 0 0 -0.745 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
>>0 0 1 0 1 -1 -1 -1 0 0 0 0 1 0
>>0 0 0 0 0 1 1 1 1 -1 -1 0 0 0
>>0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 -1 0
>>1 0 0 -1 0 0 0 0 0 1 0 0 0 1
>>0 0 0 0 0 0 0 0 0 -4.594 0 0 0 -0.11
>>0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0
>>0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
>>0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 -0.0147
>>0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.07 0 0
>>0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0
>>0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 -1 0 1];
>>b=[-43.9300;0; -71.3700; 99.1000; -8.4000; 24.2000; 189.1400;
146.5500; 10.5600; 2.9100; 0; 0; 14.6200; 97.9000];
>>x=inv(A)*b
>> % vetor solução, x, obtido através do comando inv
>>x =34.2259; 2.9100; 6.7941; 40.0443; 95.7987; 2.4558; 14.6200;
2.2613;10.5600; 27.9002; 10.3968; 97.0584; 15.8443; 167.0582

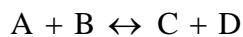
```

Figura 1- Listagem do programa no Octave para resolver o sistema de equações lineares.

2.2 Termodinâmica

Apresentamos a seguir um problema de Termodinâmica sobre equilíbrio químico, onde temos disponíveis as constantes de equilíbrio, resultando em um sistema de equações algébricas não lineares.

Exemplo baseado do exemplo 3.7 do CUTLIP & SHACHAM (1999). Ocorrem as seguintes reações em um reator em batelada em fase gasosa a volume constante.



Um sistema de equações algébricas descreve as relações de equilíbrio e as relações estequiométricas:

$$k1 = \frac{C_C C_D}{C_A C_B} \quad (15)$$

$$k2 = \frac{C_X C_Y}{C_B C_C} \quad (16)$$

$$k3 = \frac{C_Z}{C_A C_X} \quad (17)$$

$$C_A = C_{A0} - C_D - C_Z \quad (18)$$

$$C_B = C_{B0} - C_D - C_Y \quad (19)$$

$$C_C = C_D - C_Y \quad (20)$$

$$C_Y = C_X + C_Z \quad (21)$$

Queremos encontrar todas as concentrações das espécies em equilíbrio químico sabendo que: $k1=1,06$, $k2=2,63$, $k3=5$ e $C_{A0}=C_{B0}=1,5$. Parte-se da definição da função cs.m no Octave.

```
function f=cs(x)
% x(1)=ca,x(2)=cb,x(3)=cc,x(4)=cd,
% x(5)=cx,x(6)=cy,x(7)=cz
global cao cbo k1 k2 k3
f(1)=x(3)*x(4)-k1*x(1)*x(2);
f(2)=x(6)*x(5)-k2*x(2)*x(3);
f(3)=x(7)-k3*x(1)*x(5);
f(4)=cao-x(1)-x(4)-x(7);
f(5)=cbo-x(2)-x(4)-x(6);
f(6)=x(4)-x(6)-x(3);f(7)=x(6)-x(5)-x(7);
```

Figura 2- Listagem no Octave para definição da função cs onde temos o sistema de equações não lineares definidas pelas equações (15) a (21).

Na área de trabalho do Octave:

```

global cao cbo k1 k2 k3
>> cao=1.5;
>> cbo=1.5;
>> k1=1.06;
>> k2=2.63;
>> k3=5;
>> x1=[1 1 1 1 1 1];
>> y1=fsolve('cs',x1)
>> vetor solução, y1, utilizando a função fsolve do Octave para a resolução do
sistema de equações não lineares definidas em cs, x1 é o chute inicial
>>y1 =0.42069 0.24290 0.15357 0.70533 0.17779 0.55177 0.37398

```

Figura 3- Listagem do programa no Octave para a resolução do sistema de equações não lineares.

2.3 Fenômenos de transporte

A seguir temos um problema clássico de Fenômenos de Transportes, onde se busca equacionar a dependência da viscosidade em relação à temperatura. Temos aqui um exemplo de aplicação da regressão polinomial.

Exemplo adaptado da seção 1.1 do BIRD et al (1960). Deseja-se uma expressão matemática que relacione a viscosidade da água a 1 atm para a temperatura variando de 0 a 100°C.

Tabela 1-Viscosidade versus Temperatura

T(K)	μ (cp)
273.2	1.787
293.2	1.0019
313.2	0.653
333.2	0.4665
353.2	0.3548
373.2	0.2821

O que se pretende é ajustar uma função polinomial de quarta ordem aos dados experimentais, usando a rotina polyfit do Octave, e implementar os valores gerados por este polinômio através da rotina polyval.

```

>> T=[273.2 293.2 313.2 333.2 353.2
373.2];
>> mi=[1.787 1.0037 0.6581 0.4744 0.3651

```

```

0.2944];
>> format long;
>> p=polyfit(T,mi,4)
p=1.0e+02*0.000000000312490
-0.000000430121152
0.000222357178973
-0.051226125116165
4.446327366370078
>> mia=polyval(p,T);
>> title('visc. versus temp. p/ agua 1 atm')
>> xlabel('temp')
>> ylabel('dados exp. e ajust.')
>> plot(T,mi,"*;exp;",T,mia,";ajus;")

```

Figura 4- Listagem do programa no Octave para o ajuste polinomial dos dados de viscosidade versus temperatura.

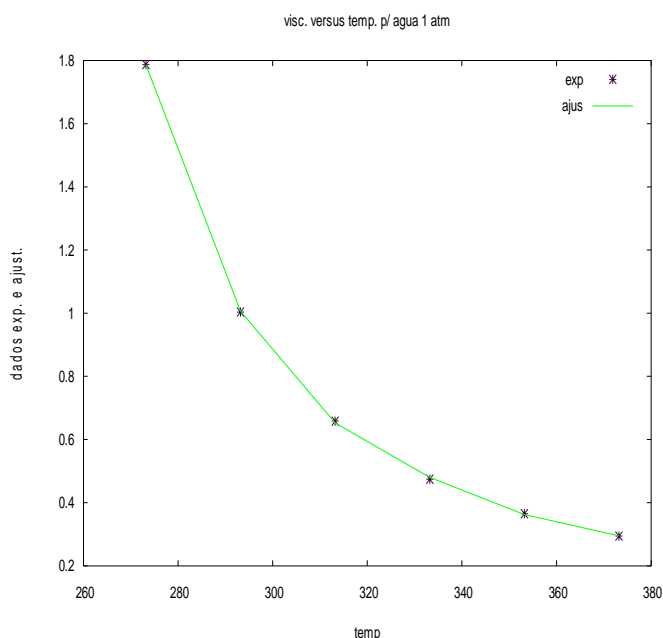
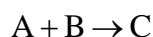


Figura 5- Dados experimentais e ajustados de viscosidade versus temperatura.

2.4 Engenharia das reações químicas

Apresentamos a seguir um problema clássico da disciplina Engenharia das Reações Químicas em que temos a necessidade da integração numérica de um sistema de equações diferenciais ordinárias.

Adaptado dos exemplos 4.6 e 4.7 do FOGLER (2002). Queremos calcular a massa de catalisador necessária para se alcançar 60% de conversão quando óxido de etileno (C) for produzido em fase vapor, via oxidação catalítica do etileno (A) com ar (B).



Etileno e oxigênio são alimentados em proporções estequiométricas a um reator de leito fixo, operando isotermicamente a 260 °C.

O etileno é alimentado a uma pressão de 10 atm e uma vazão de 0,30 lbmol/s. Propõe-se utilizar 10 feixes de tubos de 1½ polegada de diâmetro, série 40, com 100 tubos por feixe, recheados com catalisador.

Conseqüentemente, a vazão molar em cada tubo será 3×10^{-4} lbmol/s. As propriedades do fluido reagente devem ser consideradas idênticas àquelas do ar, a temperatura e pressão anteriormente especificadas. A massa específica das partículas de catalisador de um ¼ de polegada é de 120 lb/ft³ e a porosidade do leito é de 0,45. A lei da velocidade é: $-r'_A = kP_A^{1/3}P_B^{2/3}$ lbmol/lbcat.h com $k = 0.0141$ lbmol/atm.lbcat.h a 260 °C.

O modelo matemático proveniente dos balanços de massa e de quantidade de movimento é composto pelas equações (22) e (23):

$$\frac{dX}{dW} = \frac{k'}{F_{A0}} \left(\frac{1-X}{1+\epsilon X} \right)^y \quad (22)$$

$$\frac{dy}{dW} = -\frac{\alpha(1+\epsilon X)}{2y} \quad (23)$$

Onde $y=P/P_o$, para as condições de contorno, $W=0$ e $X=1$ e $y=1$, e os valores dos parâmetros, $\alpha=0,0166$ /lb cat, $\epsilon=-0,15$, $k' = 0,026$ lbmol/h.lbcat e $F_{A0} = 1,08$ lbmol/h.

No Octave, definindo a função fo.e.m

