

Confrontando Resultados Experimentais e de Simulação

Jorge A. W. Gut

Departamento de Engenharia Química
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
E-mail: jorgewgut@usp.br

Um modelo de simulação é uma representação matemática de um processo real para “simular” o seu comportamento. Na área de engenharia química é muito comum o uso de modelos de simulação de processos químicos para avaliação de desempenho, otimização de condições de operação ou dimensionamento equipamentos. Estas tarefas somente terão sucesso se o modelo conseguir representar com fidelidade (e de uma forma simples) o comportamento do processo.

Por exemplo, para dimensionar uma bomba, é preciso determinar a perda de carga na tubulação. Esta pode ser calculada usando equações de conservação de energia mecânica e de massa, correlações para fator de atrito, tabelas de comprimentos equivalentes para singularidades, correlações para propriedades físicas do fluido e etc. Entretanto, a realidade não é tão comportada quanto gostaríamos e existe um desvio entre o valor calculado da grandeza e aquele medido na prática.

Em diversas ocasiões um engenheiro de processos precisa lidar com dados experimentais coletados na planta e com dados de simulação gerados no computador. Da mesma forma, um estudante de engenharia química também lida com dados experimentais e de simulação em laboratórios didáticos. Em ambas situações, é crucial a etapa de comparação entre resultados e discussão.

Ao comparar resultados experimentais (medidos) e de simulação (calculados, teóricos), você pode confirmar se o modelo matemático proposto consegue representar fielmente o processo. Diferenças entre resultados experimentais e de simulação podem ter diversas fontes. Antes de culpar erros de “leitura” ou de “arredondamento” (que são erros facilmente controláveis e quantificáveis), devemos pensar um pouco mais sobre como os resultados foram obtidos para tentar identificar com maior segurança as possíveis fontes de erro. O objetivo deste texto é então elucidar os passos seguidos na obtenção de “resultados experimentais” e de “resultados de simulação” (ver Figura 1) para auxiliá-lo na tarefa de comparação e discussão.

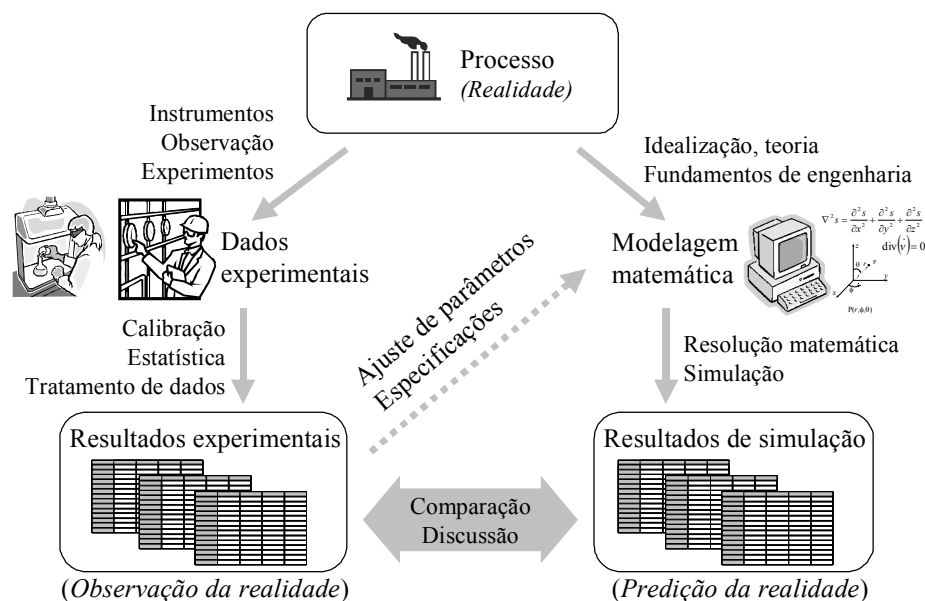


Figura 1: Principais etapas para obtenção de resultados experimentais e de simulação

1) Como são obtidos os resultados experimentais (comportamento observado do processo)?

Dados experimentais são coletados através de instrumentos de medição ou técnicas analíticas que fornecem informações quantitativas ou qualitativas sobre o processo. Estes dados coletados podem ser corrigidos através de equações de calibração dos instrumentos, podem ser processados através de métodos estatísticos (cálculos de média, desvio padrão, etc) e podem ainda ser usados para calcular outras grandezas (tratamento de dados). Gera-se assim o conjunto de resultados experimentais.

Seja desconfiado e questione!

- Quão confiáveis são os dados experimentais coletados? Eles representam fielmente a realidade?
- O instrumento foi calibrado? Há alguma curva de calibração disponível?
- O instrumento ou técnica analítica pode estar interferindo com a grandeza medida? Como?
- A medida fornecida pelo instrumento representa realmente a grandeza que deseja aferir?

