

## MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR DO TIPO CSTR NÃO ISOTÉRMICO NO SOFTWARE EMSO

Barbara Adriane da Silva Colpo (Universidade La Salle) E-mail: [barbaraacolpo@gmail.com](mailto:barbaraacolpo@gmail.com)  
Janice Botelho Souza Hamm (Universidade La Salle) E-mail: [janice.hamm@unilasalle.edu.br](mailto:janice.hamm@unilasalle.edu.br)  
Fernanda Siqueira Souza (Universidade La Salle) E-mail: [fernanda.souza@unilasalle.edu.br](mailto:fernanda.souza@unilasalle.edu.br)

**Resumo:** Muitos estudos acadêmicos têm sido desenvolvidos com o objetivo de descrever e prever o comportamento dos reatores, tanto no estado estacionário quanto dinâmico. São inúmeras as abordagens aplicadas visando otimizar a qualidade dos processos, entender os fenômenos envolvidos e reduzir custos aliados à produção. O presente trabalho teve como objetivo modelar um reator CSTR através de um estudo de caso baseado na literatura através do software EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*). A utilização da ferramenta EMSO para a modelagem mostrou-se eficiente ao permitir a avaliação do comportamento do reator em algumas situações hipotéticas, simulando a realidade nas indústrias. Além disso, servindo como uma base de aprendizagem para os alunos do curso de Engenharia Química, já que aprendem de forma dinâmica, e são apresentados a uma ferramenta que proporciona rapidez na análise de processos.

**Palavras-chave:** Reator, Modelagem, Simulação.

## MODELING AND SIMULATING A NON-ISOTHERMAL CSTR TYPE REACTOR IN EMSO SOFTWARE

**Abstract:** Many academic studies have been developed in order to describe and predict the behavior of reactors, both stationary and dynamic. There are countless approaches applied in order to optimize the quality of processes, understand the phenomena involved and reduce costs allied to production. The objective of this work was to model a CSTR reactor through a case study based on the literature using the EMSO software (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*). The use of the EMSO tool for modeling proved to be efficient in allowing the evaluation of reactor behavior in some hypothetical situations, simulating the reality in the industries. In addition serving as learning base for the students of the chemical engineering course, as they learn dynamically, and are presented to a tool that provides rapid process analysis.

**Keywords:** Reactor, Modeling, Simulation.

### 1. Introdução

De início, a Engenharia Química avançava baseando-se na experiência prática e artesanal. Com a necessidade de expansão da indústria iniciou-se a busca por processos mais eficientes, seguros e com menores custos (PERLINGEIRO, 2005).

A indústria química moderna no âmbito mundial se desenvolveu fundamentada em duas Indústrias distintas. A primeira criada na Alemanha a partir da metade do século XIX, a qual utilizava o carvão como matéria prima, de pequeno à médio porte, em geral com processo descontínuo. Posteriormente, foi criada na América do Norte a indústria química a partir do petróleo e seus derivados, de grande porte e com processo contínuo (WONGTSCHOWSKI, 2002).

Com a alta demanda de conhecimentos aprofundados em relação à ciência básica e fundamentos para a compreensão de fenômenos no interior dos equipamentos e processos. Os processos tornaram-se mais complexos e sofisticados, a fim de suprir a necessidade das indústrias químicas (PERLINGEIRO, 2005). A seleção do projeto e

operação de plantas industriais deve ser apropriada para cada tipo de processo. De modo geral na parte da pesquisa e desenvolvimento de novos processos, as plantas-piloto são utilizadas para suprir e determinar mecanismos e parâmetros a partir dos resultados obtidos em laboratório (SHREVE & BRINK, 2008).

Os conhecimentos adquiridos ao longo do tempo em conjunto com os avanços da computação trouxeram os softwares para análise, otimização e segurança do processo industrial (SILVA, 2012). A otimização utiliza de métodos específicos para determinar grande parte dos custos efetivos, soluções eficientes para problemas em construções, operação, projetos e análises em diversos processos industriais (EDGAR et al. 2001).

A fim de se obter um ponto ótimo de um determinado sistema, a modelagem e a simulação são ferramentas de grande valia na engenharia como um todo, devido à possibilidade que oferecem em prever condições operacionais ou simular equipamentos, sem interferir no sistema operante (SILVA, 2012). Para a análise de um sistema e seu comportamento em situações adversas, a simulação utiliza de modelos matemáticos com o objetivo de prever diversas configurações comportamentais (PEGDEN et al., 1990).

