

../../../../University/Pictures/uem-modelo-04.png

Gabriel R. Munhoz 106802

João Vítor Batistão 108074

../../../../University/Pictures/logoUEM.jpg

# **Modelagem Matemática, Simulação e Otimização de Processos**

Maringá, PR

27.11.2021

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>2</b>
<b>1.1</b>	<b>Modelagem, simulação e otimização</b>	<b>2</b>
1.1.1	Modelagem matemática	2
1.1.2	Simulação	3
1.1.3	Otimização	5
1.1.4	Controle de processos	6
<b>1.2</b>	<b>Revisão de Literatura</b>	<b>6</b>
<b>1.3</b>	<b>Objetivos e contribuições</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>MODELAGEM MATEMÁTICA</b>	<b>8</b>
<b>3</b>	<b>SIMULAÇÃO DINÂMICA</b>	<b>11</b>
<b>4</b>	<b>OTIMIZAÇÃO ESTACIONÁRIA</b>	<b>14</b>
<b>5</b>	<b>SIMBOLOGIA</b>	<b>15</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>16</b>
	<b>ANEXO A – CÓDIGO UTILIZADO NO SOFTWARE EMSO</b>	<b>17</b>

# 1 Introdução

Este trabalho tem como foco um estudo de caso, que foi pautado em alguns processos estudados, são eles: Modelagem matemática, Simulação, Otimização e Controle de processos. Esses processos foram utilizados para melhor entendimento do funcionamento de um tanque de agitação que realiza a mistura de água com uma solução aquosa de hidróxido de sódio.

Para o desenvolvimento desse estudo, é de extrema importância entender minimamente o processo que será modelado, para que assim seja possível uma implementação prática que resulte em um resultado efetivamente assertivo e o mais próximo do real possível. Caso não exista o entendimento do tema proposto, a realização da modelagem matemática, da simulação do processo e por consequência a análise dos dados e a obtenção de otimizações fica totalmente imprecisa.

## 1.1 Modelagem, simulação e otimização

A modelagem em conjunto com a simulação e otimização de processos é uma área

### 1.1.1 Modelagem matemática

É o montante de relações matemáticas que auxiliam a determinar e descrever o sistema. Tal modelagem tem objetivos como Melhorar o entendimento do processo, selecionar e treinar os colaboradores da operação, otimizar condições operacionais, dentre outros. (SOUZA; COLPO; HAMM, 2020)

Existe um processo para a criação desse modelo, primeiro é necessário definir a finalidade do modelo, após isso o processo é descrito através de fluxogramas, então são definidas as considerações e hipóteses simplificadas. Para a construção do modelo é necessário entender os princípios de conservação e balanços:

Balanço de massa total:

- Balanço de massa do componente  $i$
- Balanço de mols total
- Balanço molar do componente  $i$

Tudo isso juntamente com a 1 lei da termodinâmica, com o balanço de energia total, no qual há 3 formas de transferência de energia:

- Calor(Q): Energia que é transferida através da superfície devido a uma diferença de temperatura.
- Trabalho: Energia que é transferida através da superfície devido a uma força motriz que não diferença de temperatura (W)
- Energia advectiva: Energia que se associa a uma corrente de matéria.

### 1.1.2 Simulação

A simulação dos processos é feita a partir de softwares, um dos softwares que pode ser utilizado é o EMSO. Primeiramente é realizado um fluxograma base para a programação que será implementada posteriormente no software. (SOUZA; COLPO; HAMM, 2020)

Essa etapa é mais facilmente explicada por meio de um exemplo, é possível analisar esse fluxogramana na Figura 1.

