

3.06.99 - Engenharia Química.

ESTUDO E APLICAÇÕES DE FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS NO ENSINO DA DISCIPLINA DE CINÉTICA E CÁLCULO DE REATORES

Jardiel G. S. Silva^{1*}, Wagner R. O. Pimentel²

1. Estudante do Centro de Tecnologia da Universidade Federal de Alagoas (CTEC - UFAL)
2. Professor do CTEC-UFAL – Curso de Engenharia Química/Orientador

Resumo

Devido ao investimento cada vez mais intenso de pacotes computacionais para resolução de problemas de engenharia química, viu-se a necessidade de preparar futuros profissionais para o bom desenvolvimento de suas atividades. Buscou-se a resolução de problemas envolvendo conceitos de termodinâmica e fenômenos de transferência de massa associados aos conceitos de cinética e cálculo de reatores utilizando ferramentas computacionais. Utilizou-se ferramentas de fácil acesso (planilhas eletrônicas) e de acesso livre (linguagem de programação Python) de modo a facilitar reprodução da metodologia aplicada por qualquer pessoa que tenha acesso a um computador. Comparando as ferramentas computacionais utilizadas, verificou-se que as planilhas eletrônicas tornam-se uma melhor ferramenta para resolução de problemas de cálculos de equações e sistemas algébricos enquanto que a linguagem Python torna-se uma melhor opção para resolução de sistemas de equações diferenciais ordinárias.

Palavras-chave: Python; Excel; Modelagem.

Apoio financeiro: Universidade Federal de Alagoas - UFAL.

Trabalho selecionado para a JNIC: Universidade Federal de Alagoas - UFAL.

Introdução

Em um curso de engenharia, ferramentas de cálculos e modelagem são indispensáveis. A computação e os programas específicos de engenharia ajudam na visualização do problema, proporcionando aos alunos um melhor entendimento e fixação, por isso, são ferramentas poderosas (PECK, 2004; SANTOS et al., 2005).

Em seu trabalho, Leite *et al.* (2014) afirmou que na análise dos currículos acadêmicos de engenharia química, observa-se a existência de um conjunto mínimo de disciplinas, todavia, no centro dos cursos, além de uma respeitável fundamentação matemática, há uma unanimidade quanto à oferta das disciplinas: fenômenos de transferência, termodinâmica e cinética. Estas disciplinas formam o núcleo de aprendizado sobre o qual se constrói a profissão. Viu-se necessário, pois, uma metodologia que promova, com o auxílio de um computador, a resolução de problemas gerados a partir de conceitos derivados de uma interrelação de tais disciplinas de modo a cultivar habilidades nos alunos que os tornem cada vez mais aptos a desenvolverem suas respectivas atividades laborais (GLASSEY, 2013).

Apesar da grande quantidade de softwares existentes para resolução de problemas, a utilização de ferramentas que não possuem custos associados à sua aquisição torna possível a utilização por qualquer indivíduo que tenha acesso a um computador. Dentre as ferramentas que estão facilmente difundidas estão as planilhas eletrônicas do Excel, onde a resolução dos problemas geralmente não necessita de um conhecimento avançado em programação, podendo ainda ser utilizados complementos como o Solver, tornando-a uma ótima opção para resolução de equações simultâneas (LEITE *et al.*, 2014). Pelo fato de ser de acesso livre e possuir uma sintaxe notavelmente simples, outra ferramenta que vem sendo cada vez mais difundida é a linguagem de programação Python e suas respectivas bibliotecas fornecendo pacotes computacionais com grande aplicabilidade na engenharia (CAI, LANGTAGEN, MOE, 2005).

Dessa forma, o trabalho objetivou o uso de ferramentas computacionais cujo acesso está facilmente difundido (Python e Excel), para auxiliar professores nas disciplinas de cinética e cálculo de reatores, termodinâmica e transferência de massa, através da resolução de problemas característicos destas disciplinas.

