ENSINO DE ENGENHARIA: EMPREENDER E PRESERVAR
Anais do XXXIV COBENGE. Passo Fundo: Ed. Universidade de Passo Fundo, Setembro de 2006.
ISBN 85-7515-371-4

SOFTWARES CIENTÍFICOS E DE ENGENHARIA: LIVRES *versus* PROPRIETÁRIOS

Paulo E. Polon – pauloep@deq.uem.br
Cid M. G. Andrade - cid@deq.uem.br
Paulo R. Paraíso - paulo@deq.uem.br
Luiz M. de M. Jorge- lmmj@deq.uem.br
Universidade Estadual de Maringá – Departamento de Engenharia Química
Av. Colombo 5790
87020-900 – Maringá - PR

Resumo: *A utilização de ferramentas computacionais em auxílio na resolução de problemas matemáticos tem grande apelo no ensino de engenharia. Existem softwares com ênfase em cálculos e soluções numéricas no mercado. Uma alternativa aos softwares proprietários são os softwares livres. O termo software livre refere-se à liberdade do usuário: rodar, copiar, distribuir, estudar, alterar e melhorar o software. O objetivo deste trabalho é introduzir o conceito de software livre, e mostrar alguns softwares livres para aplicações científicas e de engenharia comparando-os com similares proprietários. Os softwares focalizados são: as planilhas de cálculo Gnumeric versus Excel, o software de manipulação simbólica Maxima versus Maple, o software de manipulação numérica Octave versus Matlab. Para cada comparação, nós usamos um problema simples de engenharia. As planilhas são utilizadas na resolução de problema de programação linear, os softwares de manipulação simbólica são usados para resolver equações diferenciais analiticamente, o os softwares de análise numérica para a resolução numérica de equação diferencial. A comparação é feita levando em conta: a facilidade de uso, a qualidade de apresentação dos resultados e o tempo de execução. Os softwares apresentam, para os casos analisados, desempenhos muito próximos com pequenas vantagens para os proprietários.*

Palavras-chave: *software livre, planilhas de cálculo, matemática simbólica, manipulação numérica, software proprietário.*

1. INTRODUÇÃO

O uso de ferramentas computacionais em ciência e engenharia cresceu muito com o aumento da velocidade de processamento dos computadores, a diminuição relativa dos seus preços e o aparecimento de pacotes (ou aplicativos) para usos específicos ou gerais. Os softwares podem ser proprietários ou livres, para o uso do primeiro temos que pagar a licença, e o segundo não. Ambos podem ser de código (linguagem de programação) aberto ou fechado, ele é aberto quando o usuário tem acesso a ele podendo inclusive modificá-lo, quando não, ele esta encapsulado, ou oculto, e o usuário não tem acesso a ele, Andrade (2004).

Os programas de código aberto (open source software) de livre distribuição (free software) caracterizam-se por terem os seguintes graus de liberdade: execução, copiar, distribuir, estudar, modificar e aperfeiçoar. A utilização de aplicativos científicos de livre distribuição ainda é muito modesta em vários seguimentos da comunidade científica, Domingues e Mendes Junior (2002).

Para que a comunidade científica possa decidir dentro, de suas especificidades, qual a melhor opção ela precisa conhecer as opções existentes. Assim, o objetivo deste trabalho mostrar que existem opções de softwares livres "similares" a softwares proprietários.

Os programas a serem abordados neste trabalho, num enfoque ilustrativo e introdutório são: a planilha eletrônica proprietária Excel *versus* o software livre Gnumeric; o software proprietário de manipulação matemática simbólica Maple *versus* o software livre Máxima; o software proprietário de manipulação numérica Matlab *versus* software livre Ocatave.

Para cada comparação, nós usamos um problema simples de engenharia. As planilhas são utilizadas na resolução de problema de programação linear, os softwares de manipulação simbólica são usados para resolver equações diferenciais analiticamente, o os softwares de análise numérica para a resolução numérica de equação diferencial. A comparação é feita levando em conta: a facilidade de uso, a qualidade de apresentação dos resultados e o tempo de execução.

2. GNUMERIC *versus* EXCEL

Para a comparação do uso das planilhas eletrônicas Gnumeric e Excel utilizaremos um problemas de otimização, via programação linear.