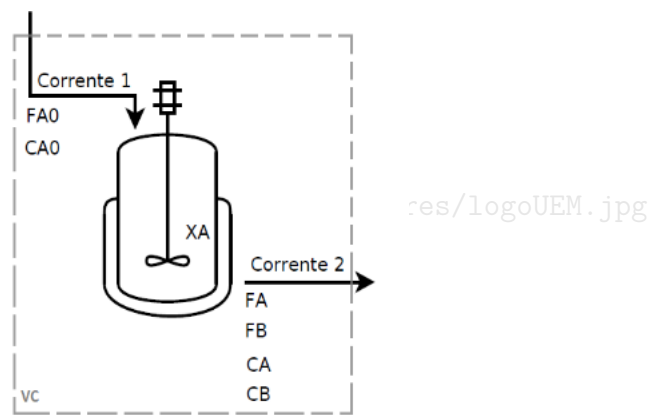


Figura 1 – Modelo de exemplo

A Imagem 2 é um exemplo de como é realizada uma simulação a partir da modelagem do fluxograma anterior no software EMSO.

```

1 using "types";
2
3
4 FlowSheet Reator_CSTR_com_Jaqueta
5
6 PARAMETERS
7 CA0 as Real (Brief="concentracao de A na entrada do reator", Unit='kg/m^3');
8 CB0 as Real (Brief="concentracao de B na entrada do reator", Unit='kg/m^3');
9 FA0 as Real (Brief="vazao volumetrica de entrada de A", Unit='kg/h');
10 Cp as Real (Brief="calor especifico", Unit='cal/(g*K)');
11 U as Real (Brief="coeficiente global de troca termica", Unit='cal/(m^2*h*K)');
12 T0 as Real (Brief="temperatura de entrada da reacao", Unit='K');
13 Tm as Real (Brief="temperatura media", Unit='K');
14 deltah as Real (Brief="razao entre variacao de entalpia e coeficiente estequiometrico", Unit='cal/kg');
15 E as Real (Brief="energia de ativacao / R", Unit='K');
16 k0 as Real (Brief="constante", Unit='1/h');
17 A as Real (Brief="area", Unit='m^2');
18 rho as Real (Brief="massa especifica", Unit='g/cm^3');
19 V as Real (Brief="volume do reator", Unit='m^3');
20
21 VARIABLES
22 CA as Real (Brief="concentracao de A na saida do reator", Unit='kg/m^3');
23 CB as Real (Brief="concentracao de B na saida do reator", Unit='kg/m^3');
24 XA as Real (Brief="conversao");
25 T as Real (Brief="temperatura da reacao", Unit='K');
26 k as Real (Brief="constante de velocidade", Unit='1/h');
27 QR as Real (Brief="calor de reacao", Unit='cal/h');
28 QEXT as Real (Brief="calor externo - calor da serpentina", Unit='cal/h');
29
30 EQUATIONS
31
32 #balanco molar para componente A#
33 diff(CA)=(FA0/(rho*V))*(CA0-CA)-k*CA;
34
35 #balanco molar para componente B#
36 diff(CB)=(FA0/(rho*V))*(CB0-CB)+k*CA;
37
38 CA=CA0*(1-XA);
39
40 k=k0*exp(-E/T);
41
42 #balanco de energia#
43 diff(T)=FA0/(rho*V)*(T0-T)+QR/(rho*Cp*V)+QEXT/(rho*Cp*V);
44
45 QR=deltah*V*k*CA;

```

Figura 2 – Código do software EMSO

Posteriormente a simulação feita no exemplo anterior, é possível gerar alguns resultados e consequentemente realizar análises das hipóteses antes levantadas, já que é esse o objetivo da criação e operacionalização do modelo, a seguir é possível verificar gráficos de algumas análises feitas.