O reator, vaso projetado onde ocorre à geração do produto, é o coração da indústria química. A escolha adequada do reator tem grande influência na qualidade e quantidade do produto, refletindo na economia de todo o processo. Devido à grande variedade de reações químicas e suas complexas relações, existem diversos tipos de reatores os mais utilizados são: o reator CSTR (Continuous Stirred-Tank Reactor) e o reator PFR (Plug Flow Reactor) (ISENMANN, 2018).

O reator CSTR que têm como principal característica a presença de mistura perfeita no meio reacional, com ausência de variações espaciais de concentração, temperatura ou taxa de reação. Enquanto isso, o reator PFR é caracterizado pelo escoamento empistonado da massa reacional na direção axial do sistema, assumindo mistura perfeita na direção radial, tal que este apresenta variações das propriedades na direção axial (FOGLER, 2009).

Neste contexto, o objetivo do presente trabalho é modelar um reator CSTR, envolvendo balanços de massa e energia, através de um estudo de caso baseado na literatura, utilizando como ferramenta o software EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization). Além disso, diversos cenários foram simulados visando compreender de que forma oscilações nos parâmetros do sistema podem alterar as características e eficiência de produção em uma indústria química, servindo como uma base de estudos para os alunos do curso de Engenharia Química.

## **2. Metodologia**

O presente estudo foi estruturado a partir de 03 etapas: (i) modelagem de estudo de caso em um reator CSTR; (ii) programação e simulação em um software livre de engenharia química; (iii) análise dos resultados e estudos de diferentes cenários. A Figura 1 apresenta a estrutura do trabalho.

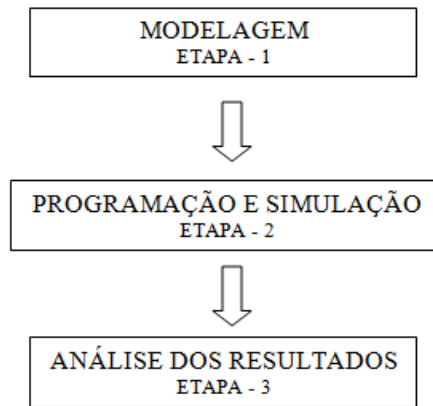


Figura 1 – Fluxograma de estrutura do Estudo de Caso

Fonte: Arquivo pessoal

A Etapa 01 consiste na modelagem, através de balanços de massa e energia, de um estudo de caso de um reator CSTR utilizando os dados baseados em Hill (1937) e Santos et al. (2019). O estudo baseou-se em um reator CSTR não isotérmico com jaqueta, no qual ocorre a reação irreversível de isomerização  $A \rightarrow B$  que obedece a cinética de primeira ordem com constante de velocidade conforme Equação (1). Os parâmetros do reator CSTR do presente estudo de caso são apresentados na Tabela 1.

$$k = 2,61 \times 10^{14} e^{(-14.570/T)} \quad (1)$$

Tabela 1 – Dados de operação do Reator CSTR

Parâmetro	Valor
Coefficiente global de troca térmica ( $U$ )	200.000 cal/m <sup>2</sup> .h.K
Temperatura média da jaqueta ( $T_m$ )	433 K
Fluxo de entrada de A ( $F_{A0}$ )	133,7 kg/h
Calor Específico ( $C_p$ )	500 cal/kg.K
Temperatura Inicial ( $T_0$ )	436 K
Razão entre variação da entalpia pelo coeficiente estequiométrico ( $\Delta H_R/v_A$ ) = $w$	83.000 cal/kg
Concentração Inicial de A ( $C_{A0}$ )	900 kg/m <sup>3</sup>
Conversão de A ( $X_A$ )	0.97
Massa de B ( $m_B$ )	103,56 kg/h
Tempo ( $t$ )	7000 h/ano
Densidade ( $\rho$ )	0,9 g/cm <sup>3</sup>

Fonte: adaptado de Hill (1937)

De acordo com os dados apresentados na Tabela 1, realizou-se os balanços de massa e energia para a modelagem do reator CSTR. A partir das equações obtidas, a Etapa 2 consistiu na utilização e programação do software EMSO, utilizando a linguagem do programa.

