COBENGE 2003

CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA – UM RELATO SOBRE AS APLICAÇÕES ADOTADAS

Viviana Cocco Mariani - mariani@rla01.pucpr.br
Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Departamento de Engenharia Mecânica
Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho
81611-970 - Curitiba, PR, Brasil

Emerson Martim – martim@rla01.pucpr.br
Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Departamento de Engenharia Química
Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho
81611-970 - Curitiba, PR, Brasil

Resumo: *O processo de ensino-aprendizagem deve estar em constante atualização. São inúmeras as alternativas, isto é, possibilidades para que isto ocorra, contudo o professor e aluno têm papel fundamental neste processo. Destina-se a ambos buscarem novos problemas para que as aulas sejam mais dinâmicas e aplicadas. Com este intuito na disciplina de Matemática Aplicada à Engenharia Química II na Pontifícia Universidade Católica do Paraná são apresentadas várias aplicações aos alunos envolvendo os conteúdos da disciplina. O presente artigo descreve algumas destas aplicações e apresenta a solução numérica obtida através da utilização dos softwares Excel, Maple ou Matlab, em aulas de laboratório computacional. Este artigo enfatiza a importância das aplicações, que se preparadas convenientemente são um recurso pedagógico eficaz para a construção do conhecimento.*

Palavras-chave: *softwares, Engenharia Química, Ensino Aplicado.*

1. INTRODUÇÃO

O conhecimento é um processo de elaboração subjetivo e individual. O processo de aprender exige raciocínio, possibilidade de atuação e correlação com conhecimentos prévios. Lembrando da frase de Guimarães Rosa: "*Mestre não é quem sempre ensina, mas quem, de repente, aprende*", nota-se que é necessário envolver o aluno na construção do conhecimento, estimulando-o a participar, admitindo as suas dúvidas e respeitando o tempo do próprio aluno.

O uso das aplicações no ensino tem o objetivo de fazer com que os alunos gostem de aprender os conteúdos da disciplina, mudando a rotina da classe e despertando o interesse pelo desconhecido. A apresentação de algumas aplicações, e respectivos resultados obtidos usando os softwares citados no início deste artigo, serve para ilustrar a importância destas atividades em sala de aula.

Inúmeras pesquisas e trabalhos indicam que o uso do laboratório computacional pode se tornar um grande aliado para o desenvolvimento cognitivo dos alunos, viabilizando a realização de novos tipos de atividades e de novas formas de pensar e agir (Balacheff e Kaput, 1997). Entretanto, apesar das pesquisas enfatizarem a grande potencialidade do ambiente computacional, este potencial ainda não tem sido devidamente explorado e integrado ao cotidiano da prática escolar, ficando assim geralmente restrito a discussões teóricas e acadêmicas.

Os laboratórios computacionais apresentam-se como ferramentas de grande potencial frente aos obstáculos inerentes ao processo de aprendizagem. Segundo Hebenstreint (1987): *"O computador permite criar um novo tipo de objeto - os objetos 'concreto-abstratos'. Concretos porque existem na tela do computador e podem ser manipulados; abstratos por se tratarem de realizações feitas a partir de construções mentais*." Mesmo quando existe a possibilidade de ações sobre objetos físicos, a transposição destes objetos para "aplicativos computacionais" também apresenta vantagens: é a possibilidade de realizar grande variedade de experimentos em pouco tempo, diferentemente da manipulação concreta. É a soberania da ação favorecendo o processo de investigação e abstração, com a conseqüente construção de conjecturas. Os aplicativos computacionais, segundo Gravina e Santarosa (1998), devem:

i) Oferecer instâncias físicas de tal forma que a representação tenha caráter dinâmico, tendo reflexos nos processos cognitivos, particularmente no que diz respeito às concretizações mentais. Um mesmo objeto matemático passa a ter representação mutável, diferentemente da representação estática do tipo "lápis e papel" ou "giz e quadro-negro". O dinamismo é obtido através de manipulação direta sobre as representações que se apresentam na tela do computador. Por exemplo: em geometria são os elementos de um desenho que são manipuláveis; no estudo de funções são objetos manipuláveis que descrevem relação de crescimento e/ou decrescimento entre as variáveis.

ii) Ser interativos, entende-se aqui a dinâmica entre ações do aluno e reações do ambiente, e no sentido muito além daquele em que a reação do sistema é simplesmente informar sobre "acerto" ou "erro" frente a ação do aluno, não fornecendo nenhuma contribuição ao processo de aprendizagem. Na interatividade que está se pensando, o sistema oferece suporte as concretizações e ações mentais do aluno; isto se materializa na representação dos objetos matemáticos na tela do computador e na possibilidade de manipular estes objetos via sua representação.