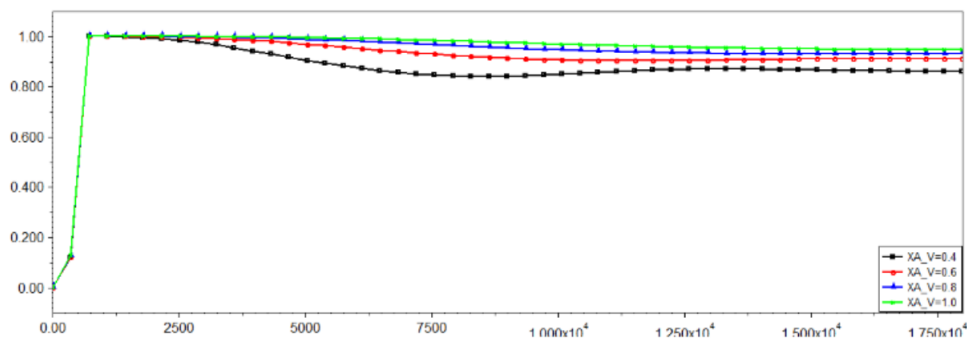


Figura 3 – Xa em função do tempo

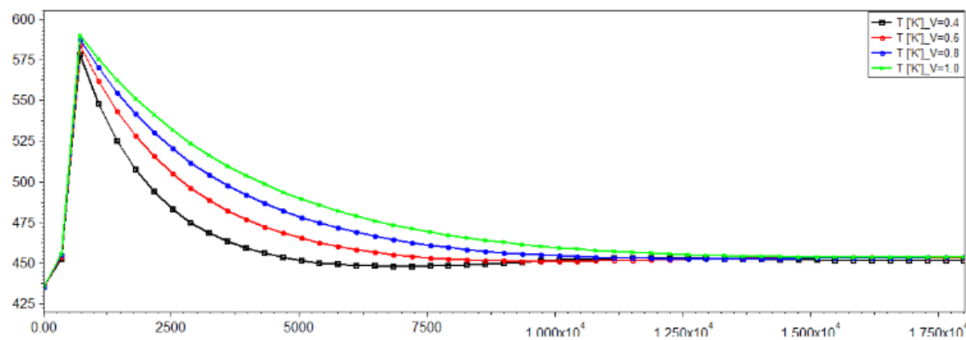


Figura 4 – Temperatura em relação ao tempo

### 1.1.3 Otimização

Otimização é a determinação de uma solução rentável e eficiente ou a mais rentável e eficiente a partir de métodos específicos para um problema processual.

Existem vários tipos de otimização na literatura, bem como: Otimizações econômicas que são representadas principalmente pela maximização de lucros, minimização de custos e de investimentos na operação, já as otimizações operacionais são representadas principalmente pela maximização da produção, minimização de consumo de insumos e do delta entre valores desejados e obtidos. [/University/Pictures/logoUEM.jpg](#)

Quanto as aplicações, podemos focar em encontrar um melhor local para a construção de uma planta, encontrar o melhor Layout, minimizar custos de produção, auxílio na alocação de recursos, dentre outros.

Uma vez definido o objetivo principal da otimização, passamos a nos preocupar com a formulação do problema de otimização, o qual temos que determinar alguns parâmetros, tais como:

- Função objetivo: Função que representa o problema escolhido para a otimização.
- Variáveis de decisão: Variáveis que fazem parte da função Objetivo.
- Restrições: A partir das condições físicas impostas, os limites ao sistema.
- Região viável: O qual é determinada pelas restrições.

Após essa delimitação, chegou o momento da solução do problema, que requer a escolha do método, a análise do processo o estabelecimento dos parâmetros acima citados, aplicação das técnicas matemáticas e a obtenção do resultado.

### 1.1.4 Controle de processos

Uma vez feito tudo que foi delimitado até o momento, se faz necessário controlar esse processo que já foi otimizado. Por isso é importante a construção do diagrama de controle de processos, o diagrama de blocos, Diagrama P&ID (Diagrama de tubulação e instrumentação).

Ainda assim, existem as estratégias de controle, tais como: Controle feedback, Controle feedforward, Controle feedback/feedforward.

## 1.2 Revisão de Literatura

Foram selecionados os seguintes artigos para revisão:

1. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR DO TIPO CSTR NÃO ISO-TÉRMICO NO SOFTWARE EMSO ([SOUZA; COLPO; HAMM, 2020](#))
2. SIMULAÇÃO DO REATOR QUÍMICO DE RETROMISTURA NO SOFTWARE EMSO ([SCHULTZ et al., 2013](#))

O primeiro se trata de um modelo matemático de um reator CSTR através do software EMSO, com o objetivo de otimizar a qualidade dos processos, entender os fenômenos e mitigar os custos referentes a produção propriamente dita. Segundo o artigo estudado, o reator CSTR tem como características principais a presença de mistura perfeita no meio, com ausência de variações dos estados e nesse contexto o artigo demonstra a modelagem de tal reator, envolvendo balanços de energia, além da simulação de vários cenários com o fim de compreender de forma mais profunda a eficiência da produção em uma indústria química.

Já no segundo artigo explicitado, tem um foco maior na otimização de processos que proporciona melhorias nas especificações dos produtos, redução de custos também em reatores químicos, mas agora com um foco maior na parte de desenvolvimento de melhorias, redução de custos e otimizações no geram a partir da criação do modelo matemático, e com o foco maior na análise que essa modelagem e simulação trás.

Ambos os artigos utilizam o software EMSO por ser um software de alto desempenho, capaz de realizar simulações em equipamentos ou processos que tenham sido modelados de antemão.

## 1.3 Objetivos e contribuições

O presente trabalho possui como objetivo a modelagem, simulação e otimização de um processo de mistura que ocorre em tanque de agitação. Esses processos serão realizados

no software EMSO. Esse estudo é de extrema importância para auxiliar a tomada de decisão por meio do uso de software de simulação e otimização.

Por meio desse trabalho prático de modelagem matemática no software EMSO será possível verificar como é realizada uma análise em conjunto com resultados advindos de uma simulação. Assim como a verificação de possíveis incongruências e dados não consistentes.





