



UTILIZAÇÃO DE SOFTWARES LIVRES NO ENSINO DA ENGENHARIA QUÍMICA

P.H.F. GREPINO¹, F. A. RODRIGUES^{1*}

¹Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Química
E-mail: paulo.grepino@ufv.br

RESUMO: O objetivo do trabalho foi apresentar as características do ambiente computacional do Scilab e sua aplicação na resolução de problemas de cálculo numérico relacionados à Engenharia Química. Os modelos matemáticos são utilizados criteriosamente na simulação computacional de problemas. As técnicas permitem resolver problemas que não têm solução analítica ou quando estas são por demais complicadas. Os conhecimentos adquiridos serão úteis para as disciplinas: Fenômenos de Transporte, Operações Unitárias, Termodinâmica, Instrumentação e Controle, Projetos de Reatores, Projetos Industriais e Processos Orgânicos e Inorgânicos, disciplinas estas que são essenciais para a formação sólida dos Engenheiros Químicos.

PALAVRAS-CHAVE: Scilab; Engenharia Química; Simulação.

NOMENCLATURA

C_A - Concentração do componente "A".

C_B - Concentração do componente "B".

C_C - Concentração do componente "C".

k_1 - Constante cinética da reação 1.

k_2 - Constante cinética da reação 2.

k_3 - Constante cinética da reação 3.

$C_A(t=10)$ = Concentração do componente "A" no tempo igual a 10 segundos.

$C_B(t=10)$ = Concentração do componente "B" no tempo igual a 10 segundos.

$C_C(t=10)$ = Concentração do componente "C" no tempo igual a 10 segundos.

P - Pressão (atm).

R - Constante universal dos gases (atm.L.mol⁻¹.K⁻¹).

T - Temperatura (Kelvin).

V_m - Volume molar ($L \cdot mol^{-1}$).

a - Constante da equação de Van der Waals ($atm \cdot L^2 \cdot mol^{-2}$).

b - Constante da equação de Van der Waals ($L \cdot mol^{-1}$).

1. INTRODUÇÃO

Em um mercado competitivo e cada vez mais exigente, é necessário que o profissional de Engenharia Química recém-formado esteja capacitado para enfrentar os vários desafios que o trabalho na indústria pode apresentar. Tais desafios envolvem, muitas vezes, problemas matemáticos complexos que devem ser resolvidos com a máxima eficiência e confiabilidade.

Para que o estudante de graduação em Engenharia Química esteja apto a resolver tais problemas, são ministradas várias disciplinas que envolvem a modelagem matemática, dentre elas podemos citar: Fenômenos de Transporte, Operações Unitárias, Termodinâmica, Projetos de Reatores e Instrumentação e Controle, todas elas presentes na grade curricular do curso de Engenharia Química. Tais disciplinas necessitam de estudos avançados e detalhados, envolvendo modelos matemáticos complexos, que, muitas vezes, não possuem resolução analítica, sendo então necessário o uso de softwares computacionais para complementar o ensino.

Para que a aprendizagem seja efetiva, é necessário que o estudante tenha um contato profundo com a análise de tais modelos, para que desenvolva as habilidades e o senso crítico suficientes para que seu trabalho seja confiável e seguro. Dessa forma, é indispensável um contato frequente com os softwares mencionados.

Existem vários softwares privados que têm a capacidade de resolver tais modelos com alto grau de confiabilidade. Dentre eles podemos citar o Maple e Matlab®. Todavia, a utilização desses softwares é inviável no ambiente institucional público, devido ao seu elevado preço e as dificuldades para a disponibilização dos mesmos para uso doméstico dos estudantes de forma legal. Para solucionar tal problema, os professores recorrem a softwares públicos e/ou gratuitos que possuem funções semelhantes às dos softwares citados anteriormente. Dentre tais funções, podemos citar: cálculos matriciais, resolução de integrais, derivadas, manipulação de vetores em geometria, análise numérica, além da construção e visualização de gráficos de funções.