```
function xdot=foe(w,x)
kl=0.0266;
ep=-0.15;
a=0.0166;
fao=1.08;
xdot(1,:)=(kl/fao)*((1-(1))/(1+ep*x(1)))^x(2);
xdot(2,:)=a*(1+ep*x(1))/(2*x(2));
```

Figura 6- Listagem no Octave para definição da função fo onde temos o sistema de equações diferenciais definidas pelas equações (22) e (23).

Na área de trabalho, os sistemas de equações diferenciais pode ser resolvido por meio da rotina ode45:

```
>>[w,x]=ode45('foe',[0 60],[0;1]);
>> title('queda de pressao e conversao versus massa catalisador');
>> xlabel('massa catalisador');
>> ylabel('queda de pressao e conversao');
>> plot(w,x(:,1),w,x(:,2),'o;queda de pressao;',w,x(:,2),w,x(:,2),'*;conversao;')
```

Figura 7- Listagem do programa no Octave para a resolução do sistema de equações diferenciais.

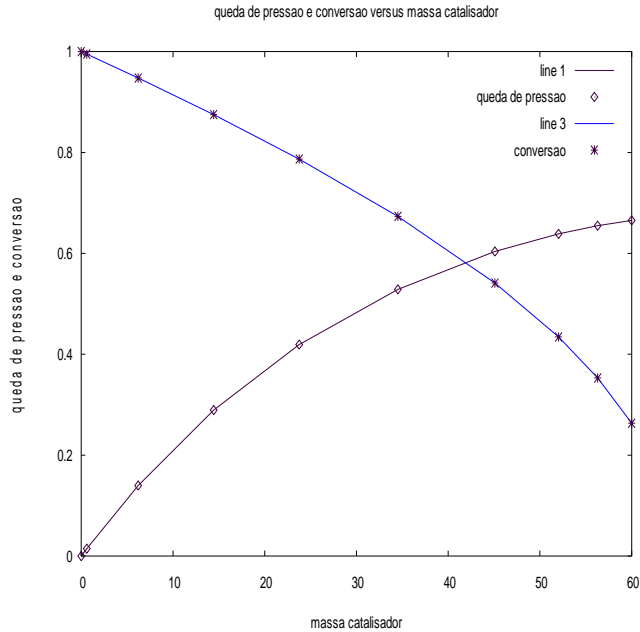


Figura 8- Queda de pressão e conversão versus massa do catalisador.

2.5 Operações unitárias

Apresenta-se aqui a resolução de um problema de cálculo de número de pratos para uma coluna de destilação fracionada binária. O objetivo da resolução de problema está na apresentação do comando de controle de fluxos de comando while no Octave.

Exemplo adaptado do exemplo 1.1 do BLACKADDER & NEDDERMAN (1982). Uma mistura molar de 60% de benzeno e 40% de tolueno deve ser separada por destilação contínua, para produzir um destilado contendo 95% de moles de benzeno e um produto de base contendo 90% de moles de tolueno.

A alimentação entra como vapor saturado, e a coluna é equipada com um condensador total que retorna o líquido em seu ponto de ebulição como refluxo para a coluna.

Obter o número de pratos para uma razão de refluxo igual a 3.5. São fornecidos os dados de equilíbrio para o sistema benzeno-tolueno:

Tabela 2- Dados de Equilíbrio

X	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
Y	0,0	0,21	0,38	0,50	0,62	0,71	0,79	0,85	0,91	0,95	1,0

Balço de massa na seção de retificação:

$$y_{n+1} = \frac{L_R}{D + L_R} x_n + \frac{D}{D + L_R} x_d \quad (24)$$

Onde:

$$\frac{L_R}{D+L_R} = 0,78 \quad \text{e} \quad \frac{D}{D+L_R} x_d = 0,21$$

Balço de massa na seço de esgotamento:

$$y_{m+1} = \frac{L_R + F}{L_R + D} x_m + \frac{F - D}{L_R + D} x_b \quad (25)$$

Onde:

$$\frac{L_R + F}{D + L_R} = 1,15 \quad \text{e} \quad \frac{F - D}{L_R + D} x_b = -0.0155$$