## 2 Modelagem Matemática

O sistema que será estudado é um tanque agitado com duas correntes de entrada, uma sendo água pura e a outra uma solução aquosa de hidróxido de sódio. Há também uma corrente de saída, um agitador e um controlador conforme a Figura 5 que retrata o modelo que será simulado.

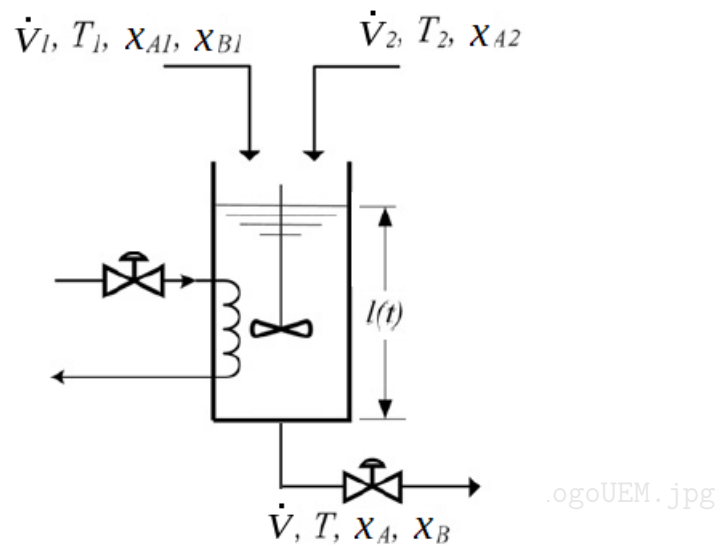


Figura 5 – Modelo do Tanque

Para realizar a modelagem desse tanque é necessário estabelecer certas hipóteses para tornar os cálculos mais simples e capazes de serem simulados. As hipóteses que foram estabelecidos são:

- Mistura perfeita;
- Propriedades físicas constantes;
- Calor de mistura desprezível;
- Tanque isolado e  $\dot{W}_s$  é desprezível.

A primeira equação que é possível derivar das informações do modelo é o balanço de massa global. Em que é definido um equilíbrio de massa, tudo que entra no sistema é equivalente ao que sai.

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = \sum_{i=1}^n \dot{V}_{e,i} - \rho_{e,i} - \sum_{j=1}^m \dot{V}_{s,j} - \rho_{s,j} \quad (2.1)$$

Sabendo-se que  $n = 2$  e  $m = 1$ , pois existem 2 correntes de entrada e apenas 1 de saída tem-se:

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = (\rho_1 \dot{V}_1 + \rho_2 \dot{V}_2) - \rho \dot{V} \quad (2.2)$$

Devido a consideração de que as propriedades físicas são constantes em qualquer ponto do tanque as densidades são iguais e podem ser retiradas do balanço de massa global.

$$\rho = \rho_1 = \rho_2 \quad (2.3)$$

$$\frac{dV}{dt} = (\dot{V}_1 + \dot{V}_2) - \dot{V} \quad (2.4)$$

Sendo o volume é  $V = A.l$ , é possível chegar na equação 2.5.

$$A \frac{dl}{dt} = \dot{V}_1 + \dot{V}_2 - \dot{V} \quad (2.5)$$

E a partir dessa pode-se isolar a derivada  $\frac{dl}{dt}$  para chegar na seguinte equação:

$$\frac{dl}{dt} = \frac{(\dot{V}_1 + \dot{V}_2 - \dot{V})}{A} \quad (2.6)$$

E outras equações que são possíveis de derivar do modelo são os balanços de massa por componente. Para o componente A:

$$\frac{d(x_A V)}{dt} = (x_{A,1} \dot{V}_1 + x_{A,2} \dot{V}_2) - x_A \dot{V} \quad (2.7)$$

Realizando a regra do produto na equação 2.7, tem-se:

$$V \frac{dx_A}{dt} + x_A \frac{dV}{dt} = (x_{A,1} \dot{V}_1 + x_{A,2} \dot{V}_2) - x_A \dot{V} \quad (2.8)$$

Substituindo a equação 2.6 na equação anterior, tem-se:

$$V \frac{dx_A}{dt} + x_A (\dot{V}_1 + \dot{V}_2 - \dot{V}) = (x_{A,1} \dot{V}_1 + x_{A,2} \dot{V}_2) - x_A \dot{V} \quad (2.9)$$

$$V \frac{dx_A}{dt} = \dot{V}_1 (x_{A,1} - x_A) + \dot{V}_2 (x_{A,2} - x_A) \quad (2.10)$$

$$A l \frac{dx_A}{dt} = \dot{V}_1 (x_{A,1} - x_A) + \dot{V}_2 (x_{A,2} - x_A) \quad (2.11)$$