Além disso, a utilização de um software gratuito permite a divulgação, sem restrição, dos resultados obtidos, distribuição dos programas desenvolvidos sem imposições de qualquer natureza, acesso ao código fonte do programa e a informações de alta qualidade. Ainda, tais softwares possuem uma linguagem e estrutura interativas e de fácil manipulação.

Este projeto, voltado para o aprendizado da linguagem de programação do Scilab e sua aplicação na resolução de problemas multidisciplinares da Engenharia Química teve como objetivos selecionar um software gratuito que atenda às necessidades dos estudantes e professores no que se refere ao estudo de modelos matemáticos aplicados à resolução de problemas de Engenharia Química e estudar, selecionar e resolver tais modelos, bem como analisar a viabilidade de utilização do software selecionado para as disciplinas do curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Viçosa.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Sobre o Scilab

O Scilab é um software científico para computação numérica, semelhante ao MATLAB®, que fornece um poderoso ambiente computacional aberto para aplicações científicas. Desenvolvido desde 1990 pelos pesquisadores do INRIA (Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique) e do ENPC (École Nationale des Ponts et Chaussées), então pelo Consórcio Scilab desde Maio de 2003, Scilab é agora mantido e desenvolvido pelo *Scilab Enterprises* desde Julho de 2012. Distribuído gratuitamente via Internet em www.scilab.org, o software é atualmente usado em diversos ambientes industriais e educacionais pelo mundo. O programa possui uma linguagem de programação de alto nível, orientada à análise numérica. A linguagem provê um ambiente para interpretação, com diversas ferramentas numéricas. Algoritmos complexos podem ser criados em poucas linhas de código, em comparação com outras linguagens como C, Fortran, ou C++. Filho (2012).

2.2 Atividades Desenvolvidas

As atividades realizadas com o Scilab no decorrer do projeto foram voltadas para o aprendizado das diversas funções de programação do software. A introdução aos recursos do programa foi feita de modo dinâmico, ou seja, problemas matemáticos envolvendo sistemas lineares, equações e polinômios foram resolvidos a fim de conhecer os comandos básicos do Scilab. A partir daí, foi possível conhecer melhor, ainda que não por completo, o software. Situações vivenciadas por profissionais da Engenharia Química, como cálculos da variação das concentrações de componentes de um determinado sistema reacional e otimização de processos, foram tratadas no software. Os problemas devidamente

modelados matematicamente com base nos conhecimentos adquiridos nas disciplinas do curso de Engenharia Química foram inseridos no Scilab de acordo com sua linguagem de programação e os resultados foram obtidos por meio de valores numéricos e/ou gráficos, o que permitiu a interpretação e avaliação dos mesmos.

Os comandos estudados foram utilizados no programa a fim de identificar sua função, bem como os resultados fornecidos pelo mesmo para diferentes funções. A seguir um comando escrito no Scilab para plotagem de gráficos em 3D, mostrado na Figura 1, retirado de Filho (2012).

```
1 – clc
2 – clear
3 – close
4 – t=[0:0.1:2*%pi]';
5 – z=(sin(t).*exp(t))*cos(t');
6 – plot3d(t,t,z)
7 – size(t)
8 – ans=
9 – 63. 1.
10 – size(z)
11 – ans=
12 – 63. 63.
```