O suporte para concretizações e ações mentais depende de características dos "aplicativos computacionais" empregados. A título de ilustração alguns aplicativos, Maple, Matlab e

Excel, são utilizados na próxima seção para resolver as aplicações apresentadas em sala de aula e escolhidas para ilustrar o presente artigo.

2. APLICAÇÕES

Nesta seção são apresentados e resolvidos quatro dos problemas propostos (organizados em questões) para os alunos, os quais envolvem a resolução de sistemas de equações lineares, interpolação e zeros de funções.

Questão 1 - A pressão de vapor de uma substância em função da temperatura ou a temperatura em função da pressão de vapor pode ser dada através de várias correlações. Uma das correlações bastante simples é a equação de Antoine, "equação (1)", que apresenta 3 constantes empíricas (A, B, C), além da temperatura e pressão de saturação (Smith e Van Ness, 1980).

$$\ln(P^{sat}) = A - \frac{B}{T+C} \tag{1}$$

Existem correlações mais complexas que relacionam pressão de vapor de uma substância e temperatura. Uma destas correlações é apresentada na "equação (2)",

$$\ln(P^{sat}) = A + \frac{B}{T+C} + D\ln(T) + ET^{F} \tag{2}$$

Na equação (1), se for fornecida a pressão, pode-se obter diretamente a temperatura. No entanto, na "equação (2)", isso não é possível, sendo necessário o uso de um dos métodos de zero de funções para encontrar a temperatura.

Para a pressão em [kPa] e temperatura em Kelvin [K], as constantes da "equação (2)" para a água são apresentados na "Tabela 1", (Hysis, 2000).

Tabela 1 – Constantes da equação 2.

Substância	A	B	C	D	E	F
Água	$6{,}59278.10^{1}$	$-7{,}22753.10^{3}$	0	$-7{,}17695.10^{0}$	$4{,}031.10^{-6}$	2

Calcule a temperatura para a qual a pressão de vapor d´água vale 760mmHg.

a) Usando a equação de Antoine (constantes para a água: A= 18,3036, B= 3816,44; C= -46,13), com a temperatura em K e a pressão em mmHg.

b) Usando a "equação (2)" com as constantes da equação para a água fornecida na "Tabela 1", pelos métodos da bisseção e do ponto fixo.

A solução usando a equação de Antoine é:

T = (18,3036*-46,13 – ln(760)*-46,13 – 3816,44)/(ln(760)-18,3036) = 373,1521K

A solução obtida com o método do ponto fixo, usando o software Excel, é apresentada na "Tabela 2". O resultado é obtido com 63 iterações, com uma estimativa inicial T = 500 K e o valor na convergência da temperatura é T = 373,1494 K, semelhante ao resultado obtido usando a equação de Antoine. Para este valor de temperatura a pressão é P = 101,325 kPa.

Tabela 2 – Método do ponto fixo.

k	T_k	$G(T_k)$	Erro
1	500	475,2743	-20,004971
⋮	⋮	⋮	⋮
63	373,1494	373,1494	-1,815E-05

A solução numérica através do método da bisseção é apresentada na “Tabela 3”, usando um programa implementado no Excel com estimativa inicial: a = 100 e b = 800. A solução é a mesma obtida pelo método do ponto fixo, exceto que a convergência neste último método foi mais rápida que no método do ponto fixo.

Tabela 3 – Método da bisseção.

k	A	b	T_k	P(a)	P(b)	$P(T_k)$	$P(a)*P(T_k)$	Erro
1	100	800	450	-43,9766	6,87977	2,2188	-97,5754	700
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
36	373,149	373,149	373,149	-3,4E-10	2,79E-11	-1,5E-10	5,16E-20	5,09E-9

Os resultados em sala de aula são apresentados em uma planilha, e indicam que o valor encontrado por Antoine apresenta-se muito próximo do valor encontrado pela equação mais complexa. Outra conclusão obtida, é que o método da bisseção apresentou convergência mais rápida que o método do ponto fixo. Para resolver o problema, usando o método do ponto fixo ou o método da bisseção, feitos no programa Excel, pode-se substituir a pressão por outro valor. Caso seja outra substância química, basta alterar os valores para as constantes da substância em questão, o que mostra a praticidade do programa Excel.