De forma similar é realizado para o componente B:

$$\frac{d(x_B V)}{dt} = (x_{B,1} \dot{V}_1 + x_{B,2} \dot{V}_2) - x_B \dot{V} \quad (2.12)$$

Realizando a regra do produto na equação 2.12, tem-se:

$$V \frac{dx_B}{dt} + x_B \frac{dV}{dt} = (x_{B,1} \dot{V}_1 + x_{B,2} \dot{V}_2) - x_B \dot{V} \quad (2.13)$$

Substituindo a equação 2.6 na equação anterior, tem-se:

$$V \frac{dx_B}{dt} + x_B (\dot{V}_1 + \dot{V}_2 - \dot{V}) = (x_{B,1} \dot{V}_1 + x_{B,2} \dot{V}_2) - x_B \dot{V} \quad (2.14)$$

$$V \frac{dx_B}{dt} = \dot{V}_1 (x_{B,1} - x_B) + \dot{V}_2 (x_{B,2} - x_B) \quad (2.15)$$

$$Al \frac{dx_B}{dt} = \dot{V}_1 (x_{B,1} - x_B) + \dot{V}_2 (x_{B,2} - x_B) \quad (2.16)$$

Por fim, outra equação também pode ser modelada a partir das informações do tanque, e para chegar nela é necessário partir do balanço de energia, que é mostrado na equação abaixo.

$$\frac{dE_T}{dt} = \sum_{i=1}^n \dot{M}_i \bar{E}_{T,i} - \sum_{j=1}^m \dot{M}_j \bar{E}_{T,j} + \dot{Q} + \dot{W} \quad (2.17)$$

Sabendo que  $E_T = E_k + E_p + U$ , tem-se:

$$\frac{d(E_k + E_p + U)}{dt} = \sum_{i=1}^n \dot{M}_i (\bar{E}_{k,i} + \bar{E}_{p,i} + \bar{U}_i) - \sum_{j=1}^m \dot{M}_j (\bar{E}_{k,j} + \bar{E}_{p,j} + \bar{U}_j) + \dot{Q} + \dot{W} \quad (2.18)$$

No modelo estudado as energias cinética e potencial assim como o trabalho são desprezíveis e igualados a 0. E como o objeto de estudo é líquido pode-se afirmar que  $\frac{dU}{dt} \approx \frac{dH}{dt}$ . Assim, a equação 2.18 pode ser simplificada para a equação 2.20 por meio da substituição da energia interna por entalpia, equação 2.19.

$$\frac{dU}{dt} \approx \frac{dH}{dt} = \rho C_p V \frac{dT}{dt} \quad (2.19)$$

$$\bar{\rho} \bar{C}_p Al \frac{dT}{dt} = \bar{\rho} \bar{C}_p \dot{V}_1 (T_1 - T) + \bar{\rho} \bar{C}_p \dot{V}_2 (T_2 - T) + \dot{Q} \quad (2.20)$$

Assim, o conjunto das equações 2.5, 2.11, 2.16 e 2.20 que foram encontradas a partir dos balanços de massa, global e de componentes, e o balanço de energia definem o modelo matemático completo do sistema e torna possível realizar a simulação do tanque.

### 3 Simulação Dinâmica

Para realização da simulação foi escolhido o software EMSO e o código utilizado no software se encontra no Apêndice A. O tanque do sistema foi descrito como cilíndrico e com diâmetro de 2,76 m e os outros dados utilizados na simulação foram:

- Área do tanque ( $A$ ) = 5,983  $m^2$ ;
- Calor ( $\dot{Q}$ ) = 100000 kW;
- Densidade do líquido ( $\rho$ ) = 1000  $kg/m^3$ ;
- Calor específico do líquido ( $C_p$ ) = 4,18 kJ/(kg\*K);
- Temperatura da corrente 1 ( $T_1$ ) = 323 K;
- Temperatura da corrente 2 ( $T_2$ ) = 293 K;
- Composição de água na corrente 1 ( $x_{a,1}$ ) = 0,4;
- Composição de hidróxido de sódio na corrente 1 ( $x_{b,1}$ ) = 0,6;
- Composição de água na corrente 2 ( $x_{a,2}$ ) = 1,0;
- Composição de hidróxido de sódio na corrente 2 ( $x_{b,2}$ ) = 0,0;
- Vazão de saída do tanque ( $\dot{V}$ ) = 0,3  $\sqrt{l} m^3/s$ ;
- Vazão de entrada da corrente 1 ( $\dot{V}_1$ ) = 0,3  $m^3/s$ ;
- Vazão de entrada da corrente 2 ( $\dot{V}_2$ ) = 0,15  $m^3/s$ ;
- Tempo de simulação ( $t$ ) = 100000 s;