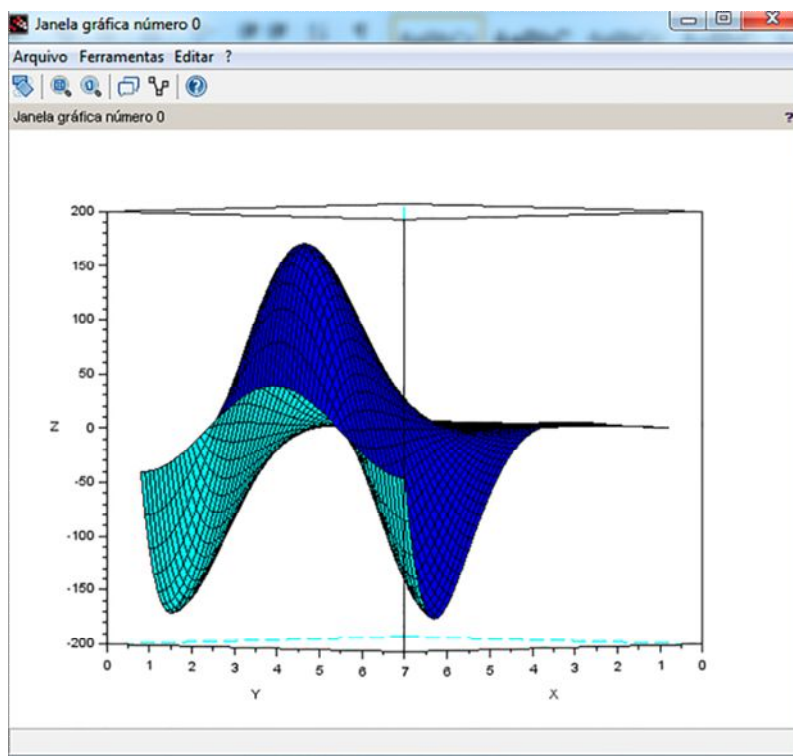


Figura 1 – Gráfico em 3D.

2.3 Problemas da Engenharia Química

O estudo dos comandos e funções do Scilab permitiu a reprodução de problemas vivenciados por engenheiros químicos e que devem ser mostrados para os estudantes do curso, a fim de apresentar para os mesmos as situações que vivenciarão em suas vidas profissionais.

A seguir, um exemplo resolvido no Scilab, retirado de Lopes (2004).

Exemplo 1: Seja o sistema reacional:



A modelagem matemática do sistema resulta no seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{bmatrix} \frac{dC_A}{dt} \\ \frac{dC_B}{dt} \\ \frac{dC_C}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 C_A + k_2 C_B C_C \\ k_1 C_A - k_2 C_B C_C - k_3 C_B^2 \\ k_3 C_B^2 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Com as condições iniciais:

$$C_A(0) = 1 \quad (5)$$

$$C_B(0) = 0 \quad (6)$$

$$C_C(0) = 0 \quad (7)$$

$$k_1 = 0,08 \quad (8)$$

$$k_2 = 2 \times 10^4 \quad (9)$$

$$k_3 = 6 \times 10^7 \quad (10)$$

A integração do sistema acima, levando em conta as equações de 4 a 10, é feita com o seguinte código:

```
mode(-1);
// Template para resolução de EDOs PVI no SCILAB
// Formato de utilização da função ode:
// [y,rd,w,iw]=ode('root',y0,t0,t [,rtol [,atol]]) f [,jac],ng,g [,w,iw])
// Valor default:rtol=1.e-5 e atol=1.e-7
// Valor default para 'rfk' e 'fix': rtol=1.e-3 e atol=1.e-4
// Definições das funções
//
function [f]=fun(t, y)
k=[0.08;2e4; 6e7];
f(1)=-k(1)*y(1)+k(2)*y(2)*y(3);
f(2)=k(1)*y(1)-k(2)*y(2)*y(3)-k(3)*y(2)^2;
f(3)=k(3)*y(2)^2;
endfunction
// Programa principal
txt=['to=';'yo=';'t='];
valor=x_mdilog('Forneça informações',txt,['0';[1;0;0]';[0;0.1;10]'])
t0=evstr(valor(1));
y0=evstr(valor(2)); t=evstr(valor(3));
```

```
//%ODEOPTIONS=[itask,tcrit,h0,hmax,hmin,jactyp,mxstep,maxordn,maxords,ixpr,ml,
mu]
//ODEOPTIONS=[1,0,0,%inf,0,2,500,12,5,1,-1,-1]; // printevel=1;
y=ode(y0,t0,t,fun);
subplot(311);
xset("line style",1);plot2d(t,y(1,:) , style=3);
xlabel("Tempo/s") ; ylabel("Concentração");
subplot(312);
xset("line style",3);plot2d(t,y(2,:) , style=9);
xlabel("Tempo/s") ; ylabel("Concentração");
subplot(313);
xset("line style",4);plot2d(t,y(3,:) , style=5);
xlabel("Tempo/s") ; ylabel("Concentração");
legends(["Concentração de A" ; "Concentração de B" ; "Concentração de C"] ,
[[3;1] , [9;3] , [5;4], opt=5 , font_size=2)
show_window()
```