O EMSO é um programa brasileiro desenvolvido a partir do trabalho de SOARES (2003), através do projeto realizado pelo Ambiente Livre para Simulação, Otimização e Controle de Processos (ALSOC) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), que objetivou apresentar um novo simulador para processos estacionários e transientes. O uso do simulador não possui custos para fins didáticos de instituições de ensino, podendo então ser utilizado livremente para os fins deste trabalho.

Este software realiza a verificação da consistência das unidades de medida, da resolubilidade do sistema de equações e das condições iniciais. As três entidades principais dessa linguagem de modelagem são: descrições matemáticas de um tipo de equipamento (Model), equipamento é uma instância de um modelo (Device) e o fluxograma representa o processo a ser analisado (FlowSheet) (SOARES; SECCHI, 2003). A Figura 2 apresenta o ambiente de desenvolvimento de modelos no EMSO.

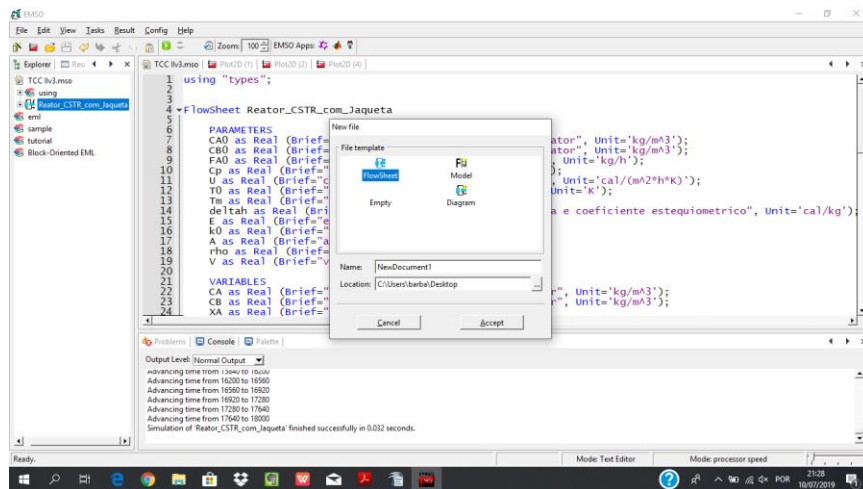


Figura 2 - Layout EMSO

Fonte: Arquivo pessoal

A Etapa 3 teve como objetivo analisar os resultados obtidos e avaliar diferentes cenários visando compreender de que forma oscilações nos parâmetros do sistema podem alterar as características e eficiência de produção no reator CSTR estudado no presente trabalho. Foram realizadas variações no volume do reator ( $0,4\text{m}^3$ ,  $0,6\text{m}^3$ ,  $0,8\text{m}^3$ , e  $1,0\text{m}^3$ ) e na temperatura da jaqueta (433K, 440K, 443K e 450K) visando avaliar a maior conversão minimizando os possíveis custos envolvidos no processo. Além disso, comparações com outros trabalhos publicadas na literatura foram realizadas.

### 3. Resultados e Discussão

De acordo com o estudo de caso, a Figura 3 apresenta o volume de controle (VC) considerado para os cálculos do balanço de massa e de energia.

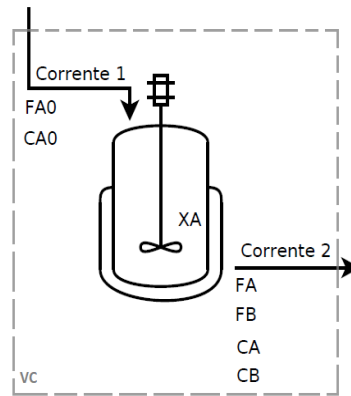


Figura 3 – Volume do controle do Reator CSTR

### 3.1 Etapa 1: Balanço de Massa e Energia

Observa-se a partir da Figura 3, que o reator analisado apresenta uma corrente de entrada e uma corrente de saída, determinando que o balanço de massa possa ser representado conforme a Equação (2).

$$\text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Geração} = \text{Acúmulo}$$

$$F_{A0} - F_A + G = \frac{dN}{dt} \quad (2)$$

Como todas as variáveis do sistema são uniformes em relação ao volume, a velocidade de geração será o produto do volume de reação e a velocidade da reação como mostra a Equação (3).

