Introdução à modelagem e simulação de processos

Ricardo Rasmussen Petterle

OBJETIVOS DE APRENDIZAGEM

> Conceituar modelagem matemática de processos.
> Descrever os elementos básicos de um modelo matemático.
> Reconhecer os principais sistemas de desenvolvimento de modelos.

Introdução

Os diversos ramos do setor produtivo e da área de engenharia química envolvem vários processos e sistemas que apresentam variáveis de entrada e parâmetros, sejam eles conhecidos ou não. O sucesso de uma empresa depende de como ela atua em toda a cadeia produtiva e do que gera para o consumidor final. Nesse sentido, a modelagem matemática e a simulação de processos servem como ferramentas preditivas que contribuem para a melhor tomada de decisão frente a incertezas, problemas ou mudanças necessárias. No entanto, tais técnicas só serão efetivas se bem compreendidas. Os processos em geral e suas propriedades físico-químicas também devem ser compreendidos, pois serão objeto de estudo e validação das ferramentas.

Neste capítulo, você vai estudar os principais conceitos sobre modelagem matemática e simulação. Além disso, vai conhecer os principais elementos presentes no processo de modelagem. Por fim, vai ver diferentes sistemas utilizados para o desenvolvimento dos modelos matemáticos.

Modelagem matemática de processos

A indústria e o comércio, de maneira geral, estão interessados em agregar valor a um determinado produto ou serviço. Um empreendedor deve buscar constantemente a inovação e a otimização dos processos para se manter no mercado altamente competitivo. Para isso, ele tem que buscar um diferencial que atraia ou mantenha o consumidor, que está cada vez mais exigente. Além disso, o empreendedor precisa enfrentar a concorrência nacional e internacional.

Essa busca pela otimização difere do clássico pensamento capitalista que focava apenas no aumento da lucratividade, obtido principalmente com práticas de redução de custos.

No contexto atual, a otimização dos serviços e processos produtivos de uma empresa para que sejam alcançados melhores resultados demanda investimento, especialmente em mão de obra especializada, alta tecnologia e um sistema de gestão eficaz. Atualmente, a modelagem e a simulação vêm ganhando destaque na indústria. Um exemplo disso pode ser visto na planta química apresentada na Figura 1. Nesse caso, o principal objetivo é avaliar a operabilidade de toda a planta por meio de modelos matemáticos que descrevam cada processo e sistema pertencente a ela.

Para a concretização desse novo modelo de negócio, algumas técnicas e/ou ferramentas foram criadas e aprimoradas, principalmente com a introdução de computadores e o avanço tecnológico. Entre essas técnicas, estão a modelagem matemática e a simulação de processos.

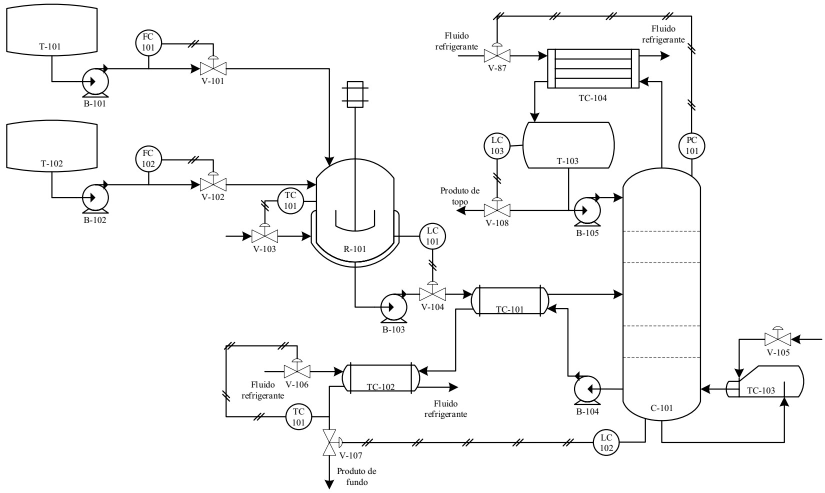

Figura 1. Diagrama de processo de uma planta química típica.
Fonte: Franco (2021, p. 5).