A Figura 2 mostra o gráfico plotado pelo Scilab que representa a variação das concentrações dos componentes *A*, *B* e *C*, com o tempo, presentes no sistema estudado.

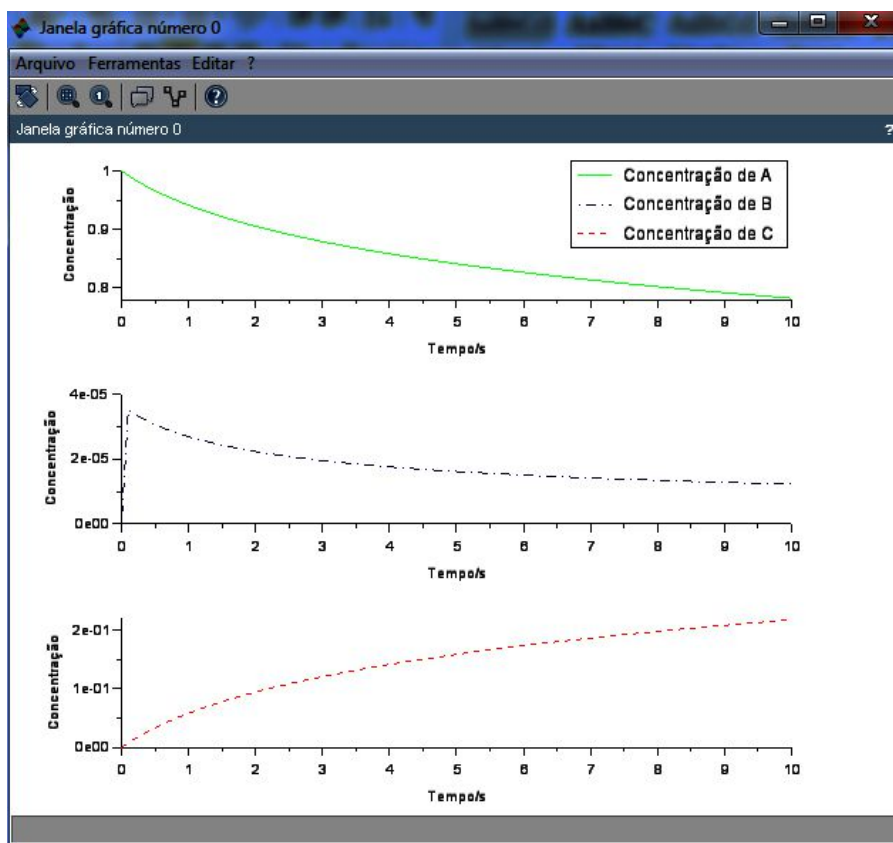


Figura 2 – Variação das concentrações das substâncias presentes no sistema reacional.