A planilha proprietária Excel vem com o Office da Microsoft, e a planilha Gnumeric, é um software livre GNU (GNU *is not* UNIX) sob licença GPL (*General Public License*), disponível em **www.gnome.org/projects/gnumeric.**

O exemplo considerado foi tomado de Edgar et al. (2002), e considera uma versão muito simples de uma refinaria. A Figura 1 é uma representação esquemática da entrada de matéria-prima e saída de produtos de uma refinaria. A Tabela 1 lista as informações sobre os produtos esperados dos quatro tipos de óleo bruto quando processados pela refinaria. Note que a distribuição da refinaria é completamente diferente para os quatro tipo óleo bruto. A refinaria é agregada em dois processos: uma corrente de combustível e uma corrente de lubrificante. A tabela 1 também mostra a previsão dos limites superiores sobre os mercados estabelecidos para os vários produtos em termos da produção máxima permitida semanalmente.

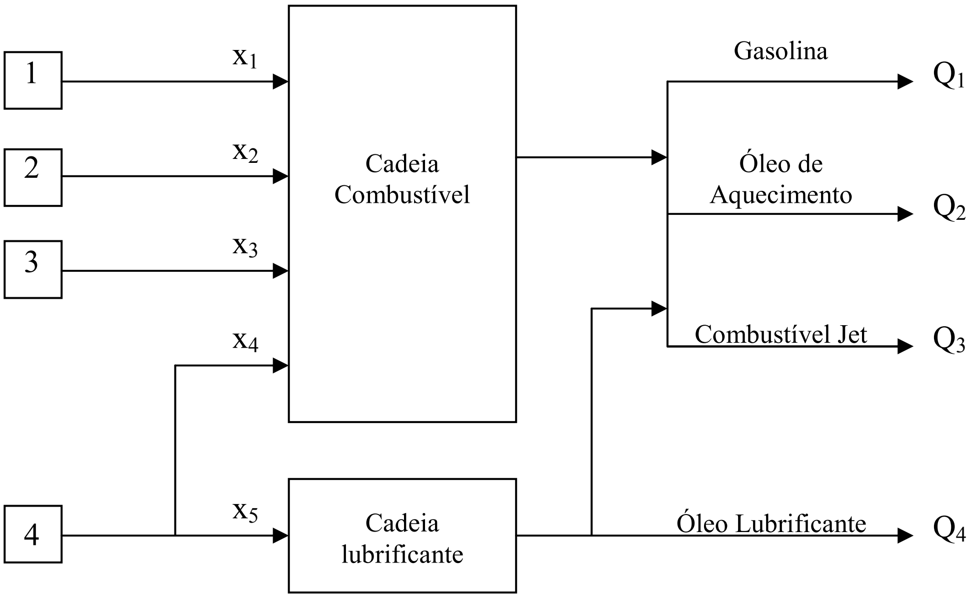


Figura 1 - Esquema da Operação de Processamento.

Tabela 1 - Dados da Refinaria.

	Crus	Cadeia Combustível 1 (x_1)	2 (x_2)	3 (x_3)	4 (x_4)	Cadeia Lubrificante 5 (x_5)	Valor do produto [preço de venda ($/bbl)]	Demanda máxima (10^3bbl/wk)
Produção de Produtos (bbl/bbl dru)								
Produtos								
Gasolina	(P_1)	0,6	0,5	0,3	0,4	0,4	45,00	170
Óleo de aquecimento	(P_2)	0,2	0,2	0,3	0,3	0,1	30,00	85
Combustível Jet	(P_3)	0,1	0,2	0,3	0,2	0,2	15,00	85
Óleo Lubrificante	(P_4)	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	60,00	20
Perdas operacionasi		0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	-	-
Custo do óleo cru ($/bbl)		15,00	15,00	15,00	25,00	25,00		
Custo de Operação ($/bbl)		5,00	8,50	7,50	3,00	2,50		
Fornecimento disponível de óleo cru (10^3bbl/wk)		100	100	100	200			

O problema completo declarado é:

Maximizar:

$$\sum v_p Q_p - \sum C_c x_c \tag{1}$$

Sujeito a:

$$x_1 \le S_1 \tag{2}$$

$$x_2 \le S_2 \tag{3}$$

$$x_3 \le S_3 \tag{4}$$

$$x_4 + x_5 \le S_4 \tag{5}$$

$$Q_p \le D_p \qquad (p = 1,...,4) \tag{6}$$

$$Q_p = a_{p1}x_1 + a_{p2}x_2 + a_{p3}x_3 + a_{p4}x_4 + a_{p5}x_5 \qquad (p = 1,...,4) \tag{7}$$

$$Q_p \ge 0 \qquad (p = 1,...,4) \tag{8}$$

$$x_c \ge 0 \qquad c(p = 1,...,5) \tag{9}$$

Sendo:
Q_p: quantidade de produção do produto p
v_p : valor do produto p
C_c : custo de operação do óleo bruto c (soma do custo do óleo bruto e do custo de operação)
x_c : quantidade de óleo bruto c
a_{pc} : rendimento do produto p do óleo bruto c
S_c : disponibilidade de fornecimento de óleo bruto c

A solução ótima obtida usando ambas planilhas; os fluxos ótimos são 100, 100. 66,667, e 100 kbbl/wk, respectivamente, de crus 1, 2, 3 e 4 e são produzidos 170, 70, 170, e 20 kbbl/wk, respectivamente, de gasolina, óleo de aquecimento, combustível jet, e óleo lubrificante. Todo o cru 4 é usado na cadeia de lubrificante. O lucro máximo obtido é 3.400 k$/wk.

A vantagem do Gnumeric é que os relatórios apresentados pelo solver é mais completo pois além dos relatórios de resposta, de sensibilidade e de limite, iguais do Excel, também apresenta dois relatórios complementares, que são: relatório de desempenho e relatório do modelo.