$$G = r_A V \quad (3)$$

Apontado que este estudo segue a Lei da velocidade da reação de 1ª ordem na qual  $C_A$  é a concentração molar do reagente e  $C_B$  a concentração molar do produto.  $-r_A$  pode ser expressa em função de  $X_A$  como observa-se na Equação (4) (BADINO JUNIOR & CRUZ, 2013).

$$-r_A = k C_A = k C_{A0}(1 - X_A) \quad (4)$$

As equações de concentração do reagente  $C_A$  e produto  $C_B$  estão representadas nas Equações (5) e (6), levando em consideração a estequiometria das substâncias em fase líquida.

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A) \quad (5)$$

$$C_B = C_{A0} \left( \frac{C_{B0}}{C_{A0}} + \frac{b}{a} X_A \right) \quad (6)$$

De acordo com o balanço de massa da Equação (2), observando a substâncias envolvidas e suas características físico-químicas como a densidade ( $\rho$ ) e rearranjando as variável obtêm-se as Equações de taxa de primeira ordem (7) e (8).

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_{A0}}{\rho V} (C_{A0} - C_A) - k C_A \quad (7)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{F_{A0}}{\rho V} (C_{B0} - C_B) + k C_A \quad (8)$$

A partir do tempo espacial, que é necessário para processar certo volume de matéria, e baseando-se nas condições de entrada do reagente CA, a Equação (9) que determina o volume do reator CSTR é alcançada (LEVENSPIEL, 2000).

$$V_R = \frac{F_{A0} X_A}{(k C_{A0} (1 - X_A))} \quad (9)$$

Em relação ao balanço de energia, considerando que a reação em estudo é exotérmica e o processo é contínuo, o sistema pode ser considerado aberto de acordo com a Equação (10) na qual a variação da energia com o tempo (dE/dt) pode ser expressa em função da entalpia (h), velocidades de entrada e saída (v), aceleração da gravidade (g<sub>c</sub>), altura do deslocamento (Z), fluxo mássico (ṁ), fluxo de calor (Q̇), do trabalho (Ẃ) e calor da reação (Q<sub>R</sub>).

$$Acúmulo = \sum Energia_{entrada} - \sum Energia_{saída} \pm Energia_{Transferida} \pm Reação Química \quad (10)$$

$$\frac{dE}{dt} = \sum (h_e + \frac{v_e^2}{2g_c} + \frac{g}{g_c} Z_e) \dot{m}_e - \sum (h_s + \frac{v_s^2}{2g_c} + \frac{g}{g_c} Z_s) \dot{m}_s + Q \dot{W} Q_R$$

Considerando desprezível a energia cinética, a energia potencial e o trabalho, referentes ao escoamento, quando comparados ao calor de reação, a equação pode ser simplificada conforme Equação (11).

$$\frac{dH}{dt} = \sum h_e \dot{m}_e - \sum h_s \dot{m}_s + Q \dot{Q}_R \quad (11)$$

Outra consideração realizada no presente trabalho é que Cp é constante, podendo ser expresso conforme Equação (12).

$$H = \int C_p dT = C_p (T - T_{ref}) \quad (12)$$

Substituindo a Equação (12) na (11) e rearranjando os termos concebe-se a Equação (13).

$$\frac{dT}{dt} = \dot{m} (T_e - T) + \frac{Q}{C_p} + \frac{Q_R}{C_p} \quad (13)$$

A taxa de calor transferido para o sistema de troca térmica é expressa pela Equação (14), que é relacionada ao coeficiente de transferência de calor global (U), a área de contato de troca térmica (A) e a diferença entre as temperaturas da jaqueta (T<sub>m</sub>) e a de operação do reator. O calor de reação é expresso pela Equação (15).