Condições Iniciais:

- Temperatura ( $T$ ) = 293 K;
- Altura da mistura ( $l$ ) = 2,0 m;
- Composição de água ( $x_a$ ) = 1,0;
- Composição de hidróxido de sódio ( $x_b$ ) = 0,0;

Assim, a partir da simulação dos dados acima foi possível montar a tabela 1 com os resultados obtidos.

Tabela 1 – Resultados da simulação

Temperatura (T)	Altura da mistura (l)	Composição de água ( $x_a$ )	Composição de hidróxido de sódio ( $x_b$ )
366,16	2,25	0,6	0,4

Foram gerados gráficos da temperatura, das composições dos componentes e da altura da mistura no tanque pelo tempo, focando nos instantes iniciais ( $t \leq 300$  s) para verificação das variações. A temperatura e a altura da mistura foram aumentando conforme os gráficos 6 e 8, e as concentrações de água e de hidróxido de sódio também foram variando de acordo com o gráfico 7.

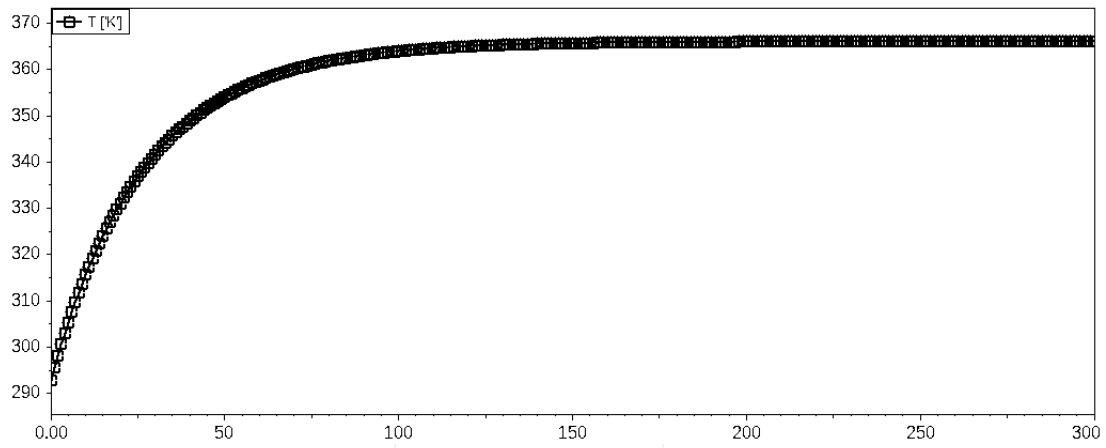


Figura 6 – Gráfico da temperatura (T) x tempo (t)

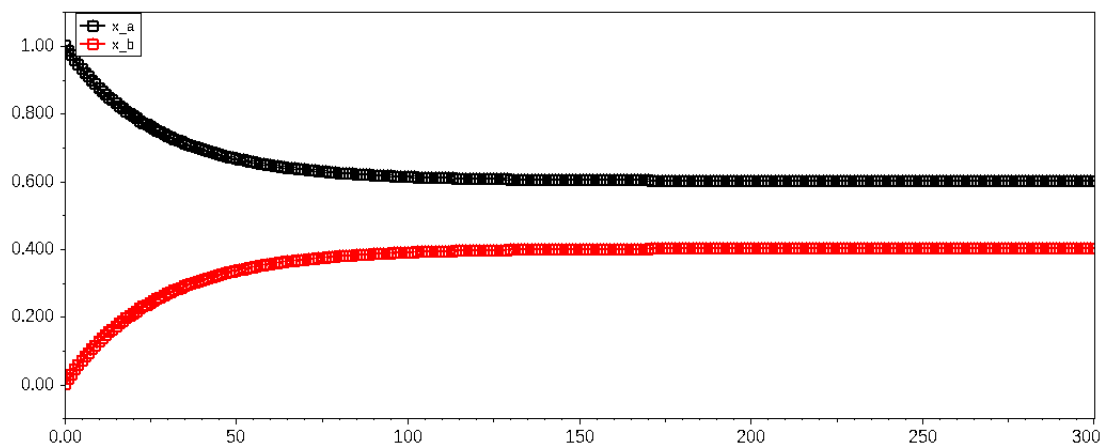


Figura 7 – Gráfico da composição de água e de hidróxido de sódio ( $x_a$  e  $x_b$ ) x tempo (t)