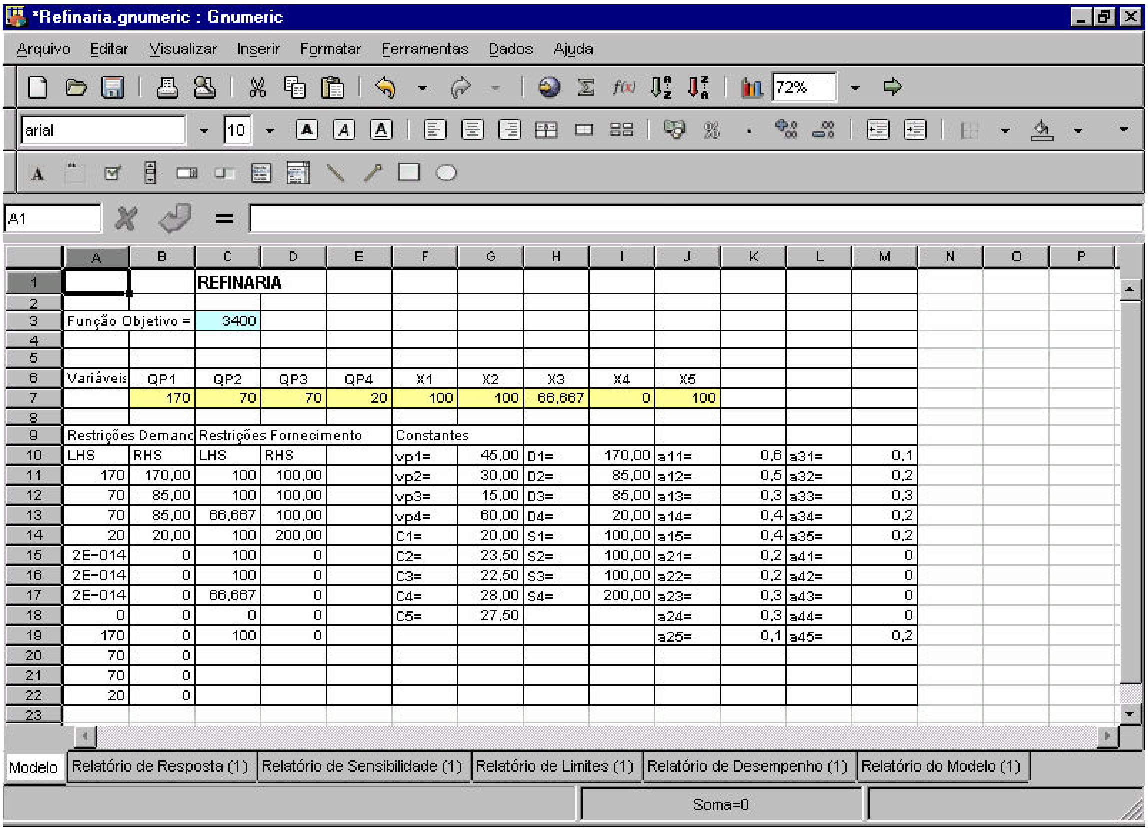
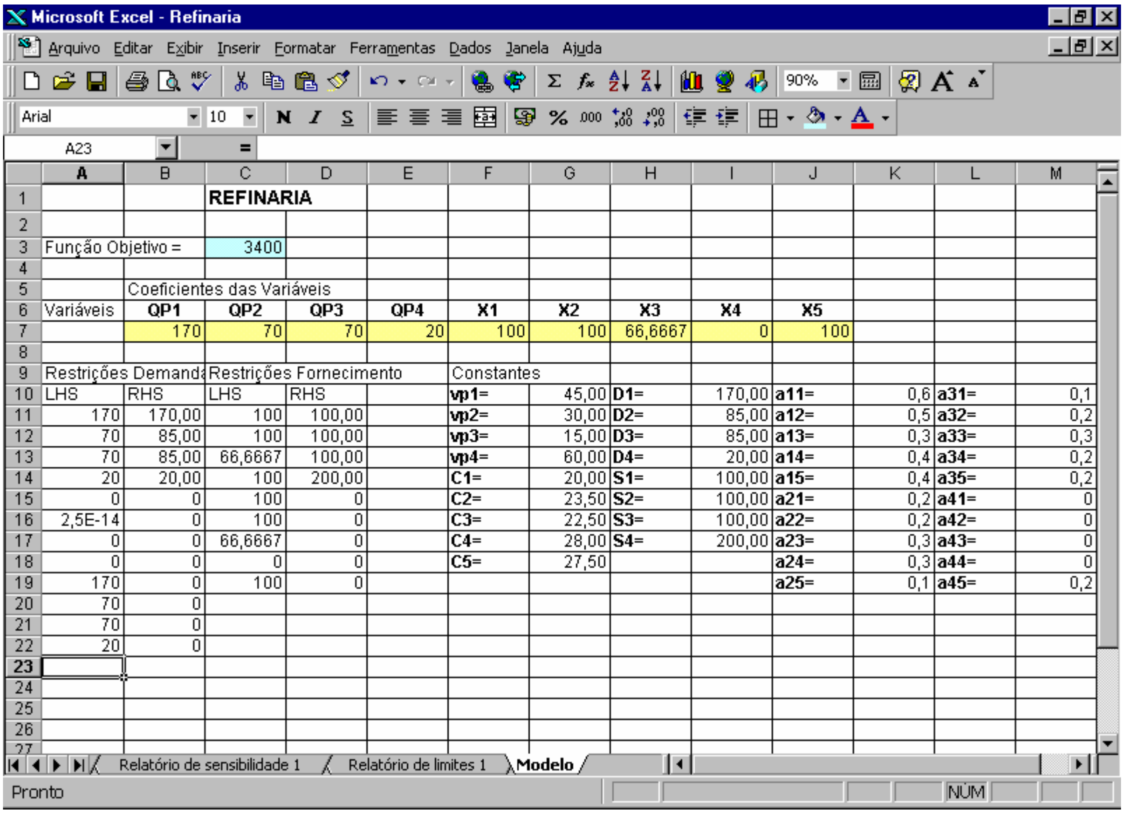


Figura 3 - Planilha Gnumeric.



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1			REFINARIA										
2													
3	Função Objetivo =		3400										
4													
5		Coeficientes das Variáveis											
6	Variáveis	QP1	QP2	QP3	QP4	X1	X2	X3	X4	X5			
7		170	70	70	20	100	100	66,6667	0	100			
8													
9	Restrições Demanda		Restrições Fornecimento			Constantes							
10	LHS	RHS	LHS	RHS		vp1=	45,00	D1=	170,00	a11=	0,6	a31=	0,1
11	170	170,00	100	100,00		vp2=	30,00	D2=	85,00	a12=	0,5	a32=	0,2
12	70	85,00	100	100,00		vp3=	15,00	D3=	85,00	a13=	0,3	a33=	0,3
13	70	85,00	66,6667	100,00		vp4=	60,00	D4=	20,00	a14=	0,4	a34=	0,2
14	20	20,00	100	200,00		C1=	20,00	S1=	100,00	a15=	0,4	a35=	0,2
15	0	0	100	0		C2=	23,50	S2=	100,00	a21=	0,2	a41=	0
16	2,5E-14	0	100	0		C3=	22,50	S3=	100,00	a22=	0,2	a42=	0
17	0	0	66,6667	0		C4=	28,00	S4=	200,00	a23=	0,3	a43=	0
18	0	0	0	0		C5=	27,50			a24=	0,3	a44=	0
19	170	0	100	0						a25=	0,1	a45=	0,2
20	70	0											
21	70	0											
22	20	0											

