USO DE *SOLVE-PACKAGE* NOS CURSOS DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Ambrósio F. De Almeida Neto[(1)], Patrícia Noemia Mota de Vasconcelos[(1)], Romildo Pereira Brito[(2)]

(1) Alunos de Graduação/UFCG/CCT/Departamento de Engenharia Química;
(2) UFCG/CCT/Departamento de Engenharia Química;
Avenida Aprígio Veloso, 882 – Bodocongó – 58.109-970 - Campina Grande – Paraíba
Fone: 83 310.1366 Fax: 83 310 1116 – e-mail: amba2@bol.com.br; brito@deq.ufpb.br

Palavras-chave: Engenharia Química, Graduação, Ensino.
Área do Conhecimento: III - Engenharias

RESUMO: O aperfeiçoamento dos computadores fez surgir uma classe de aplicativos comerciais que podem ser de grande utilidade na tarefa de ensinar. São os chamados Solve-Package. Entre os vários aplicativos disponíveis, podemos citar: Mathcad, Mathematica, Mapple e Polymath. O uso destas ferramentas permite ao estudante resolver um problema explorando profundamente o conteúdo do assunto, visto que em diversas ocasiões o estudante se preocupa tanto em obter um programa computacional para resolver a questão acabando por esquecer a essência do problema. Em outras situações o estudante é obrigado a simplificar ou fazer suposições de forma que a solução possa ser obtida manualmente. Este artigo apresenta uma proposta de utilização do Mathcad em todas as fases dos cursos de engenharia química. Os exemplos apresentados estão de acordo com a seguinte divisão: Fundamentos, Aplicações Primárias e Conteúdos de Integração.

1. Introdução

O mundo moderno tem se caracterizado pela grande quantidade de informação disponível, principalmente pela facilidade de acesso ao computador. A tarefa de absorver tais informações tem se tornado cada vez maior, uma vez que estas informações estão pulverizadas, de forma que a utilização do tempo dedicado ao estudo deve ser realizada de forma racional.

Um bom profissional não deve apresentar apenas um conteúdo solidificado. É essencial que o mesmo tenha habilidade para usar este conteúdo na resolução dos problemas. Desta forma, as aulas devem privilegiar os aspectos essenciais, o material didático deve ser continuamente atualizado, o professor deve estar aberto e preparado para as novas ferramentas que surgem a cada dia e, finalmente, não esquecer de que o ensino deve ser centrado no aluno.

A racionalização do tempo disponível durante os estudos passa pela necessidade de reformas curriculares para adaptação à nova Lei de Diretrizes e Bases (LDB) do Ministério da Educação e Cultura (MEC). A implementação dos novos currículos exige a introdução de novas metodologias e ferramentas de ensino por parte dos professores. A combinação deste dois pontos deve ter como objetivo principal dar ao profissional formado uma elevada capacidade de criticar, analisar e sintetizar soluções.

2. Revisão Bibliográfica

Provavelmente, mais do que qualquer

outra ferramenta moderna, o computador tem transformado a prática da engenharia em todos os níveis. O computador permite uma abordagem diferente dos problemas, evitando o ciclo de "solução certa ou solução errada". Muito mais importante é fazer suposições, gerar soluções e escolher, a partir das alternativas obtidas e de critérios estabelecidos, a solução que melhor convier.

A disseminação do uso dos computadores fez surgir uma variedade de ferramentas que podem ser utilizados na resolução de problemas de engenharia; são os chamados Solve-Package. Entre os vários aplicativos, podemos citar: Mathcad, Mathematica, Maple, Matlab e Polymath. Entretanto, apesar da disponibilidade para ser usado em computador pessoal, freqüentemente, este potencial não é bem aproveitado pelos cursos de graduação em engenharia.

No passado os computadores eram utilizados apenas para tarefas de grande dificuldade e cálculos rigorosos, enquanto cálculos mais simples eram realizados manualmente com o auxílio de calculadoras. A não utilização de computadores na resolução de problemas mais simples era justificada pelo elevado tempo consumido pela programação envolvida. Em outras situações o estudante era obrigado a simplificar ou fazer suposições de forma que a solução pudesse ser obtida manualmente.