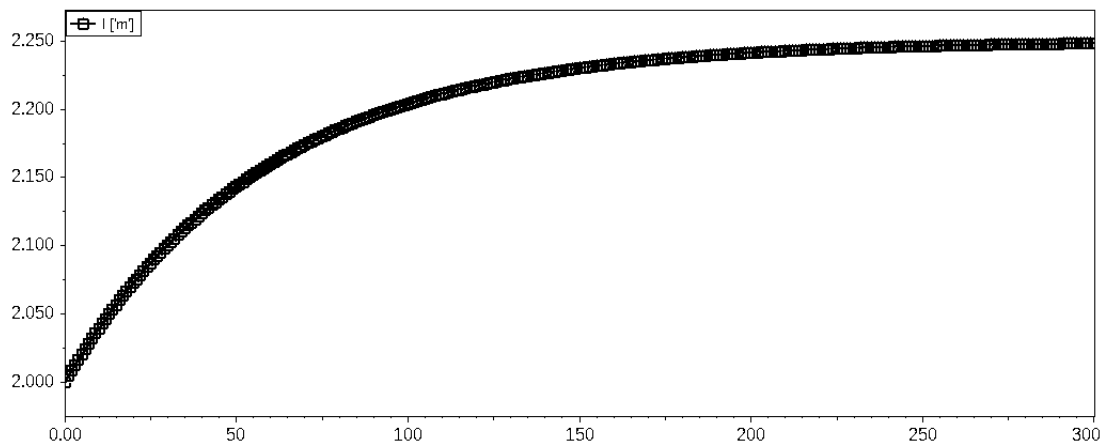


Figura 8 – Gráfico da altura da mistura no tanque ( $l$ ) x tempo ( $t$ )

A partir desses resultados é possível notar que a temperatura aumenta de forma rápida no sistema e entra em equilíbrio próximo de 150 segundos. O aumento da temperatura de 293 K para 366,16 K é possivelmente derivado da entrada da corrente 1 a 323 K em conjunto com a transformação da energia interna da mistura em energia térmica.

As composições de água e de hidróxido de sódio também se equilibram próximo de 150 segundos. A concentração de água diminui no tanque de 100% para 60% e a concentração de hidróxido de sódio aumenta de 0% para 40%, isso ocorre devido a maior vazão da corrente 1 que possui uma concentração maior de hidróxido de sódio e menor de água.

Portanto, no tanque ocorre uma diluição da solução aquosa de hidróxido de sódio que entra pela corrente 1, diminuindo a concentração desse componente de 60% para 40%. Contudo, devido a agitação a mistura acaba sendo aquecida para 366,16 K e a mistura chega a uma altura de 2,25 m.

## 4 Otimização Estacionária

A otimização proposta neste trabalho foi a de maximizar a concentração de hidróxido de sódio na corrente de saída, sendo assim a função objetiva se resume ao valor de  $x_b$ . Para realizar uma otimização é necessário estabelecer restrições para o sistema, e as restrições utilizadas nesse modelo foram:

$$1m \leq l \leq 4m \quad (4.1)$$

$$293K \leq T \leq 343K \quad (4.2)$$

Assim como a simulação, a otimização também foi realizada no software EMSO e o código utilizado está presente no Apêndice A. Para maximizar a concentração de  $x_b$  foi liberado para o software variar apenas a vazão de entrada da corrente 1. E possivelmente devido isso e as restrições estabelecidas, o software não conseguiu gerar resultados convergentes.

É possível observar que, durante a simulação do sistema a temperatura da mistura foi elevada a 366,16 K, contudo na otimização do modelo há uma restrição de temperatura máxima para 343 K. Logo, é possível concluir que com as restrições estabelecidas na otimização não é possível melhorar o processo e que talvez nem seja possível a realização da mistura, visto que a temperatura que é atingida na simulação ultrapassa a restrição de temperatura máxima da otimização.