Figura 4 – Planilha Excel.

A resolução para ambas as planilhas foi simples, tendo a Gnumeric relatórios mais completos, a qualidade na apresentação se equivalem e o tempo de programação, por tratar de problema muito simples não pode ser quantificado, e foram muito próximos.

3. MAPLE *versus* MAXIMA

O Maxima é um software livre, GNU/GPL, para lidar com sistemas algébricos. Ele está baseado na implementação original do Macsyma, do MIT (Massachusetts Institute Technology), que deu origem também aos programas proprietários como o Maple, o Mathematica e o Derive. O Máxima pode ser obtido em: http://maxima.sourceforge.net/.

Aqui pretende-se resolver a Equação Diferencial Ordinária (EDO), com as condições iniciais:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2y}{dx^2} + y = 4x \\ y(0) = 1 \\ \dfrac{dy}{dx}(0) = 3 \end{cases} \tag{10}$$

Resolução por meio do Maple:

```
> eq:=diff(y(x),x,x)+y(x)=4*x;
```

$$eq := \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\mathrm{y}(x)\right) + \mathrm{y}(x) = 4\,x$$

```
> dsolve(eq,y(x));
```

$$\mathrm{y}(x) = \sin(x)\ \_C2 + \cos(x)\ \_C1 + 4\,x$$

```
> sol:=dsolve({eq,D(y)(0)=3,y(0)=1},y(x));
```

$$sol := \mathrm{y}(x) = -\sin(x) + \cos(x) + 4\,x$$

Figura 5 - Na área de trabalho do Maple.

No Maxima:

```
(%i1) eqn: 'diff(y,x,2)+y=4*x;
                                   2
                                 d y
(%o1)                            --- + y = 4 x
                                   2
                                 dx
(%i2) sol:ode2(eqn,y,x);
(%o2)             y = %k1 sin(x) + %k2 cos(x) + 4 x
(%i3) ic2(sol,x=0,y=1,diff(y,x)=3);
(%o3)                y = - sin(x) + cos(x) + 4 x
```

Figura 6 - Na área de trabalho do Máxima.

Para esta situação a apresentação do Maple é bem melhor, a velocidade de processamento também são muito próximas, devido ao pequeno porte do problema, e o uso do Maple pareceu-nos mais "natural".

4. MATLAB *versus* OCTAVE

Para a comparação do software de manipulação numérica Matlab, com o software livre Octave, GNU/GPL, disponível em: http://www.octave.org/. Resolvermos um problema de engenharia das reações químicas, que origina um sistema de equações diferenciais ordinárias.

Exemplo 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)*.

$$A + B \rightarrow C$$

Etileno e oxigênio são alimentados em proporções estequiométricas a um reator de leito fixo, operando isotermicamente a 260ºC. 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 $3\text{x}10^{-4}$ 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/ft^3 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 260ºC.
Equacionamento:

Balanço molar diferencial: $F_{A0}\dfrac{dX}{dW} = -r_A^{'}$ (11)

Lei da velocidade: $-r_A^{'} = kP_A^{1/3}P_B^{2/3} = k(C_A RT)^{1/3}(C_B RT)^{2/3} = kRTC_A^{1/3}C_B^{2/3}$ (12)

Estequiometria: Fase gasosa, isotérmico, $v = v_0(1+\varepsilon X)(P_0/P)$ (13)

$$C_A = \frac{F_A}{v} = \frac{C_{A0}(1-X)}{1+\varepsilon X}\left(\frac{P}{P_0}\right) \tag{14}$$

$$C_B = \frac{F_B}{v} = \frac{C_{A0}(\Theta_B - X/2)}{1+\varepsilon X}\left(\frac{P}{P_0}\right) \tag{15}$$