Antes do surgimento de aplicativos do tipo Solve-Package, a resolução de um problema de engenharia mais complexo, utilizando o computador envolvia as seguintes etapas: (1) modelagem do problema, (2) escolha de um método numérico que fosse adequado, (3) elaboração de um programa, normalmente em FORTRAN, e (4) análise dos resultados. Das quatro etapas citadas, reconhece-se que a segunda e a terceira etapas eram as que menos contribuíam para o aprendizado do problema em questão, e por outro lado eram as etapas que mais demandavam tempo e as mais frustrantes.

O uso de ferramentas tipo Solve-Package traz à tona um novo desafio para a engenharia química. Este desafio tem sido chamado por Fogler (1992) de o "paradigma do deslocamento". Usando estas novas ferramentas a principal tarefa do estudante é obter as equações do modelo, visto que a solução exata é fornecida na forma gráfica e numérica, em curto espaço de tempo, pelo aplicativo. De acordo com Fogler, o principal ponto do paradigma do deslocamento é: usar antigos procedimentos com novas ferramentas computacionais traz pouco ou nenhum benefício. Este ponto também é enfatizado por Nevers e Seader (1992).

Segundo Jones (1998), mesmo com a disponibilidade ferramentas tipo Sove-Package, o computador não tem sido usado de forma efetiva nos cursos de engenharia e, freqüentemente, não são nem utilizados. De acordo com o mesmo autor, a metodologia de resolução dos problemas não é nem influenciada pela disponibilidade do computador. Existem alguns fatos que tentam explicar esta situação.

Em primeiro lugar, diversos livros textos atuais não têm se adaptado às novas ferramentas computacionais, devido à falta de interesse em usar estas e de criar problemas que as utilizem. O custo de aquisição destes aplicativos é outro fator que contribui com a reduzida utilização destas novas ferramentas. Infelizmente, o custo individual ainda é muito elevado, o que faz com que o aluno faça uso de tais ferramentas apenas na universidade. Entretanto, o fator de maior relevância é o "investimento", em termos de tempo, necessário para que alunos e professores tornem familiar a utilização de determinado aplicativo; e isto é mais crítico quando parte dos professores.

3. Metodologia

Atualmente, uma das maiores reclamações no curso de engenharia química é a falta de um elo de ligação entre as diversas disciplinas da estrutura curricular. Desta forma, a meta principal deste trabalho é a elaboração de um material instrucional para ser utilizado por uma disciplina, a ser criada, do curso de graduação engenharia química da Universidade Federal de Campina Grande. A disciplina citada terá como finalidade integralizar os diversos conteúdos vistos em diferentes disciplinas. O ponto forte desta disciplina será a utilização de aplicativos do tipo Solve-Package. Mais especificamente, serão utilizados os

seguintes aplicativos: Mathcad e Polymath. No caso do curso da Universidade Federal de Campina Grande, o aplicativo Mathcad já é utilizado há algum tempo.

Os problemas são abordados de maneira genérica, de modo que possa haver uma comparação entre os aplicativos utilizados, salientando as vantagens e desvantagens de cada um. A organização dos problemas é realizada considerando a forma como eles são divididos em grande parte dos cursos de engenharia química. São selecionados no mínimo três e no máximo cinco problemas de cada conteúdo e cada problema é resolvido utilizando os dois aplicativos.