## 5 Simbologia

- $Q$  - Calor - Unidade: kJ;
- $\dot{Q}$  - Taxa de calor - Unidade: kW;
- $C_p$  - Calor específico - Unidade: kJ/(kg\*K);
- $\rho$  - Densidade - Unidade: kg/m<sup>3</sup>;
- $x$  - Concentração - Unidade: pu;
- $V$  - Volume - Unidade: m<sup>3</sup>;
- $\dot{V}$  - Vazão do líquido - Unidade: m<sup>3</sup>/s;
- $A$  - Área - Unidade: m<sup>2</sup>;
- $l$  - Altura - Unidade: m;
- $T$  - Temperatura - Unidade: K;
- $E_T$  - Energia total - Unidade: kJ;
- $E_p$  - Energia potencial - Unidade: kJ;
- $E_k$  - Energia cinética - Unidade: kJ;
- $U$  - Energia interna - Unidade: kJ;
- $H$  - Entalpia - Unidade: kJ/mol;
- $m$  - Massa - Unidade: kg;
- $\dot{M}$  - Vazão mássica - Unidade: kg/s;



## Referências

SCHULTZ, G. et al. Simulação do reator químico de retromistura no software emso. *ENCICLOPÉDIA BIOSFERA*, v. 9, n. 17, 2013. [6](#)

SOUZA, F. S.; COLPO, B. A. da S.; HAMM, J. B. S. Modelagem e simulação de um reator do tipo cstr não isotérmico no software emso. *REVISTA DE ENGENHARIA E TECNOLOGIA*, v. 12, n. 1, 2020. [2](#), [3](#), [6](#)



# ANEXO A – Código utilizado no software EMSO

```

1  using "types";
2
3  Model Tanque
4
5      PARAMETERS
6          A                      as area;
7          Q                      as heat_rate;
8          Cp                    as cp_mass;
9          rho                   as dens_mass;
10
11     VARIABLES
12         l                      as length;
13         x_a1                   as fraction;
14         x_b1                   as fraction;
15         T1                     as temperature;
16         V1                     as flow_vol;
17         x_a2                   as fraction;
18         x_b2                   as fraction;
19         T2                     as temperature;
20         V2                     as flow_vol;
21         x_a                    as fraction;
22         x_b                    as fraction;
23         T                      as temperature;
24         V                      as flow_vol;
25
26     EQUATIONS
27         "Balanço de massa global"
28         diff(l) * A = V1 + V2 - V;
29
30         "Balanço de massa para componente A"
31         diff(x_a) * A * l = V1 * (x_a1 - x_a) + V2 * (x_a2 - x_a)
32         ;
33
34         "Balanço de massa para componente B"
35         diff(x_b) * A * l = V1 * (x_b1 - x_b) + V2 * (x_b2 - x_b)
36         ;

```

```
35
36     "Balanco de energia para o tanque"
37     diff(T) * rho * Cp * A * l = (rho * Cp * V1) * (T1 - T) +
        (rho * Cp * V2) * (T2 - T) + Q;
38
39 end
40
41 FlowSheet Avaliacao
42
43     DEVICES
44     tanque          as Tanque;
45
46     SET
47     tanque.A = 5.983 * 'm^2';
48     tanque.Q = 100000 * 'kW';
49     tanque.rho = 1000 * 'kg/m^3';
50     tanque.Cp = 4.18 * 'kJ/(kg*K)';
51
52     SPECIFY
53     tanque.T1 = 323 * 'K';
54     tanque.T2 = 293 * 'K';
55     tanque.x_a1 = 0.4;
56     tanque.x_b1 = 0.6;
57     tanque.x_a2 = 1.0;
58     tanque.x_b2 = 0.0;
59     tanque.V = 0.3 * ((tanque.l)^(0.5)) * 'm^3/s';
60     # 1080 m^3/h
61     tanque.V1 = 0.3 * 'm^3/s';
62     # 540 m^3/h
63     tanque.V2 = 0.15 * 'm^3/s';
64
65     INITIAL
66     tanque.T = 293 * 'K';
67     tanque.l = 2.0 * 'm';
68     tanque.x_a = 1.0;
69     tanque.x_b = 0.0;
70
71     OPTIONS
72     TimeStep = 1;
73     TimeEnd = 100000;
74     TimeUnit = 's';
75
```

```
76 end
77
78 Optimization OtimizacaoDoXb as Avaliacao
79
80     MAXIMIZE
81     tanque.x_b;
82
83     FREE
84     tanque.V1;
85
86     EQUATIONS
87     tanque.l <= 4 * 'm';
88     tanque.l >= 1 * 'm';
89     tanque.T <= 343 * 'K';
90     tanque.T >= 293 * 'K';
91
92     OPTIONS
93     Dynamic = false;
94
95 end
```