Metodologia

Três aplicações foram utilizadas para avaliar o desempenho das ferramentas utilizadas (Excel e Python). Na aplicação 01, solucionou-se um problema envolvendo um sistema contendo múltiplas reações

químicas em equilíbrio a partir de conceitos que abrangem as disciplinas de Termodinâmica II e Cinéticas e Cálculo de Reatores. Este problema pode ser encontrados em Smith, Van Ness e Abbott (2007), que utiliza o *Mathcad*® (um software privado) tornando o seu uso inacessível para quem não dispõe do valor de aquisição.

Na aplicação 02, solucionou-se um problema de um sistema monofásico no qual ocorre simultaneamente a difusão e uma reação irreversível de primeira ordem representado pela equação diferencial ordinária de segunda ordem:

$$\frac{d^2 C_A}{dz^2} - \frac{k}{D_{AB}} C_A = 0 \quad [1]$$

onde C_A é a concentração do reagente A em kmol/m³; z é a variável distância (m); k é a constante de taxa de reação homogênea (s⁻¹) e D_{AB} é o coeficiente de difusão binária (m²/s). As condições de contorno iniciais são para $z = 0$:

$$C_A = C_{A0} [2] \quad \text{e} \quad \frac{dC_A}{dz} \Big|_{z=0} = \left(\frac{C_{A0}}{L} \right) (k \sqrt{D_{AB}}) \tanh \left(L \sqrt{\frac{k}{D_{AB}}} \right) \quad [3]$$

onde $C_A = C_{A0}$ é a concentração constante na superfície ($z = 0$) e não há transporte através da superfície inferior ($z = L$), então a derivada é zero.

Na aplicação 03, solucionou-se simultâneas equações diferenciais ordinárias (EDO's) a partir de algumas condições iniciais utilizando conceitos que abrangem a disciplina de Cinética e Cálculo de Reatores. As EDO's representam equações de projeto para um reator catalítico com queda de pressão para reação reversível em fase gasosa. Considerou-se uma reação elementar em fase gasosa $2A \leftrightarrow C$ realizada em um reator de leito fixo. Há um trocador de calor em torno do reator e há uma queda de pressão ao longo do comprimento do reator

A notação usada e as seguintes equações e relações para este problema específico foram adaptadas para o livro do Fogler (2009). Assumiu-se fluxo em pistão sem gradientes radiais de concentração e temperatura em qualquer local dentro do leito do catalisador. O projeto do reator usou a conversão de A designado por X e a temperatura T , que são funções de localização dentro do leito do catalisador especificado pelo peso do catalisador W . A expressão geral do projeto do reator para a reação catalítica em termos de conversão é o balanço molar do reagente A dada por:

$$F_{A0} \frac{dX}{dW} = -r'_A \quad [4]$$

A taxa de reação catalítica simples para reação reversível é:

$$-r'_A = k \left[C_A^2 - \frac{C_C}{K_C} \right] [5]; \quad k = (k \text{ a } T = 450 \text{ }^\circ\text{K}) \exp \left[\frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{450} - \frac{1}{T} \right) \right] [6]; \quad K_C = (K_C \text{ a } T = 450 \text{ }^\circ\text{K}) \exp \frac{\Delta H_R}{R} \left[\frac{1}{450} - \frac{1}{T} \right] [7];$$

A estequiometria para $2A \leftrightarrow C$ e a tabela estequiométrica para um gás permite que as concentrações sejam expressas como:

$$C_A = C_{A0} \left(\frac{1-X}{1-0.5X} \right) y \frac{T_0}{T} [8]; \quad y = \frac{P}{P_0} [9]; \quad C_C = \left(\frac{0.5C_{A0}X}{1-0.5X} \right) y \frac{T_0}{T} [10]$$

A queda de pressão, a equação geral do balanço de energia e a solução analítica pode ser expressa pelas respectivas equações abaixo:

$$\frac{dy}{dW} = \frac{-\alpha(1-0.5X)}{2y} \frac{T}{T_0} [11]; \quad \frac{dT}{dW} = \frac{U_a(T_a - T) + r'_A(\Delta H_R)}{F_{A0}(C_{PA})} [12]; \quad C_A = C_{A0} \frac{\cosh \left[L \left(\sqrt{\frac{k}{D_{AB}}} \right) \left(1 - \frac{z}{L} \right) \right]}{\cosh \left(L \sqrt{k/D_{AB}} \right)} [13]$$