Dentro deste contexto podemos delinear os seguintes objetivos específicos deste trabalho:

- Resolução de problemas envolvendo Princípios Fundamentais
- Resolução de problemas envolvendo Termodinâmica
- Resolução de problemas envolvendo Fenômenos de Transportes
- Resolução de problemas envolvendo Engenharia das Reações Químicas
- Divulgação dos aplicativos Polymath e Mathcad, na forma de mini-curso, junto aos alunos e professores

Com a continuidade do trabalho, ainda serão desenvolvidas as seguintes atividades futuras:

- Pesquisa de opinião junto a professores e alunos
- Elaboração de material instrucional

4. Resultados e Discussões

4.1 Cálculo de Ponto de Bolha

O problema colocado consiste em achar a temperatura de bolha e a composição da fase vapor do sistema benzeno-tolueno, quando são fornecidas a pressão e a composição da fase líquida. Para representação do equilíbrio líquido-vapor foi utilizada a lei de Raoult, a qual somente é válida quando a fase vapor é um gás ideal e a fase líquida uma solução ideal. Um problema mais complexo será abordado no item seguinte. A Figura 1 mostra como o problema foi resolvido. Após escrever a equação de Antoine, é definida uma função da temperatura, a qual é obtida a partir do somatório das frações molares na fase vapor. O problema consiste em encontrar uma temperatura que satisfaça o somatório. O método utilizado para determinação da temperatura foi o de Newton e a derivada da função é calculada internamente. A composição da fase vapor é calculada com o valor da temperatura encontrada. Uma das grandes vantagens do Mathcad é o fato das equações serem escritas no computador da mesma forma que se encontram nos livros, inclusive a fórmula de Newton. Observa-se na Figura 1 que nenhuma programação foi necessária para obtenção do resultado. O tempo economizado com a programação pode, e deve, ser utilizado pelo aluno para o entendimento físico do problema. Uma avaliação interessante é observar como a temperatura de bolha varia com a composição do líquido, bem como com a pressão.

Ponto de Bolha Benzeno(1)/Tolueno(2)

$$Psat1(T) := 10^{6.90565-\frac{1211.033}{T+220.79}}$$

$$Psat2(T) := 10^{6.95334-\frac{1343.943}{T+219.377}}$$

$P := 760$ $x1 := 0.05$

Função a ser... $F(T) := \frac{Psat1(T)}{P}x1 + \frac{Psat2(T)}{P}\cdot(1 - x1) - 1$

Derivada de F(T) $dF(T) := \frac{d}{dT}F(T)$

Estimativa inicial $Tb_0 := 80$

Número de iterações $k := 0, 1 .. 20$

Fórmula de Newton para T $Tb_{k+1} := Tb_k - \frac{F(Tb_k)}{dF(Tb_k)}$

Raiz Encontrada de F(T) $Tb := 108.319$

Composição da fase vapor $y1 := \frac{Psat1(Tb)}{P}\cdot x1$

$y1 = 0.111$

$Tb =$

	0
0	80
1	121.557
2	110.006
3	108.35
4	108.319
5	108.319
6	108.319
7	108.319
8	108.319
9	108.319
10	108.319
11	108.319
12	108.319
13	108.319
14	108.319
15	108.319

Figura 1 – Cálculo de ponto de bolha.

4.2 Balanço de Massa com Reação Química

O objetivo do exemplo apresentado é obter a vazão e a composição de todas as correntes

do processo de extração apresentado na Figura 2. Foi utilizado um solve block para resolver o sistema algébrico de equações, originado através dos balanços de massa em cada equipamento. São consideradas incógnitas todas as variáveis que aparecem no fluxograma da Figura 2.

Após estimativa inicial para as incógnitas, inicia-se o solve block. Dentro do solve block são colocados os balanços de massa e as restrições do sistema algébrico. As restrições incluem todos os dados fornecidos pelo enunciado do problema, ou seja, as variáveis que estão especificadas. Os balanços de massa foram escritos de forma explícita como uma forma de chamar a atenção do leitor, pois trata-se do ponto mais importante do problema. Acreditamos que da maneira como o problema foi colocado, fica mais claro para o aluno realizar a contagem do número de equações disponíveis e o número de variáveis a serem especificadas. Pode-se observar que neste exemplo foi utilizado as unidades para a vazão (mol/hr). Esta é outra vantagem do Mathcad, pois pode evitar que o aluno cometa erros devido a não padronização de unidades nos cálculos. Por exemplo, o aluno pode definir uma vazão em mol/hr e outra em mol/s e trabalhar normalmente, pois o Mathcad converte tudo para uma mesma unidade.