Antes de compreendermos o funcionamento dessas ferramentas, é importante entendermos o que os termos e conceitos listados a seguir significam.

- Modelagem: sem estar inserida em um contexto, é apenas o substantivo feminino derivado do verbo modelar. No entanto, acompanhada do termo “matemática”, forma uma expressão e assume outro papel.
- Modelagem matemática: por ter aplicabilidade multidisciplinar, cada área adota uma explicação que mais se aproxima ao tema. Porém, para processos químicos, é possível definir como a constituição de modelos matemáticos que mais se aproximem de uma dada realidade a ser analisada e que podem ser interpretados como respostas no mundo real (BASSANEZI, 1999).
- Modelo matemático: representação de um processo (por exemplo, químico) por meio de equações matemáticas.
- Processo: conjunto de unidades de operação, como colunas de destilação e reatores, no caso da engenharia química.
- Parâmetro: valor atribuído a uma propriedade do processo (por exemplo, química ou física). É conhecido como uma constante ou não. Em caso negativo, deve ser estimado.

- Equação: expressão matemática que relaciona as variáveis.
- Variável: grandeza representada por simbologia matemática que, em geral, apresenta um valor inicial desconhecido.
- Variável de entrada: é determinada, com base no conhecimento prévio do processo, anteriormente à resolução dos problemas, sendo alterada durante a operação.
- Sistemas: conjunto de elementos interdependentes que interagem entre si.
- Simulação: realização ou imitação de um processo real por meio de um modelo computacional que gere resultados que permitam criar estratégias operacionais (BEQUETTE, 1998).
- Grau de liberdade: é a diferença entre o número de variáveis independentes do processo e o número de equações independentes do processo.

Fique atento

O grau de liberdade também serve para identificar modelos que apresentam solução única, o que ocorre quando o número de variáveis desconhecidas é igual ao número de equações independentes.

A partir do conhecimento dos conceitos, vale ressaltar que as leis fundamentais da física e da química (como as leis de conservação de energia e massa) constituem a base dos modelos matemáticos.

Como se trata de um procedimento muito importante para qualquer empreendimento, sua implantação deve ser realizada de forma criteriosa, devendo ser coordenada por um profissional devidamente habilitado. Tal profissional deve ter domínio sobre as principais áreas do conhecimento (termodinâmica, escoamento de fluídos, cinética, transferência de calor e massa, controle e otimização de processos, entre outras), sobre os processos envolvidos (como colunas de destilação, reatores e trocadores de calor, no caso da engenharia química) e sobre as ferramentas utilizadas.

Dentro de todo o contexto destacado, não se pode esquecer o principal objetivo da modelagem e simulação de processos: auxiliar na tomada de decisões, em todas as etapas, por meio de modelos matemáticos, sem a necessidade de realizar procedimentos experimentais, que demandam mais tempo e custos e podem apresentar respostas subjetivas.

O Quadro 1 mostra um balanço entre as vantagens e desvantagens de implementar esse processo de modelagem matemática e simulação de processos.

Quadro 1. Principais vantagens e desvantagens da modelagem matemática e simulação de processos

Vantagens	Desvantagens
■ Custos menores. ■ Validação do processo sem precisar fazer testes experimentais. ■ Simulação de cenários com diferentes variáveis de entrada e valores dos parâmetros. Na prática, isso poderia levar tempo e saturar o sistema.	■ Conhecimento técnico sobre modelagem matemática e simulação computacional. ■ Treinamento para que o profissional especializado possa operar sistemas computacionais.

Na próxima seção, vamos estudar elementos do modelo matemático.