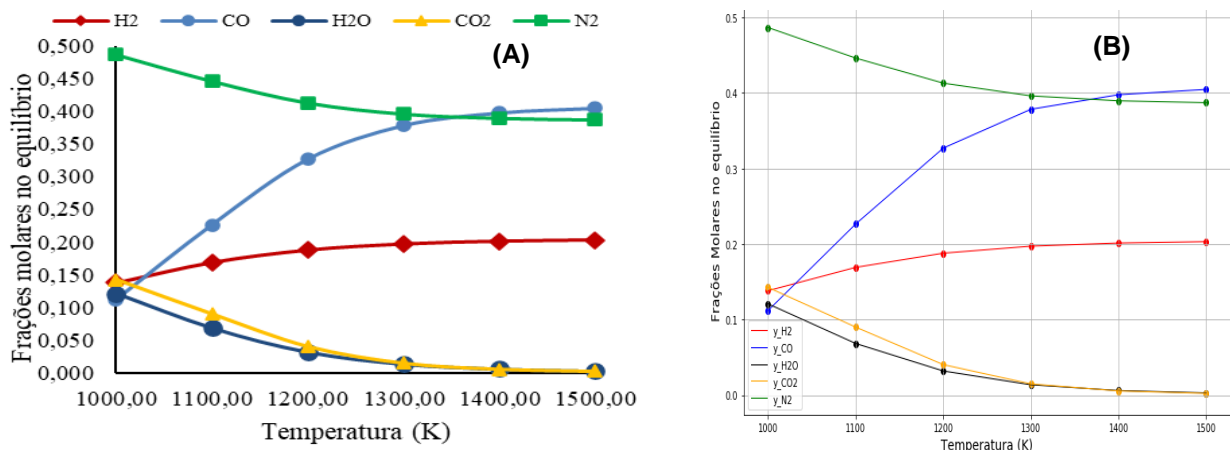
Cutlipet *al.* (1998) apresentam alguns parâmetros necessários para resolução do problema 03.

Resultados e Discussão

A figura 1 mostra os valores referentes à resolução da aplicação 01 de composição no equilíbrio em função da temperatura para um problema de múltiplas reações. A figura 1.A mostra os resultados utilizando a ferramenta Excel enquanto a figura 1.B mostra os resultados utilizando a linguagem Python. Como pode ser observado, o mesmo perfil foi verificado para ambas as ferramentas utilizadas. Este mesmo perfil também foi verificado quando se compara os resultados obtidos com os resultados apresentados por Smith, Van Ness e Abbott (2007) mostrando que ambas as ferramentas são úteis para resolução de exercícios que dispõem da necessidade métodos iterativos para resolução de sistemas algébricos.

Para resolução da aplicação 02 por Excel, utilizou-se o método de Runge-Kutta de 4º Ordem (RK4) para resolução da equação diferencial ordinária (EDO) homogênea de segunda ordem [1]. Durante a resolução, percebeu-se que otimizar-se-ia a forma de calcular C_A em função de z por meio da programação utilizando VBA. A vantagem desta ferramenta foi à simplificação visual da resolução do problema, uma vez que todo os cálculos das constantes do método RK4 são calculadas internamente por meio do código e o valor de C_A é impresso nas células para cada z respectivo.