De acordo com a resolução do problema no software utilizado, o sistema reacional, nos primeiros 10 segundos, apresenta uma queda da concentração do componente A e um aumento da concentração do componente C. Há um aumento instantâneo da concentração do componente B, seguido de seu consumo até o final do tempo representado no gráfico, indicando a redução da concentração do mesmo. Pode-se concluir que ao final dos 10 segundos, de acordo com os valores do gráfico, a concentração do componente A é nula e a concentração do componente C supera em cerca de 20.000 vezes a concentração do componente B.

$$\begin{aligned}
 C_A(t=10) &= 0 \\
 C_B(t=10) &= 1,0 \times 10^{-5} \\
 C_C(t=10) &= 2,0 \times 10^{-1} \\
 \frac{C_C(t=10)}{C_B(t=10)} &= \frac{2,0 \times 10^{-1}}{1,0 \times 10^{-5}} = 20.000
 \end{aligned}$$

Exemplo 2: Calcule o volume molar da amônia gasosa à uma pressão de 56 atm e temperatura de 450 K utilizando a equação dos gases ideais e a equação de Van der Waals.

Equação dos gases ideais:

$$PV_m = RT \quad (11)$$

Nesta situação temos:

$$P = 56 \text{ atm} \quad (12)$$

$$R = 0,08206 \text{ atm.L.mol}^{-1}.\text{K}^{-1} \quad (13)$$

$$T = 450 \text{ K} \quad (14)$$

A equação (11) pode ser resolvida como uma equação não linear no volume.

A utilização da função *fsolve*, função que resolve equações não lineares, pode ser aplicada definindo-se:

$$f = RT - PV \quad (15)$$

A implementação do programa, com base nas equações de 11 a 15, fornece o seguinte código:

```
// Cálculo do volume pela Equação dos gases ideais
mode(-1);
clear
clc
// Definição da função
function [f]=fun(V, P, T)
R=0.08206;
f=R*T-P*V;
endfunction
//-----
// Programa principal
```

```

// Dados
P=56; T=450;
// Estimativa para a solução
x0=(0.08206*450)/56; flist=list(fun,P,T);
[x,fv,iflag]=fsolve(x0,flist);
select iflag,
case 0 then
printf('Parâmetros de entrada não adequados!\n'), abort
case 1 then
printf('O volume da equação de RK é igual a :\n');
printf(' V = %f\n',x);
case 2 then
printf('Número máximo de chamadas da função atingido!\n'), abort
case 3 then
printf('Valor da variável tol é muito pequeno!\n'), abort
case 4 then
printf('Não converge!\n'),abort
end

```

Nas condições do problema, o valor do volume molar calculado para o gás ideal no script mostrado acima é:

$$V_m = 0,659411 \text{ L.mol}^{-1}$$

Equação de Van der Waals:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2} \quad (16)$$

Rearranjando a equação teremos:

$$\left(P + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT \quad (17)$$

Ou ainda:

$$PV_m^3 - (bP + RT)V_m^2 + aV_m - ab = 0 \quad (18)$$

A equação 18 é uma equação cúbica no volume (V). Equações cúbicas são importantes instrumentos para tentarmos correlacionar as propriedades de gases e líquidos.

Para esta situação tem-se:

$$a = 4.16585 \left(\frac{\text{atm} \cdot \text{L}^2}{\text{mol}^2} \right) \quad (19)$$

$$b = 0.03713 \left(\frac{\text{L}}{\text{mol}} \right) \quad (20)$$

A equação 18 pode ser resolvida como uma equação não linear no volume.

A utilização da função *fsolve* pode ser aplicada definindo-se:

$$f = PV_m^3 - (bP + RT)V_m^2 + aV_m - ab \quad (21)$$

A implementação do programa com base nas equações de 16 a 21 fornece o seguinte código, mostrado a seguir.

```
// Cálculo do volume pela Equação dos gases ideais
mode(-1);
clear
clc
// Definição da função
function [f]=fun(V, P, T)
R=0.08206;
a=4.16585;
b=0.03713;
f=P*V^3-(b*P+R*T)*V^2+a*V-a*b;
endfunction
// Programa principal
//-----
// Dados
P=56; T=450;
// Estimativa para a solução
x0=(0.08206*450)/56; flist=list(fun,P,T);
[x,fv,iflag]=fsolve(x0,flist);
select iflag,
case 0 then
```

```
printf('Parâmetros de entrada não adequados!\n'), abort
case 1 then
printf('O volume da equação de Van der Waals é igual a :\n');
printf(' V = %f\n',x);
case 2 then
printf('Número máximo de chamadas da função atingido!\n'), abort
case 3 then
printf('Valor da variável tol é muito pequeno!\n'), abort
case 4 then
printf('Não converge!\n'),abort
end
```