Elementos do modelo matemático

A constituição de um modelo matemático precisa atender a alguns elementos considerados básicos para ter o melhor desempenho possível (LUYBEN, 1996; OGUNNAIKE; RAY, 1994). Segundo Bequette (1998), oito elementos devem, necessariamente, estar presentes no modelo a ser criado. Além disso, podem ser incluídos outros elementos, dependendo da demanda do processo. A seguir, veja os oito elementos básicos da modelagem e simulação descritos por Bequette (1998).

Descrição do processo e definição do problema: descrever o processo e definir o problema é o ponto de partida de um modelo matemático. Esse elemento pode ser definido como o conhecimento dos fenômenos que envolvem o processo e o que se deseja conhecer em relação a suas causas e efeitos. É possível considerar esse elemento como a parte mais importante para a análise de um processo, ainda que não se tenham regras ou padrões para que isso seja feito. Em caso de dificuldade para iniciar essa descrição e definição, é possível reunir as pessoas envolvidas no processo e fazer um *brainstorming* (tempestade de ideias). Assim, com diferentes pontos de vista, fica mais fácil detectar o que mais se repete na dinâmica.

Teoria e aplicação das leis fundamentais: Após descrever o processo e entendê-lo, deve-se aplicar a teoria que governa os seus fenômenos. Para esse elemento, deve-se buscar embasamento e fundamentação em diferentes fontes bibliográficas ou referências sobre o processo, mesmo que elas não estejam publicadas, desde que sejam relevantes. Relacionar outros ensaios que se assemelham ao processo que se pretende realizar e pontuá-los na constituição do modelo matemático é fundamental para o sucesso da técnica, pois será possível averiguar situações em que já foram utilizados modelos que se mostraram inadequados, evitando repeti-los. Assim, é possível focar nos casos em que os resultados para um problema similar foram satisfatórios.

Equacionamento: é a "tradução" da teoria para notação matemática.

Considerações: é uma etapa fundamental feita pelo engenheiro de acordo com sua avaliação e percepção na modelagem.

Consistência: um sistema ou processo é dito consistente se o número de variáveis é igual ao número de equações. Em outras palavras, se o grau de liberdade for igual a zero, o sistema é consistente. Caso contrário, pode ocorrer sub ou sobre especificação do sistema. Por fim, deve-se atentar para as unidades de medida dos termos que compõem as equações.

Matemática e computação: a natureza das equações do modelo é o que determina o método para a obtenção da solução, seja ele analítico ou numérico. Por exemplo, um modelo dinâmico que resulta em um EDO de primeira ordem como condição inicial pode ser resolvido pelo método de Runge-kutta de quarta ordem.

Solução e validação: esses elementos são contemplados na etapa final do processo de construção de um modelo matemático, quando os resultados do modelo são comparados com dados experimentais.

Para facilitar o entendimento do processo de modelagem e seus elementos básicos, veja o fluxograma da Figura 2.

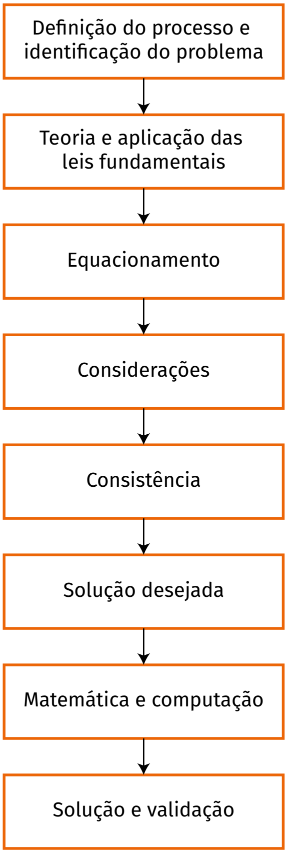

Figura 2. Fluxograma dos elementos básicos da modelagem matemática.

Na próxima seção, vamos ver os principais tipos de sistemas para desenvolvimento dos modelos.