Existe um erro experimental entre o valor real de uma grandeza e aquele medido. Este erro pode ser sistemático e/ou aleatório. O erro sistemático se repete a cada medida, prejudicando sua exatidão, e pode ser controlado através da calibração do instrumento. Já o erro aleatório prejudica a precisão da medida e é de difícil controle. Ele pode ser quantificado por métodos estatísticos, como a repetição de uma medida e posterior cálculo do desvio padrão.

Erros de “leitura” só ocorrem quando você tem dificuldade em ler o instrumento. Por exemplo, o medidor está muito afastado, o ponteiro está vibrando, o mostrador está sujo, você se confunde com as divisões da escala, etc.

Não se esqueça que instrumentos têm uma dinâmica de funcionamento. Eles não registram instantaneamente as mudanças que ocorrem no processo. Se as condições do processo variarem mais rapidamente do que o instrumento pode registrá-las, os dados obtidos não serão exatos.

Ao fazer uma medição com um instrumento, a precisão permitida corresponde à metade da menor divisão da escala, por isso o valor numérico deve ser reportado sempre com o número de algarismos significativos permitido. Se for necessário, use notação científica ou mude de unidade (quilo, micro, mega...). Por exemplo, massa $0,2300 \pm 0,0001$ kg pode ser reportada como 230,0 g (quatro algarismos significativos), mas não como 230 g ou 0,23 kg. Lembre disso ao usar planilhas eletrônicas como o Excel, que automaticamente eliminam os zeros finais à direita da vírgula.

Propagação de erros no tratamento de dados

No tratamento de dados, algumas grandezas são calculadas a partir de dados experimentais. Por exemplo, a velocidade de deslocamento v é calculada dividindo-se o comprimento medido ($z \pm \Delta z$) pelo tempo registrado ($t \pm \Delta t$). Ao realizar estes cálculos, lembre-se da propagação dos erros para representar o valor calculado com o número de algarismos significativos correto. De forma geral, ao calcular-se $f = f(x \pm \Delta x, y \pm \Delta y, w \pm \Delta w, \dots)$, o erro (incerteza com 95% de confiança) em f é função dos erros nas outras variáveis de acordo com a lei de propagação de incerteza [1,2,3]:

$$\Delta f^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 \cdot \Delta x^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 \cdot \Delta y^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial w}\right)^2 \cdot \Delta w^2 + \dots$$

que é baseada em uma aproximação de primeira ordem da série de Taylor para f em torno do ponto experimental.

sendo que as derivadas podem ser facilmente aproximadas numericamente usando uma perturbação δx suficientemente pequena em torno do ponto experimental x' :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x'} \cong \frac{f(x'+\delta x) - f(x'-\delta x)}{2 \cdot \delta x}$$

Para o exemplo da velocidade, temos que $v = z/t$. Para $z' = 5,495 \pm 0,003$ m e $t' = 20 \pm 1$ s:

$$v' = 0,27475... \quad \text{e} \quad \Delta v = \sqrt{\left(\frac{1}{t'}\right)^2 \cdot \Delta z^2 + \left(-\frac{z'}{t'^2}\right)^2 \cdot \Delta t^2} = 0,01374...$$

Portanto a velocidade experimental deve ser reportada como $v' = 0,27 \pm 0,01$ m/s ou simplesmente $v' = 0,27$ m/s

Regras simples para propagação de erros:

- Soma e subtração: prevalece a menor precisão. Ex: $0,5310 + 0,2 = 0,7$ (precisão de 0,1).
- Multiplicação e divisão: mantém-se o menor número de algarismos significativos. Ex: $5,495 / 20 = 0,27$ (dois significativos).

Após o tratamento de dados, obtém-se um conjunto de dados (resultados experimentais) que representa o comportamento observado do processo. Como você percebeu, não é possível afirmar que estes são os valores reais das grandezas devido aos erros e incertezas.

2) Como são obtidos os resultados de simulação (comportamento predito do processo)?

O comportamento do processo pode ser representado através de um modelo matemático que tem o objetivo de correlacionar as condições operacionais com as características do processo (equipamentos, dimensões, materiais, etc.) usando a teoria dos fundamentos de engenharia (fenômenos de transporte, cinética química, relações de equilíbrio, etc.) e correlações empíricas.

Para confecção de um modelo de simulação, os fenômenos físicos e químicos do processo são analisados e é feita a sua idealização/teorização, representada através de equações matemáticas. Este modelo matemático normalmente possui parâmetros empíricos que são ajustados usando dados experimentais (ver Figura 1). Por exemplo, coeficientes de troca térmica por convecção são usualmente representados por equações do tipo $Nu = a.Re^b.Pr^c$, onde os parâmetros a , b e c são determinados a partir de dados experimentais. O ajuste destes parâmetros é feito de forma a minimizar as diferenças entre os comportamentos observado e predito do processo.