Combinando a lei da velocidade e as concentrações:

$$-r_A^{'} = kRT_0\left[\frac{C_{A0}(1-X)}{1+\varepsilon X}\left(\frac{P}{P_0}\right)\right]^{1/3}\cdot\left[\frac{C_{A0}(\Theta_B - X/2)}{1+\varepsilon X}\left(\frac{P}{P_0}\right)\right]^{2/3} = \tag{16}$$
$$= \frac{kC_{A0}RT_0}{1+\varepsilon X}\left(\frac{P}{P_0}\right)(1-X)^{1/3}\left(\Theta_B - \frac{X}{2}\right)^{2/3}$$

Para a alimentação estequiométrica, $\Theta_B = 1/2$, então:

$$-r_A^{'} = kP_{A0}\frac{(1-X)^{1/3}(1/2 - x/2)^{2/3}}{1+\varepsilon X}\left(\frac{P}{P_0}\right) = k^{'}\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)\frac{P}{P_0} \tag{17}$$

onde: $k^{'} = kP_{A0}(1/2)^{2/3} = 0.63kP_{A0}$.
Combinando a primeira equação com esta última:

$$F_{A0}\frac{dX}{dW} = k^{'}\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)\frac{P}{P_0} \tag{18}$$

A equação de Ergun para a perda de pressão em leitos de recheio na forma diferencial:

$$\frac{dP}{dW} = -\frac{\alpha}{2}\frac{T}{T_0}\frac{P}{P/P_0}(1+\varepsilon X) \tag{19}$$

assumindo operação isotérmica

$$\frac{dP}{dW} = -\frac{\alpha}{2}\frac{P}{P/P_0}(1+\varepsilon X) \tag{20}$$

e fazendo-se:

$$y = \frac{P}{P_0} \tag{21}$$

então:

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

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

Para as condições de contorno, W=0 e X=1 e os valores dos parâmetros, α=0.0166/lbcat, ε=-0.15, $k^{'} = 0.026$ lbmol/h.lbcat e $F_{A0} = 1.08$ lbmol/h.

No Matlab, definindo a função, salvando como foe47.m

```
function xdot=foe47(w,x)
global ep k
kl=0.0266;
ep=-0.15;
al=0.0166;
fao=1.08;
xdot(1,:)=(kl/fao)*((1-x(1))/(1+ep*x(1)))*x(2);
xdot(2,:)=-al*(1+ep*x(1))/(2*x(2));
```

Figura 7 - Fila .m do Matlab

```
t=0:1:60;
>>xo=[0;1];
>>global ep k
>>[w,x]=ode45('foe47',t,xo);
>>plot(w,x(:,1),'+',w,x(:,2),'o')
>>title('Queda de Pressao e conversao versus massa catalisador')
>>xlabel('massa do catalisador (lb)')
>>ylabel('queda de pressao (p/po) e conversao')
>>gtext('o queda de pressao')
>>gtext('+ conversao')
```

Figura 8 - Na área de Trabalho do Matlab.

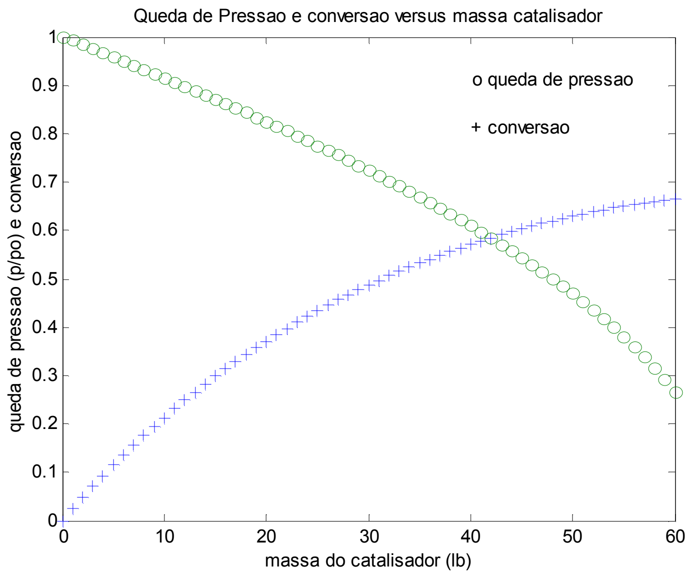


Figura 9 - Queda de Pressão e Conversão em função da Massa do Catalisador.