$$\dot{Q} = UA (T_m - T) \quad (14)$$

$$\dot{Q}_R = \Delta V k C_A \quad (15)$$

## 3.2 Etapa 2: Simulação no software EMSO

A fim de alcançar os objetivos propostos deste estudo, foi utilizado o software EMSO e seu ambiente de desenvolvimento de modelos. Para a programação do modelo matemático no EMSO é necessário declarar os parâmetros, variáveis, as equações diferenciais, bem como suas condições iniciais. Na Figura 4 tem-se a programação e modelagem matemática no EMSO com base no balanço de massa e energia.

```

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 deltax 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;
46
47 QEXT=U*(A)*(Tm-T);
48
49
50 SET
51 CA0=900*'kg/m^3';
52 CB0=0*'kg/m^3';
53 FA0=133.700*'kg/h';
54 Cp=500*'cal/(g*K)';
55 U=20000*'cal/(m^2*h*K)';
56 Tm=433*'K';
57 A=21.91*'m^2';
58 deltax=83000*'cal/kg';
59 E=14570*'K';
60 k0=2.26*10^14*'1/h';
61 rho = 0.9*'g/cm^3';
62 T0=436*'K';
63 V= 3.6*'m^3';
64
65 INITIAL
66 CA=900*'kg/m^3';
67 CB=0*'kg/m^3';
68 T=433*'K';
69
70 OPTIONS
71 TimeStart=0;
72 TimeStep=0.1;
73 TimeEnd=4;
74 TimeUnit='h';
75
76 end

```

Problems | Console | Palette

Output Level: Normal Output

Simulation of Reator\_CSTR\_com\_Jaqueta started ...  
 Number of variables: 7  
 Number of equations: 7  
 Number of specifications: 0  
 Degrees of freedom: 0  
 Structural differential index: 1  
 Extra Equations: 4

Figura 4 – Programação do presente estudo no Software EMSO

Fonte: Arquivo pessoal

3.3 Etapa 3: Análise dos resultados de diferentes cenários

A análise inicial se deu através dos parâmetros apresentados na Tabela 1, variando somente o volume do reator a fim de obter uma conversão igual a 97%. Pode-se verificar através da Figura 5 que todos os volumes estipulados atingiram um conversão de 100% em aproximadamente 12min, após alguns minutos os reatores com volume de  $0,4\text{m}^3$  e  $0,6\text{m}^3$  atingem o equilíbrio do processo com uma conversão inferior a 92%.

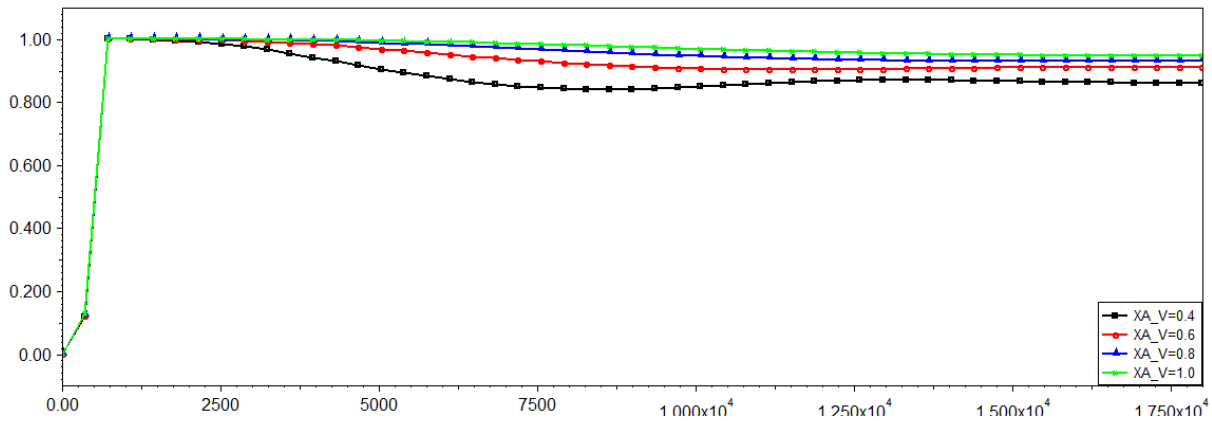


Figura 5 - Curva de conversão de  $X_A$  em função do tempo (s)

Fonte: Arquivo pessoal

Nas curvas de temperatura apresentadas na Figura 6, verifica-se que quanto menor o volume do reator, mais brusca será a queda da temperatura. A transferência de calor da reação para as paredes do reator causa diferenças entre as dinâmicas de reatores de diferentes volumes, podendo assim gerar oscilações no sistema operacional (MCAULEY et al., 1995).