Nas condições do problema, o valor do volume molar calculado para o gás de Van der Waals, no script mostrado acima é:

$$V_m = 0,575647 \text{ L.mol}^{-1}$$

Sabemos que gases se desviam da idealidade em determinadas condições.

Neste exemplo, vimos que, nas condições em que o gás foi estudado, seu volume real, calculado pela equação de Van der Waals, foi inferior ao volume calculado em sua idealidade.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os objetivos do projeto foram alcançados, visto que o contato com o Scilab e sua aplicação possibilitou a verificação de sua viabilidade na resolução de problemas relacionados às diversas áreas como engenharias, matemática, estatística e, como estudado, a Engenharia Química. O software Scilab é bastante completo e atende às necessidades de alunos e professores na avaliação e tratamento de dados.

Scilab possui um ambiente interativo. Oferece suporte à resolução de vários outros problemas além dos que foram abordados por este projeto. É de fácil aprendizado, pois possui algoritmos de alto nível, o acesso é gratuito e existem disciplinas na grade curricular do curso de Engenharia Química de diversas instituições de ensino que dão suporte para que os alunos desenvolvam os códigos de programação necessários para o trabalho com o software.

O uso do Scilab complementa o ensino de várias disciplinas da grade curricular da Engenharia Química, pois é uma ferramenta de alto nível que possibilita a melhor organização, visualização, compreensão e resolução dos problemas. Assim, o contato com software utilizado no projeto contribui para a preparação, de maneira eficaz, do estudante para o mercado de trabalho e seu futuro ambiente profissional.

4. CONCLUSÃO

O uso de um software para solucionar os problemas matemáticos encontrados em diversas áreas do conhecimento, principalmente no campo da Engenharia Química é essencial no atual contexto educacional e tecnológico. Ter acesso a uma ferramenta livre e gratuita com alto potencial de programação que apresente diversos recursos algébricos, numéricos e gráficos e que cumpra com eficiência as funções que são requeridas no tratamento de dados é fundamental para proporcionar aos estudantes conhecimentos essenciais para sua formação profissional.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a CAPES pelo apoio financeiro.

6. REFERÊNCIAS

C. GOMEZ. **Engineering and scientific computing with Scilab**. Boston, Mass.: Birkhäuser, 1999. 491 p.1 computer optical disc (4 3/4 in.) ISBN 0817640096

L. C. O. LOPES. **Utilizando o SCILAB na Resolução de Problemas da Engenharia Química**. XV COBEQ, Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Curitiba - Paraná – Brasil

H. B. WILSON; LOUIS H. TURCOTTE. **Advanced mathematics and mechanics applications using MATLAB**. Boca Raton: CRC, 1994 405p.

P. S. M. PIRES. **Introdução ao Scilab - Versão 3.0**. UFRN. 2004. Disponível em: <<http://www.dca.ufrn.br/~pmotta/sciport-3.0.pdf>>. Acessado em 10 nov. 2013.

E. G. M. DE LACERDA. **Programando com o Scilab**. UFRN. 2011. Disponível em: <<http://www.dca.ufrn.br/~estefane/academica/progsci.pdf>>. Acessado em 12 dez. 2013.

D. G. FILHO. **Scilab 5.X**. UFC. 2012. Disponível em: <http://www.petmecanica.ufc.br/PET_Engenharia_Mecanica_UFC/SciLab_files/Apostila%20de%20Scilab%20-%20atualizada.pdf>. Acessado em 12 dez. 2013.