Reações:

$C2H6 \rightarrow C2H4 + H2$

$C2H6 \rightarrow C2H2 + 2H2$

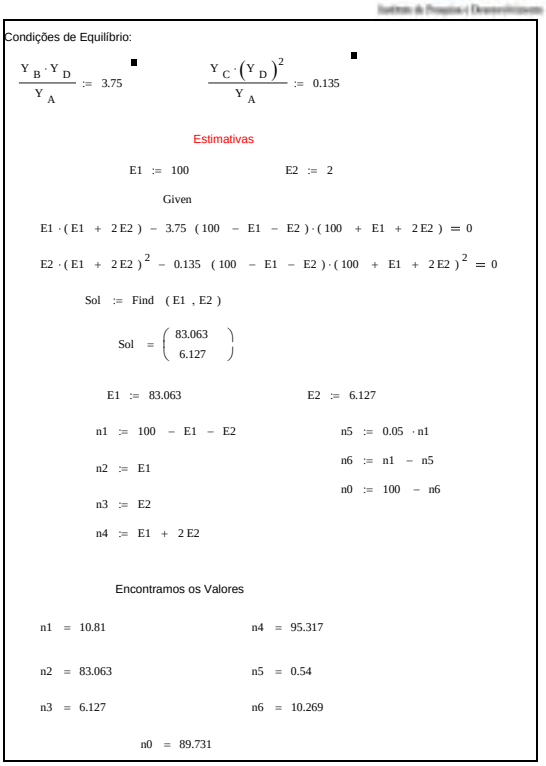

Figura 2 – Balanço de massa.

4.3 Interpretação de Dados de um Reator

O método diferencial de análise de dados experimentais avalia dados cinéticos de uma reação e todos os termos da equação de velocidade, inclusive a derivada da concentração com relação ao tempo. Com os experimentos, obtemos dados de concentração e tempo. A partir destes dados é possível construir o gráfico de concentração versus tempo. O método diferencial de análise se baseia nestes gráficos para determinar as constantes de velocidade e as possíveis ordens da reação. Geralmente este método é feito através de gráficos traçados em papel milimetrado e cálculos das derivadas da concentração com relação ao tempo, traçando-se retas tangente em cada um dos pontos experimentais. Com uma ferramenta apropriada estamos propondo aqui que ao invés de traçar um gráfico em papel milimetrado, se faça uma regressão não linear e encontre-se a curva que descreve os dados experimentais e a partir dela se obtenha as derivadas da concentração com relação tempo, que nos darão as informações sobre constantes de velocidade e ordem da reação. O problema proposto ainda consiste em descobrir os parâmetro da equação de Michaelis-Menten.

Inicialmente é feito a declaração de todos os dados experimentais, depois plotamos o gráfico da concentração versus o tempo. A partir desse gráfico propomos um polinômio de segundo grau como sendo a equação que descreve a curva experimental. Através do comando genfit encontramos o parâmetros desse polinômio. De posse da função de concentração podemos calcular as derivadas com relação ao tempo. Estas derivadas representam as velocidades de reação em cada ponto experimental. Plotando-se o gráfico de velocidade versus concentração obtemos a curva características. E para alinhar a curva usamos a equação de Michaelis-Menten que nos forneceu os dados de constante de velocidade e ordem da reação. Para descobrir os parâmetros da equação de Michaelis-Menten, também foi feito uma regressão não linear através do comando *genfit*. A figura 3 descreve a resolução deste problema de Engenharia das Reações Químicas.