Figura 1 - Perfil da composição de equilíbrio em função da temperatura. (A) - Utilizando Excel; (B) - Utilizando Python

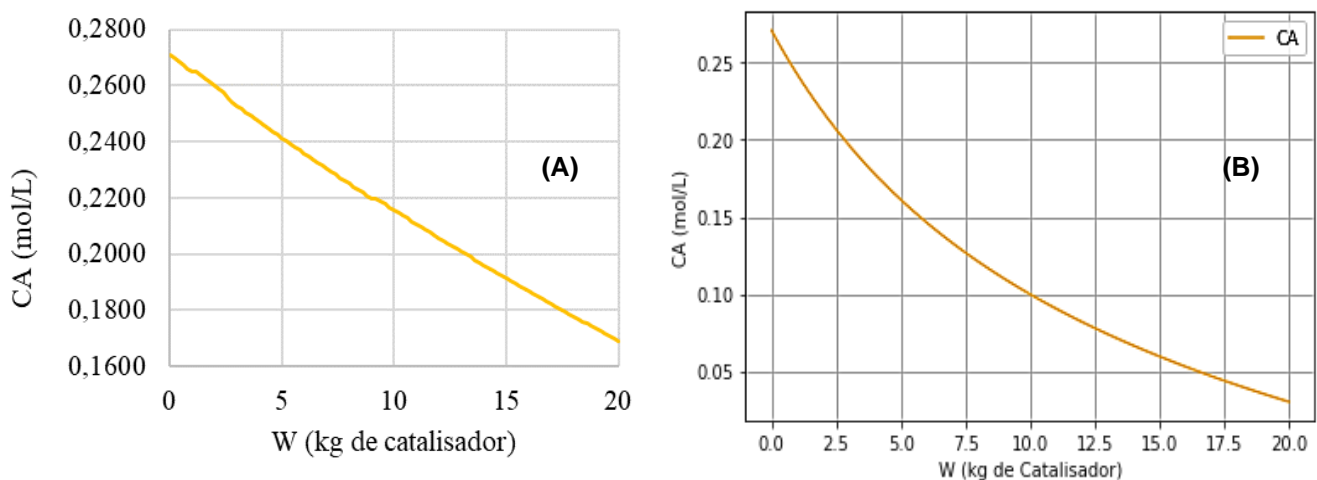


Fonte: Autor (2022)

A resolução da EDO [2] utilizando a linguagem Python, se deu por meio do módulo *odeint* (SCIPY LIBRARY, 2022). Também se utilizou um código similar ao utilizado no Excel-VBA para comparar a resolução utilizando o método RK4. Durante a resolução do problema, foi observado o mesmo perfil para ambos os resultados (incluindo a solução analítica [13]), ressaltando a facilidade de se utilizar a linguagem Python para resolução do problema uma vez que o código de resolução da EDO consistiu de 2 linhas e a linguagem Python é naturalmente mais simples pois consiste de uma linguagem de programação mais intuitiva quando comparada ao VBA.

Para resolução da aplicação 03 usando o Excel, utilizou-se o método RK4 para integração numérica e o método Newton-Raphson como método de otimização para encontrar o zero da função (quando se estima inicialmente o valor de $-r_A'$) [5], ambos associados a linguagem de programação VBA (de forma a otimizar os cálculos). Verificou-se um aumento no grau de complexidade de resolução do problema estudado, quando comparado com a utilização da linguagem de programação Python e suas respectivas bibliotecas. Foi possível obter perfis informando a concentração de A em mol/L em função de W (kg de catalisador) conforme pode ser observado na figura 2. No resultado usando Excel (figura 2.A), percebeu-se um decrescimento tendencialmente linear da curva de C_A a medida que o reagente avançou no reator, enquanto que a resolução com Python (figura 2.B) percebeu-se uma curva decrescente mas com uma tendência não linear, o que é mais condizente com os perfis apresentados na literatura para este tipo de reator (Fogler, 2009).

Figura 2 – Perfil de concentração de A em mol/L em função da massa de catalisador. (A) Excel; (B) Python



Fonte: Autor (2022)

Conclusões

Para a aplicação 01, comparando ambas as ferramentas utilizadas para resolução de sistemas algébricos, observou-se que o Excel se mostrou mais viável para realização dos cálculos uma vez que não requereu nenhum tipo de conhecimento de linguagem de programação.