No Octave, definindo a função, e salvando como foe.m

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

Figura 10 - Fila .m no Octave.

```
>>[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(:,1),"o;queda de pressao;",w,x(:,2),w,x(:,2),"*;conversao;")
```

Figura 11 - Na área de Trabalho do Octave.

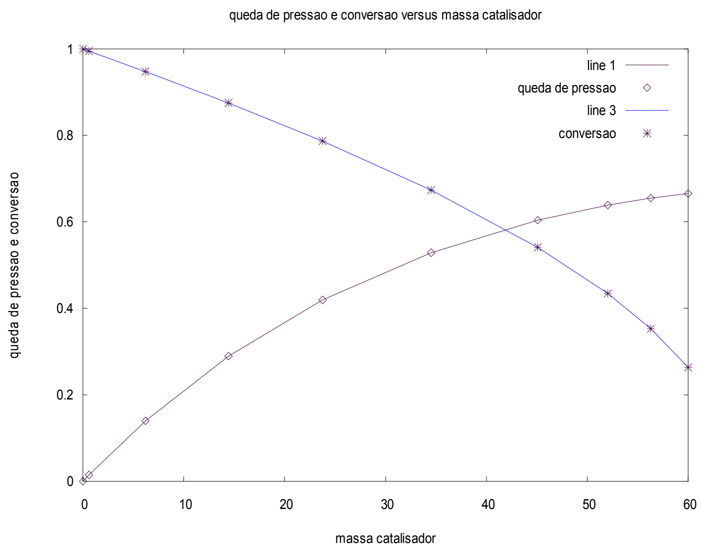


Figura 12 - Queda de Pressão e Conversão em função da Massa do Catalisador.

A apresentação são equivalentes, o tempo de processamento do Matlab foi um pouco menor, e a “amigabilidade” no uso são equivalentes.

CONCLUSÕES

Para os problemas escolhidos (simples e de nível de graduação), os softwares livres e proprietários mostraram-se com desempenhos muito próximos, com ligeira vantagem dos proprietários, quanto a apresentação. Já foram testados em aulas o Matlab e o Octave, tendo os alunos boa receptividade igual para os dois, assim como para o Maple e o Maxima com resultados semelhantes. As planilhas, para o caso deste trabalho, ainda não foi apresentada aos alunos; o que se pretende fazer este ano.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDRADE, C. M. G. Software Livre: Alguns Aplicativos Científicos para Engenharia. In: **Anais**, COBENGE, 2004.

DOMINGUES, M. O.; Mendes Junior, O. Introdução a Programas Científicos de Distribuição Gratuita: GNU/Octave, GNU/Maxima, Latex, GNU/RCS. Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional. Natal, **Anais**. Rio Grande do Norte, 2002.

EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. **Optimization of Chemical Process**. 2ª ed., 2002.

FOGLER, H. S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. 3º ed., Rio de Janeiro, 2002.

SCIENTIFIC AND ENGINEERING FREE SOFTWARES *versus* PROPRIETARY SOFTWARES

Abstract: *The concept of using computers to help mathematical problem and the teaching has a particular appeal to engineers. Software programs with strong emphasis on calculation and numerical evaluation continue to be marketed for the personal computer. As alternative for the proprietary software, we have the free software. The term free software is matter of the user's freedom to run, copy, distributes, study, change and improve the software. The object of this work is to introduce the concept of the free software, and show some free software for scientific applications and engineering comparing them with the similar proprietary. The software focalized are: spreadsheet GNUMERIC versus EXCEL, the symbolic mathematic program MAXIMA versus MAPLE, the numerical computations OCTAVE versus MATLAB. For each of the comparisons, was used an engineering simple problem. The spreadsheet were utilized on linear programming, the programs of symbolic mathematic were utilized to resolve analytically differential equations and the programs of numerical resolution of differential equations. The comparison between the programs was made in face of: facility of using, quality of the result's presentation and time of execution. The programs presented, for the analyzed cases, performances very similar with little advantage for the proprietary software.*

Key-words: *free software, spreadsheet, symbolic mathematic, numerical computations, proprietary software.*