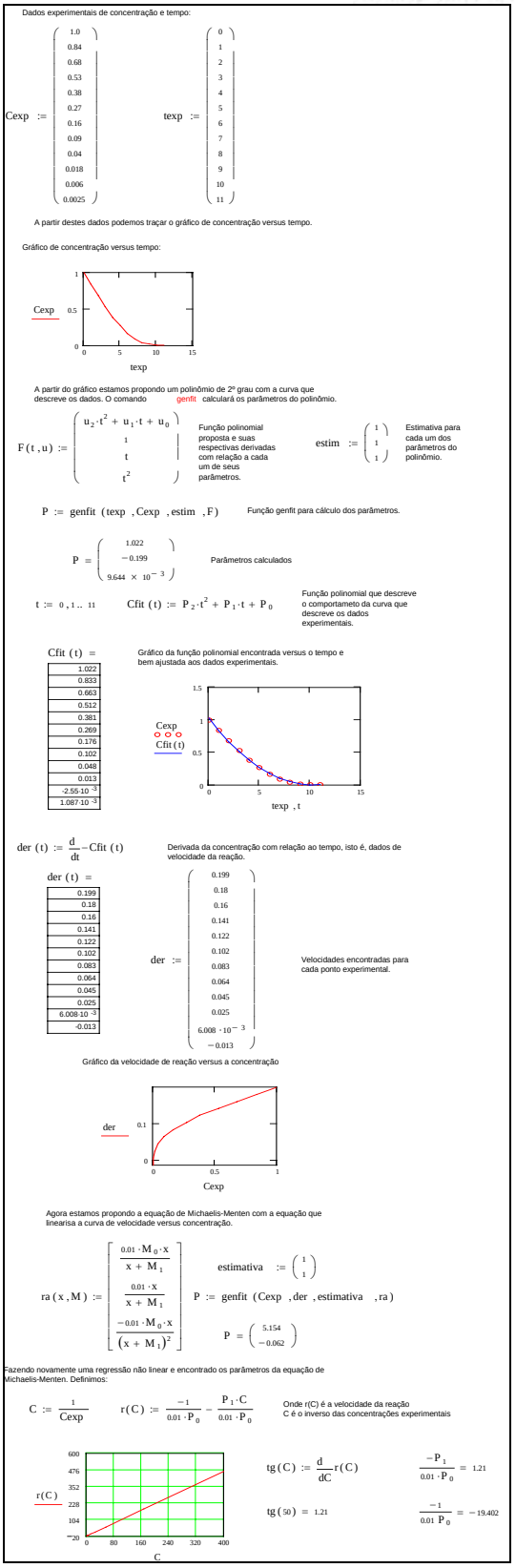

Figura 3 – Regressão não linear

5. Conclusões

Foi apresentada uma proposta para utilização de aplicativos do tipo Solve-Package nos cursos de graduação em engenharia química. Pelos exemplos abordados, mostramos que é possível a utilização de um aplicativo desta natureza em todas as etapas de um curso de graduação. O Mathcad mostrou-se uma ferramenta poderosa para auxílio na tarefa de ensinar. A introdução destes aplicativos, realizada de forma racional, é benéfica na formação do profissional. A capacidade de criticar, analisar e propor modificação serão pontos fortes daqueles que fizerem utilização destas ferramentas. Através de exemplos que envolvem o uso de funções embutidas e aplicações onde é empregado algum tipo de programação, fica claro que o professor pode optar por uma das alternativas ou utiliza-las simultaneamente.

6. Referências Bibliográficas

Almeida, A. Diretrizes Curriculares: Delineando Novos Paradigmas – O Caso da Engenharia Química, Revista de Ensino de Engenharia, 1998.

Brito, R.P., Vasconcelos, L.G.S e Simões, V. Uso de Computação Algébrica nos Cursos de Graduação em Engenharia Química, Revista de Ensino de Engenharia,, 2001.

deNevers, N. and Seader, J.D. Helping Students to Develop a Critical Attitude Towards Chemical Process Calculation, Chem. Engr. Ed., 1992.

Fogler, H.S. Elements of Chemical Reactions Engineering, 2nd ed. Prentice Hall, 1992.

Jones, J.B. The Non-Use of Computers in Undergraduate Engineering Science Courses, J. Engr. Ed., 1998.

Ministério da Educação e Cultura (MEC), Lei de Diretrizes e Base da Educação Nacional, Lei No 9394/96.