Durante a aplicação 02, verificou-se para ambas as ferramentas utilizadas, que os valores de resultados foram idênticos. Observou-se ainda que a resolução utilizando as planilhas eletrônicas no Excel (utilizando o método numérico de Runge-Kutta 4ª ordem) gerou uma matriz de resolução que pode ser simplificada quando há uma associação da resolução com a linguagem de programação VBA. Comparando as ferramentas, o Python ofereceu uma maior simplicidade quanto ao uso, uma vez que nas suas respectivas bibliotecas já existem módulos pré-existent, específicos para resolução de EDO's, tornando a modelagem do problema em questão muito mais simplificada.

Na aplicação 03 houve a necessidade da resolução de um sistema de equações diferenciais ordinárias. Verificou-se que a ferramenta Excel forneceu resultados com um perfil diferente do que é apresentado na literatura para este tipo de problema. Devido a isto, a ferramenta Python tornou-se uma melhor opção para modelagem e resolução do problema, uma vez que o perfil apresentado nos resultados foi condizente com a literatura.

Com base no que foi exposto, percebe-se que ambas as ferramentas são válidas como instrumentos de utilização para resolução de problemas de engenharia química. Todavia, conclui-se que o Excel torna-se uma melhor opção quando utilizada em problemas envolvendo a resolução de sistemas de equações algébricas enquanto que o Python mostrou-se uma melhor opção para resolução de problemas envolvendo equações diferenciais ordinárias. Por fim, observa-se que ferramentas computacionais (Excel e Python) foram utilizadas para resolução de problemas que envolveram conceitos inerentes as disciplinas de termodinâmica e transferência de massa associado à cinética e cálculo de reatores.

Referências bibliográficas

AGOSTINHO, N. U. *et al.* Softwares livres no ensino de Engenharia: uma atitude socialmente justa, economicamente viável e tecnologicamente sustentável. *Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia*. 2006.

BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. **Fenômenos de Transporte**, Editora LTC, 2a edição, 2004

CAI, X.; LANGTANGEN, H. P.; MOE, H. On the performance of the Python programming language for serial and parallel scientific computations. **Scientific Programming**. 2005.

CUTLIP, M. B. *et al.* "The collection of 10 numerical problems in Chemical Engineering solved by various mathematical software packages", *Comp. App. in Eng. Edu.* v.6, n.3, p.169-180, 1998.

FOGLER, H. S. **Elementos de engenharia das reações químicas**. 4ª ed. Rio de Janeiro, LTC, 2009.

FYLSTRA, Daniel *et al.* Design and Use of the Microsoft Excel Solver. **INFORMS Journal on Applied Analytics**. p. 29-55, 5 out. 1998. HASHEMI, S. H. *et al.* Performance comparison of GRG algorithm with evolutionary algorithms in an aqueous electrolyte system. **Modeling Earth Systems and Environment**, [s. l.], 3 jun. 2020.

LEITE, J. P. *et al.* "Avaliação preliminar do impacto de softwares de simulação no ensino das Engenharias Química e de Petróleo"; *ENGEVISTA*, V. 16, n. 1, p.28-40, Março, 2014.

OLIVEIRA, Bianca Rodrigues *et al.* Recursos tecnológicos potencializadores do ensino não presencial em tempos de pandemia da COVID-19. **REBECIN**, São Paulo, v. 7, número especial, p. 129-155, 2020. DOI: 10.24208/rebecin.v7iespecial.204

PECK, S.L. Simulation as experiment: a philosophical reassessment for biological modeling. *Trends in Ecology & Evolution*, v. 19, n. 10, p. 530-534, 2004.

SANNER, M. F. *et al.* PYTHON: A PROGRAMMING LANGUAGE FOR SOFTWARE INTEGRATION AND DEVELOPMENT. **The Scripps Research Institute**. 1999.

SANTOS, G. *et al.* Knowledge Management in a Software Development Environment to Support Software Processes Deployment. *Lecture Notes in Computer Science*, v. 3782, pp 111-120, 2005.

Scipy library. *In: The SciPy community.*, 18 fev. 2021. Disponível em: <https://www.scipy.org/index.html>. Acesso em: 6 mar. 2022

SMITH, J. M., & VAN NESS, H. C. (1959). **Introduction to chemical engineering thermodynamics**. New York, McGraw-Hill.