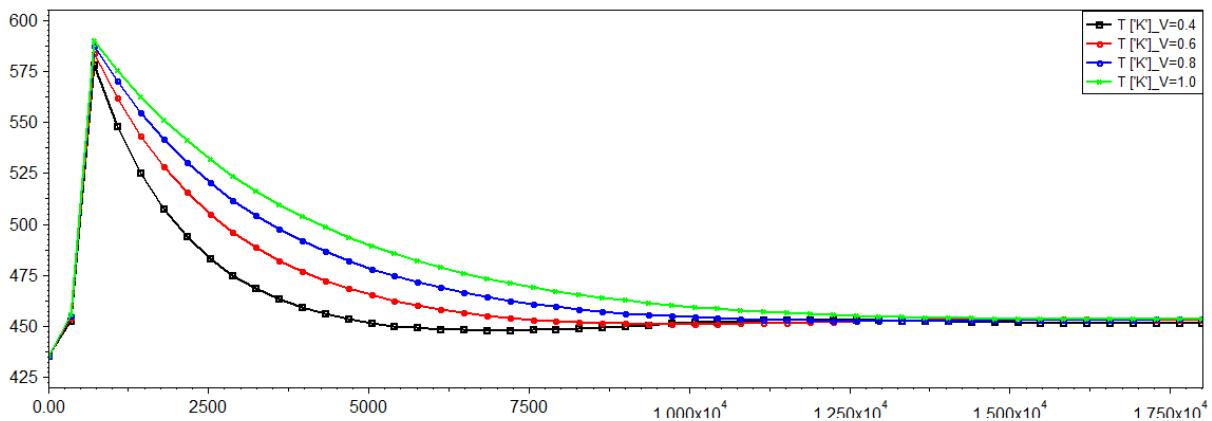


Figura 6 - Curva de temperatura em função do tempo (s)

Fonte: Arquivo pessoal

A fim de se obter a conversão desejada com um reator de menor volume, refletindo na diminuição de custos e espaço da planta química, optou-se por um reator com volume igual a  $0,4\text{m}^3$  a diferentes temperaturas ( $T_m$ ) com o propósito de se obter a conversão desejada e parâmetros mais consistentes em relação às concentrações  $C_A$  e  $C_B$ . Em análise as curvas de conversão da Figura 7, observa-se quanto maior a temperatura, menor será a oscilação no sistema e atinge-se a conversão desejada com uma temperatura de 450K na jaqueta do reator, abaixo desta temperatura não será obtida a conversão de 97%.



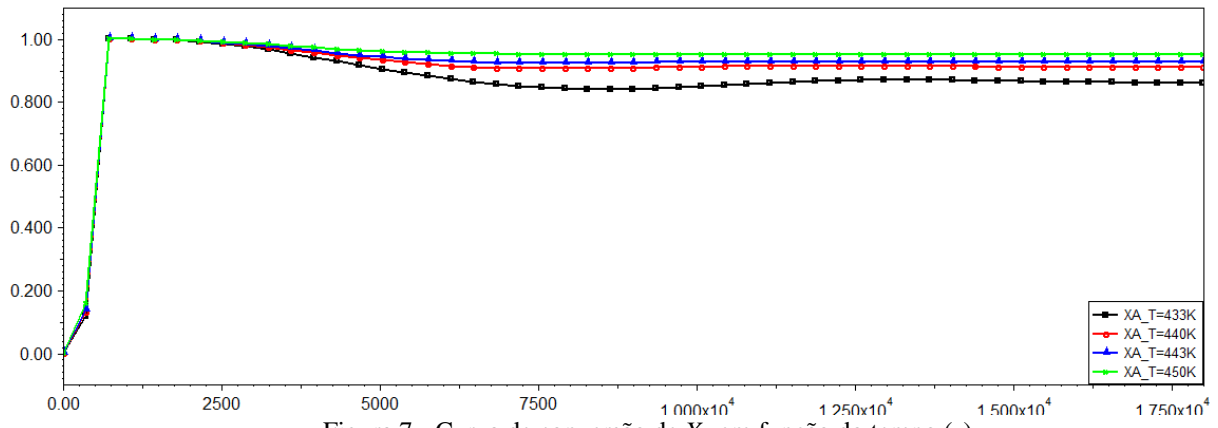


Figura 7 - Curva de conversão de  $X_A$  em função do tempo (s)

Fonte: Arquivo pessoal

A Figura 8 apresenta as curvas de temperatura do reator com  $V = 0,4m^3$  com variação na temperatura da jaqueta, observa-se que a temperatura de 450K atinge o estado estacionário em aproximadamente 1 hora e 30 minutos e a temperatura de saída do reator permanece em torno de 475K.