Principais tipos de sistemas para desenvolvimento dos modelos

A classificação de sistemas deve considerar o tipo de problema a ser resolvido, assim como os fenômenos químicos e físicos envolvidos. Desse modo, o engenheiro deve ser o responsável por avaliar e classificar qual sistema é mais adequado para o desenvolvimento do modelo que vai resolver o seu processo.

Vale ressaltar que, antes de conhecer os diferentes sistemas para desenvolver um modelo matemático específico, é preciso entender uma classificação que divide os modelos matemáticos em dois grandes grupos, dependendo da forma escolhida para sua obtenção: fenomenológicos (físicos ou teóricos) e empíricos.

A obtenção de um modelo matemático por meio da abordagem fenomenológica (física ou teórica) está relacionada às leis químicas, que envolvem princípios para balanço de massa, energia e quantidade de movimento, com comportamento conhecido, de forma a permitir sua extrapolação.

A abordagem empírica voltada para a obtenção de modelos matemáticos é baseada em dados experimentais ou observações. Os modelos dessa abordagem são, em alguns casos, mais simples e mais fáceis de serem desenvolvidos em comparação aos modelos fenomenológicos. No entanto, uma de suas desvantagens é que eles não podem ser extrapolados. Ou seja, essa abordagem só permite representar um determinado sistema para condições operacionais predeterminadas.

A partir do entendimento da classificação das abordagens para a obtenção de um modelo matemático, surge uma nova classificação: a dos sistemas para o desenvolvimento de modelos matemáticos. Essa classificação vai ajudar o profissional envolvido no processo a entender as principais diferenças entre os sistemas. A seguir, vamos ver essa classificação em diferentes sistemas.

Sistemas lineares × não lineares

Os sistemas lineares são caracterizados pelos princípios de homogeneidade e superposição. Além disso, nesse tipo de sistema, as derivadas e a variável dependente aparecem com termos de primeiro grau. Ainda, de acordo com Maya e Leonardi (2014), os princípios de superposição devem satisfazer as seguintes duas condições.

1. Considere uma perturbação de entrada $a(t)$ na resposta $f1(t)$ e outra perturbação $b(t)$ na resposta $f2(t)$. Dessa forma, a soma das respostas $f1(t) + f2(t)$ será igual à soma das perturbações $a(t) + b(t)$. Traduzindo esse conceito para notação matemática, tem-se: $f(a + b) = f(a) + f(b)$. Logo, esse é o princípio da superposição.
2. O princípio da homogeneidade está associado à seguinte situação: se aplicarmos uma constante k em uma entrada $a(t)$, teremos que a resposta $y1(t)$ será multiplicada por essa constante ($k \times a(t)$), e a resposta será $k \times y1(t)$, resultando em $y(k \times a) = k \times y(a)$. Tal resultado diz respeito ao princípio da homogeneidade.

Os sistemas não lineares são aqueles que não se aplicam aos princípios da superposição e/ou homogeneidade. Se um desses princípios falhar, o sistema é dito não linear.

Sistemas contínuos × discretos

Quando a relação entre o sinal de interesse e uma variável é descrita de maneira contínua no tempo, esse sistema é classificado como contínuo. Essa relação é, em geral, descrita por meio de equações diferenciais. Por outro lado, conforme indica Aguirre (2007), sistemas discretos são definidos quando a relação entre o sinal de interesse e a variável é expressa em instantes de amostragem.

Sistemas determinísticos × estocásticos

Os modelos determinísticos não consideram a incerteza do sistema, além de relacionarem as variáveis mensuradas de forma exata. Os modelos estocásticos, também chamados de modelos probabilísticos, são aqueles relacionados a variáveis aleatórias, ou seja, trabalham com a incerteza do sistema.

Sistemas estáticos × dinâmicos

Os sistemas estáticos são representados por equações algébricas, são conhecidos como estacionários e não variam no tempo. Os sistemas dinâmicos são expressos por equações diferenciais e apresentam como principal característica as variações das variáveis no tempo. Tais sistemas também são conhecidos como sistemas transientes, uma vez que sua resposta não depende das condições anteriores.