Onde:

F: vazão da alimentação;

D: vazão do destilado;

B: vazão do produto de fundo;

L_R : vazão do líquido;

x_a : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil na alimentação;

x_d : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil no destilado;

x_b : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil no produto de fundo;

x_n : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil na seço de retificação;

x_m : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil na seço de esgotamento;

y_{n+1} : concentração, na fase vapor, do componente mais volátil na seço de retificação;

y_{m+1} : concentração, na fase vapor, do componente mais volátil na seço de esgotamento.

No Octave:

```
>>xb=0.1;
>>xd=0.95;
>>xa=0.6;
>>x=[0 .1 .2 .3 .4 .5 .6 .7 .8 .9 1];
>>y=[0 .21 .38 .51 .62 .71 .79 .85 .91 .95 1];
>>ye=y;
>> % a seguir ajustamos os dados de equilíbrio por um polinômio de 4.
ordem
>>p=polyfit(y,x,4);
>>prr=0;
>>yr=0.95;
>>xcr=1;
>> % a seguir laço de fluxo para a resolução simultânea das equações de
balanço
na seço de retificação e a equação de equilíbrio,
>>while xcr>=0.6
>>xcr=polyval(p,yr);
>>yr=0.78.*xcr+.21;
>>prr=prr+1;
>>end
>>pre=0;
```

```

>>ye=yr;
>>xce=xcr;
>> % a seguir laço de fluxo para a resolução simultânea das equações de
balanço
na seção de esgotamento e a equação de equilíbrio,
>>while xce>=0.1
>>xce=polyval(p,ye);
>>ye=1.15.*xce-0.0155;
>>pre=pre+1;
>>end
>>pratos=pr+pré
>>pratos = 8

```

Figura 9- Listagem do programa no Octave para a obtenção de numero de pratos.

2.6 Controle de Processos

A seguir apresentam-se um problema básico de controle de processos químicos, onde mostra-se a utilização de algumas funções do toolbox control do Octave.

Queremos obter a resposta dinâmica de um sistema de primeira ordem a perturbação degrau, exemplo baseado no exemplo 5.1 do COUGHANOWR (1991). Um termômetro, com constante de tempo de 0.1 min, está em regime permanente num banho a uma temperatura de 90 °F. No tempo t=0, o termômetro é subitamente colocado num banho a 100 °F. Determine o tempo necessário para o termômetro alcançar 98 °F. Um sistema de primeira ordem é representado pela função de transferência, equação (26).

$$\frac{Y(s)}{X(s)} = \frac{k_p}{\tau s + 1} \quad (26)$$

No Octave:

```

>>kp=10;
>>tau=0.1;
>>t=0.001;
>>num=[kp];
>>den=[tau,1];
>> % a seguir define-se a partir da função de transferência o sistema
>>sys=tf2sys(num,den);
>>% aplicação do degrau unitário
>>y=step(sys,1,t);
>>% comando para controle de fluxo até que tenhamos a variação de 8 graus.
>>while y<8
>>t=t+0.001;
>>y=step(sys,1,t);
>>end
>>t =0.1610

```

Figura 10- Listagem do programa no Octave para a obtenção do tempo necessário para uma variação de 8 graus após uma perturbação de 10 graus na temperatura de referência.

3 CONCLUSÕES

A utilização do Octave mostrou-se simples, em comparação as linguagens tradicionais de programação, inclusive no tamanho físico dos programas gerados, e de fácil manipulação na entrada e saída de dados.

Assim, o Octave apresenta-se como uma ótima ferramenta na resolução de problemas básicos de engenharia química.

Devido a ausência de custos, a filosofia do desenvolvimento (isto é cooperativo), o código aberto e as citadas acima a utilização do Octave deve ser fomentada nas instituições de ensino superior, notadamente nos cursos de engenharia química e correlatos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BIRD, R. B.; et al. **Transport Phenomena**. New York: John Wiley & Sons, 1960.
- BLACKADDER, D. A.; NEDDERMAN, R. M. **Manual de Operações Unitárias**. São Paulo: Hemus, 1982.
- COUGHNOWER, D. R. **Process Systems Analysis and Control**. 2º ed. USA, McGraw-Hill, 1991.
- CUTLIP, M. B.; SHACHAM, M. **Problem Solving in Chemical Engineering with Numerical Methods**. New Jersey: Prentice-Hall, 1999.
- EATON, J. **GNU Octave**, 1997. <http://www.octave.org>
- FOGLER, H. S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. 3º ed., Rio de Janeiro: LTC, 2002.
- HIMMELBLAU, D. M. **Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering**. 6º ed., USA: Prentice-Hall, 1996.

The Free Software, Octave, to help in Chemical Engineering Disciplines

Abstract: *Octave is free software, licensed by GPL that receives contributions in its development and improvement from people and entities of the entire world. The term “free software” is matters of the user’s freedom to run, copy, distributes, study, change and improve the software. Can say it is the similar free for the proprietary MATLAB®. Octave is interactive software, whose basic elements are matrix (that don’t need defined dimension) used for computational calculus, scientific and of engineering and graphical visualization. The software presents syntactic structures of program similar to the high level languages like BASIC, FORTRAN and C, but its utilization is simpler, due principally to the facility or entrance and exit of data. Octave is a platform of application’s development, where wholes of intelligent tools for problem’s resolution in specifically applications (toolboxes) can be developed with facility. Some toolboxes are: control systems, statistics and signal processing. The objective of this work is introducing the Octave, and shows its utilization in help to resolution of various basic problems in subjects disciplines: Introduction to Chemical Engineering, Thermodynamics, Transport Phenomena, Chemical Engineering Reaction, Unit Operations, Process Control. The criterion for choose of the problems by subject was based in which its resolution has involved, fundamentally, in numerical analysis, control of structures, toolbox utilization, in this case the Control. Octave’s utilization presented simple, including in size of the programs engendered and efficient principally in entrance and exit of data. In this manner, Octave presents like a good tool to help in Chemical Engineering disciplines.*

Key-words: *Free software, Octave, Chemical engineering.*