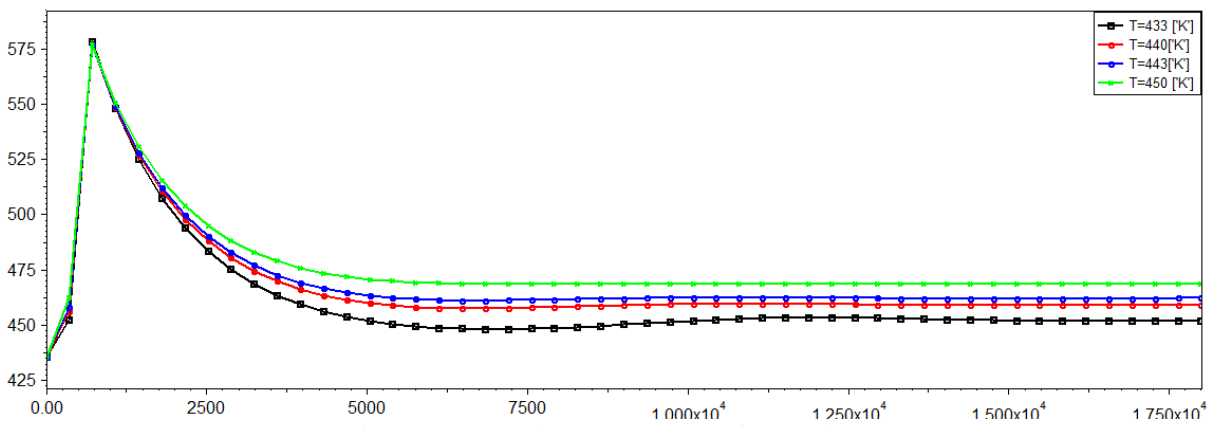
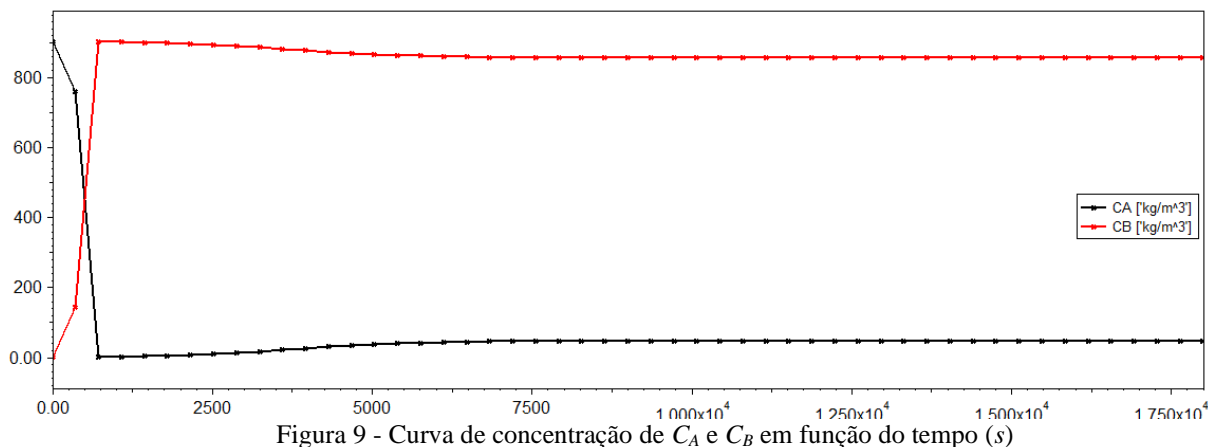


Figura 8 - Curva de temperatura em função do tempo (s)

Fonte: Arquivo pessoal

Nas curvas da variação de  $C_A$  e  $C_B$  observa-se, a partir da Figura 9 que, por se tratar de uma reação do tipo  $A \rightarrow B$ , a concentração do reagente diminui ao longo do tempo e, conseqüentemente, há o aumento da concentração de produto B até atingir o estado estacionário.