A simulação é a resolução do modelo matemático para dadas condições do processo. A resolução do sistema de equações só é possível se o número de graus de liberdade for nulo, ou seja, ter o mesmo número de variáveis e equações. Para isso, é necessário especificar algumas variáveis. Geralmente especificam-se as condições de “entrada” do processo para que a simulação forneça uma predição da “saída” ou da “resposta” do processo. Por exemplo, para calcular as temperaturas de saída de um dado trocador de calor, deve-se conhecer as temperaturas de entrada e as vazões de alimentação.

A resolução do modelo matemático pode ser analítica ou numérica. Se métodos numéricos forem usados, existe um erro numérico associado à solução. É possível determinar e controlar este erro através de parâmetros do método, como número de elementos quando há discretização ou o critério de parada quando há iterações.

Lembre-se que ao longo da construção do modelo matemático e da sua resolução são feitas diversas aproximações (ex: a densidade da água é 1 g/cm^3), suposições (ex: a resistência do ar é nula) e/ou hipóteses (ex: o processo é adiabático e a mistura é perfeita). Sempre tenha em mente que este procedimento de idealização afasta o seu modelo da realidade, podendo comprometer os resultados de simulação. Saiba ponderar e avaliar suas decisões e não faça aproximações desnecessárias!

3) Enfim, confrontando resultados

As formas mais comuns de confrontar resultados experimentais e de simulação são através de tabelas e gráficos, onde fique visível o desvio entre valores observados e preditos. O desvio relativo é calculado tendo como base o resultado experimental, ou seja: $desvio\ relativo = |valor_{exper} - valor_{predito}| / valor_{exper}$, assim como no exemplo apresentado na Tabela 1 e na Figura 3. Note que no gráfico da Figura 3, os dados experimentais são representados por pontos discretos e o modelo matemático é representado por uma linha contínua.

Tabela 1: Valores experimentais e de simulação para y

x	y (experim.)	y (simul.)	desvio (%)
1,0	3,3 ± 0,1	3,33	1,3
2,0	2,8 ± 0,1	2,50	11,8
3,0	2,0 ± 0,1	2,00	0,7
4,0	1,8 ± 0,1	1,67	6,6
5,0	1,5 ± 0,1	1,43	6,5
6,0	1,1 ± 0,1	1,25	17,4
7,0	1,1 ± 0,1	1,11	4,8
8,0	0,9 ± 0,1	1,00	16,7
9,0	0,7 ± 0,1	0,91	34,6
10,0	0,8 ± 0,1	0,83	6,1

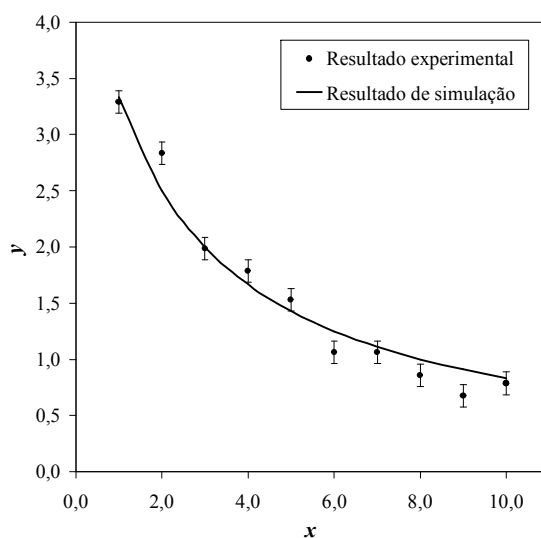


Figura 3: Valores experimentais e de simulação para y

Se a comparação entre resultados experimentais e de simulação não for satisfatória, não culpe o processo, que é a “realidade”. Os desvios tiveram origem em uma ou mais etapas da obtenção dos resultados experimentais e da obtenção dos resultados de simulação. Só analisando todas as etapas é possível identificar as fontes dos desvios.

De uma forma geral, se os desvios entre resultados experimentais e de simulação são altos, podemos afirmar que ou o modelo proposto não representa adequadamente o processo, ou os resultados experimentais diferem dos valores reais das grandezas observadas, ou há algum problema desconhecido no processo como um vazamento, contaminação, ligação incorreta, etc. (este tipo de problema pode ser detectado investigando inconsistências nos resultados experimentais).

Finalmente, é importante saber julgar os desvios obtidos. Não esqueça de se perguntar: o desvio compromete a aplicação prática do modelo de simulação (dimensionamento, controle, otimização, projeto, etc) ou ele é aceitável?

Referências

- 1) ANSI/ASME PTC 19.1, "Measurement Uncertainty, American Society of Mechanical Engineers", NY, 1985
- 2) Abernethy, R.B.; Benedict, R.P.; Dowdell, R.B. "ASME Measurement Uncertainty" J. Fluids Eng, 107, pp. 161-164, 1985.
- 3) Akhnazarova S.; Kafarov, V. "Experiment Optimization in Chemistry and Chemical Engineering" Mir Publishers, 1982.