Sistemas de parâmetros concentrados × parâmetros distribuídos

Em sistemas de parâmetros concentrados, as variações espaciais são descartadas. Além disso, são gerados sistemas de equações diferenciais ordinárias. Ainda, em todo o volume do processo, suas propriedades são consideradas homogêneas.

Nos sistemas de parâmetros distribuídos, são consideradas variações espaciais e há mais de uma variável independente. Elas são resolvidas por um sistema de equações diferenciais parciais.

Franco (2021) apresenta um exemplo de modelo matemático baseado em parâmetros concentrados. Trata-se de um tanque de aperfeiçoamento misturado, com expressão dada por:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_i - T) + \frac{Q}{\rho V C p}$$

onde:

- T é a temperatura do fluido;
- F é a vazão volumétrica;
- T_i é a temperatura na entrada;
- Q é o calor adicionado;
- ρ é a densidade do fluido;
- V é o volume do tanque;
- C_p é o calor específico.

Franco (2021) também mostra um exemplo de um modelo matemático com sistema distribuído para um trocador casco-tubo. Nesse caso, é importante observar que a temperatura do líquido apresenta variação ao longo do tempo, como pode ser observado na seguinte equação:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nu \frac{\partial T}{\partial Z} = \frac{\pi d U}{\rho C p A}(T_{st} - T)$$

onde:

- T é a temperatura do fluido;
- v é a velocidade do fluido;
- d é o diâmetro do tubo;
- U é o coeficiente global de troca térmica;
- ρ é a densidade do fluido;
- C_p é o calor específico;
- A é a área da seção transversal do tubo;
- T_{st} é a temperatura no estado estacionário.

Neste capítulo, vimos como é importante entender o conceito de modelagem matemática de processos e conhecer os elementos mais importantes que compõem os modelos. Além disso, conferimos como diferenciar os principais tipos de sistemas usados em modelagem e simulação, com suas vantagens e desvantagens. Estudamos os principais conhecimentos que um engenheiro e sua equipe precisam ter para usar modelos matemáticos que representem problemas reais, ou seja, problemas com dados obtidos por meio de experimentos físicos. Vale destacar que também é importante estar familiarizado com métodos matemáticos e *softwares* específicos para modelagem e simulação de processos.

Referências

AGUIRRE, L. A. *Introdução à Identificação de sistemas*: técnicas lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais. 3. ed. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2007.

BASSANEZI, R. C. Modelagem matemática: uma disciplina emergente nos programas de formação de professores. *Biomatemática*, v. 9, p. 9-22, 1999. Disponível em: http://www.ime.unicamp.br/~biomat/bio9art_1.pdf. Acesso em: 14 nov. 2021.

BEQUETTE, B. W. *Process dynamics*: modeling, analysis, and simulation. New Jersey: Prentice Hall, 1998.

FRANCO, I. C. Modelagem e simulação: processos químicos – notas de aulas inovadoras. *The Journal of Engineering and Exact Sciences – JCEC*, v. 7, n. 4, p. 1-50, 2021. Disponível em: https://periodicos.ufv.br/jcec/article/view/13097/6846. Acesso em: 14 nov. 2021.

LUYBEN, W. L. *Process modeling, simulation, and control for chemical engineers*. New York: The McGraw-Hill, 1996.

MAYA, P. A.; LEONARDI, F. *Controle essencial*. 2. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2014.

OGUNNAIKE, B. A.; RAY, W. H. *Process dynamics, modeling, and control*. New York: Oxford University Press, 1994.

Fique atento

Os *links* para *sites* da *web* fornecidos neste capítulo foram todos testados, e seu funcionamento foi comprovado no momento da publicação do material. No entanto, a rede é extremamente dinâmica; suas páginas estão constantemente mudando de local e conteúdo. Assim, os editores declaram não ter qualquer responsabilidade sobre qualidade, precisão ou integralidade das informações referidas em tais *links*.