Figura 9 - Curva de concentração de  $C_A$  e  $C_B$  em função do tempo (s)

Fonte: Arquivo pessoal

Em estudo realizado por Santos et al. (2019) com os mesmos parâmetros da Tabela 1 em um reator PFR, no qual a modelagem matemática e simulação foram realizadas no Solver do software Microsoft® Excel 8, o reator PFR atingiu uma conversão de aproximadamente 97% com o volume de  $0,6\text{m}^3$ . Desta forma, considerando-se apenas o volume fundamentado nos parâmetros iniciais tanto o reator PFR ( $0,6\text{m}^3$ ) quanto o reator CSTR ( $0,8\text{m}^3$ ) atendem ao estudo de caso.

#### 4. Conclusão

O objetivo do presente trabalho foi modelar um reator CSTR, envolvendo balanços de massa e energia, através de um estudo de caso baseado na literatura, utilizando o software EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization). A partir dos resultados, conclui-se que é possível prever o comportamento dinâmico de um reator CSTR, servindo como ferramenta interessante para o estudo de reatores visando compreender fenômenos que ocorrem na realidade das indústrias químicas.

Através dos cenários realizados observou-se melhorias nos parâmetros do reator como a conversão de aproximadamente 98% a um volume de  $0,4\text{m}^3$ , temperatura de 450K, o processo produtivo atinge o estado estacionário em aproximadamente 12 minutos e não apresenta oscilações significativas no sistema. Por se tratar de uma reação com um único composto, o que dificilmente ocorre na indústria, devendo em estudos posteriores a modelagem de simulação com reações com múltiplos compostos.

#### Referências

- BADINO JÚNIOR, A.C.; CRUZ, A.J.G.. *Fundamentos de balanços de massa e energia: um texto básico para análise de processos químicos*. 2. ed., rev. e ampl. São Carlos, SP: Ed. da UFSCar, 2013.
- EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. *Optimization of chemical processes*. 2nd ed. New York: McGraw-Hill, 2001.
- FOGLER, H. S. *Elementos de engenharia das reações químicas*. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.
- HILL, C. G.; ROOT, T. H.; *An introduction to chemical engineering kinetic & reactor design*. 1. ed., John Wiley & Sons: Nova Jersey, 2014.
- ISENMANN, A. F. *Reatores e reações químicas em escala industrial*. 1. Ed. Minas Gerais: Timóteo, 2018.
- LEVENSPIEL, O. *Engenharia das reações químicas*. São Paulo: Blucher, 2000.

**PEGDEN, C. D.; SHANNON, R. E.; SADOWSKI, R. P.** *Introduction to simulation using SIMAN*. New York: McGraw-Hill, 1990.

**MCAULEY, K. B., MACDONALD, D. A. e MCLELLAN, P. J.** *Effects of operating conditions on stability of gas-phase polyethylene reactors*. *AIChE Journal* 41 (4), 868-879 (1995)

**PERLINGEIRO, C. A. G.** *Engenharia de processos: análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos*. São Paulo: Blucher, 2005.

**SANTOS, S. B. F.; DAMASCENO, D. O.; SILVA, L. N.; LIMA, J. S.; SOUSA, C. F.; MOITINHO, J. A. D.; OLIVEIRA, L. G.** *Modelagem de um Reator Químico do Tipo PFR não Isotérmico com Jaqueta como Instrumento Didático no Ensino de Engenharia Química: Um Estudo de Caso*. *Revista Virtual de Química*, v. 11, n.1, p. 50-59, janeiro-fevereiro 2019.

**SHREVE, R. N.; BRINK, J. A.** *Indústrias de processos químicos*. 4. ed. São Paulo: 2008.

**SILVA, J. L.** *Modelagem e simulação de reatores autoclave para produção de PEBD*. 2012. *Dissertação (Mestrado em Engenharia, Programa De Pós-Graduação Em Engenharia Química na área de Concentração: Modelagem e Simulação de Processos) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.*

**SOARES, R. D. P.; SECCHI, A.** *EMSO: A New Environment for Modelling, Simulation and Optimisation*. *Comput. Aided Chem. Eng.*, Elsevier, v. 14, p. 947-952, 2003.

**WONGTSCHOWSKI, P.** *Indústria química: riscos e oportunidades*. 2. ed., rev. e ampl. São Paulo: Blucher, 2002.