Questão 2 - O xileno, o estireno, o tolueno e o benzeno são separados em um arranjo de colunas de destilação, conforme apresentado na “Figura 1”, com as respectivas composições mássicas das correntes de saída (Cutlip e Shachan, 1999). Monte os balanços de massa para cada um dos componentes. A partir dos sistemas de equações obtidos, calcule todas as vazões e as composições desconhecidas.

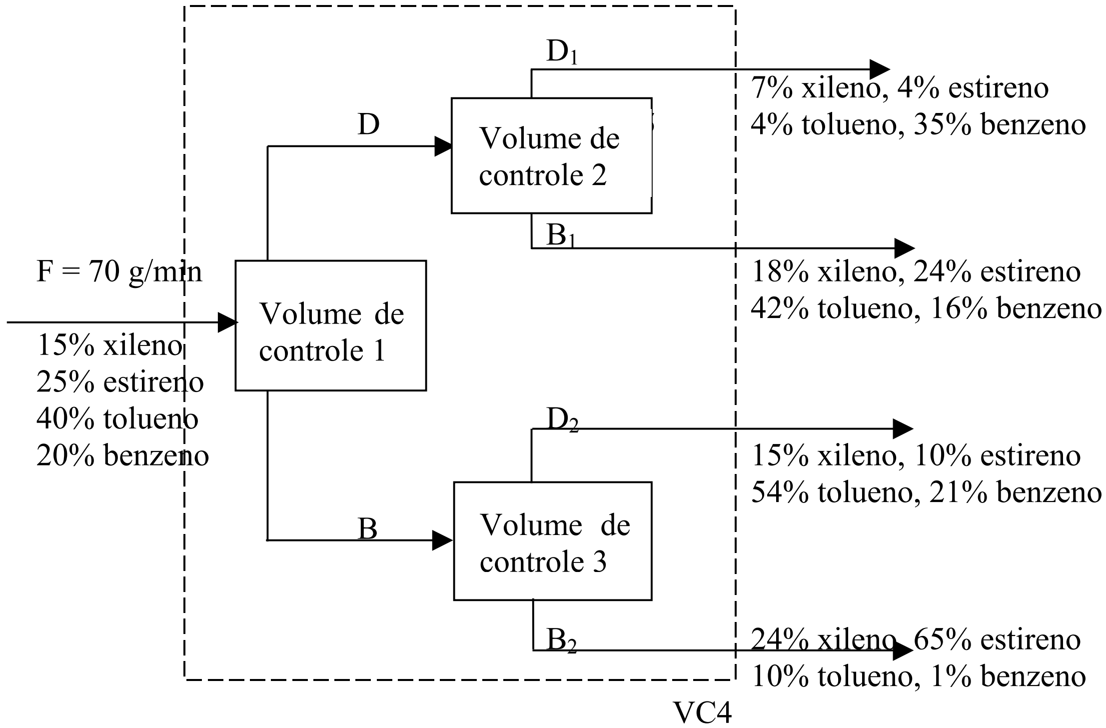

Figura 1 – Colunas de destilação em seqüência.

O processo apresentado na "Figura 1" é contínuo e estacionário, como não há reação então o que sai de uma unidade de processo (volume de controle) é igual ao que entra na outra unidade de processo, resultando:

As variáveis desconhecidas em cada volume de controle são apresentadas a seguir:

$VC4 = (D_1, D_2, B_1, B_2)$ $\qquad$ $VC3 = (D_2, B_2, B, (y)_B)$
$VC2 = (D_1, B_1, D, (y)_D)$ $\qquad$ $VC1 = (D, B, (y)_D, (y)_B) \Rightarrow 2(y)_D, 2(y)_B$

O quarto volume de controle (tracejado na "Figura 1"), VC4, é o volume de controle global, $(y)_D$ e $(y)_C$ são as composições de D e C, respectivamente. Em cada um dos volumes de controle (as unidades de processo e o processo global) deve-se identificar o número de incógnitas desconhecidas. Ao fazer esta análise observa-se que todos os volumes apresentam quatro incógnitas, no entanto escolhendo VC1, VC2 ou VC3 tem-se um sistema não-linear, devido às composições. Assim, o balanço de massa deve começar no VC4, tendo:

Global: $70 = D_1 + D_2 + B_1 + B_2$

Para o xileno: $0,15*70 = 0,07D_1 + 0,18B_1 + 0,15D_2 + 0,24B_2$
Para o estireno: $0,25*70 = 0,04D_1 + 0,24B_1 + 0,1D_2 + 0,65B_2$
Para o tolueno: $0,4*70 = 0,54D_1 + 0,42B_1 + 0,54D_2 + 0,1B_2$
Para o benzeno: $0,2*70 = 0,35D_1 + 0,16B_1 + 0,21D_2 + 0,01B_2$

Assim temos um sistema formado por quatro equações e quatro incógnitas:

$$\begin{bmatrix} 0,07 & 0,18 & 0,15 & 0,24 \\ 0,04 & 0,24 & 0,10 & 0,65 \\ 0,54 & 0,42 & 0,54 & 0,10 \\ 0,35 & 0,16 & 0,21 & 0,01 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_1 \\ B_1 \\ D_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10,5 \\ 17,5 \\ 28,0 \\ 14,0 \end{bmatrix} \qquad (3)$$

que quando resolvido pelo Matlab através do comando linsolve(A,b) fornece a solução: $[105/4 \quad 35/2 \quad 35/4 \quad 35/2]^T = [26,25 \quad 17,50 \quad 8,75 \quad 17,50]^T$ para B_1, D_1, B_2 e D_2, respectivamente. Como $D = D_1 + B_1 = 43,75$ e $B = D_2 + B_2 = 26,25$. Para o VC3 tem-se $B*(y)_B = D_2 + B_2$ e para cada elemento:

Para o xileno: $26,25 = 0,15D_2 + 0,24B_2$
Para o estireno: $26,25(y_e)_B = 0,10D_2 + 0,65B_2$
Para o tolueno: $26,25(y_t)_B = 0,54D_2 + 0,10B_2$
Para o benzeno: $26,25(y_b)_B = 0,21D_2 + 0,01B_2$

Como as variáveis D_2 e B_2 são conhecidas tem-se para a composição de B os valores: $(y_x)_B = 0,21$; $(y_e)_B = 0,467$; $(y_t)_B = 0,247$; $(y_b)_B = 0,077$. Utilizando o VC2 obtém os valores para a composição de D, ou seja, $(y_x)_D = 0,114$; $(y_e)_D = 0,12$; $(y_t)_D = 0,492$; $(y_b)_D = 0,274$.

Neste problema é apresentada a solução para o sistema linear usando apenas o cálculo da matriz inversa, contudo no laboratório computacional os demais métodos numéricos para solução de sistemas lineares, tais como: Eliminação de Gauss, Eliminação de Gauss-Jordan, Decomposição LU e Fatoração de Cholesky (Faires e Burden, 2000), podem ser empregados. Os demais métodos apresentam soluções semelhantes a menos de erros de arredondamento, e os testes podem ser feitos pelos leitores.

Questão 3 – A reação de $HI_{(g)} \rightarrow H_{2(g)} + I_{2(g)}$ foi estudada a 600K, com os dados obtidos apresentados na "Tabela 4".

Tabela 4 – Concentração de HI em função do tempo.

Tempo, h	0	1	2	3	4	5
[HI], M	3,95	3,73	3,54	3,37	3,22	3,08

Obtenha a concentração de HI após 1,8 horas de reação usando um polinômio de 2º grau e de 5º grau.

A terceira questão envolve o conteúdo de interpolação. Para resolvê-la usou-se o comando "interp" presente no software Maple. As soluções obtidas para HI através do polinômio de 2º e 5º graus, respectivamente, são apresentadas a seguir.

```
> px:=[0,1,2];
> py:=[3.95,3.73,3.54];
> p:=interp(px,py,x);
> p:=subs(x=1.8,p);
```

px := [0, 1, 2]

py := [3.95, 3.73, 3.54]

$p := 0{,}015x^2 - 0{,}235x + 3{,}95$

p := 3.575600000

```
> px:=[0,1,2,3,4,5];
> py:=[3.95,3.73,3.54,3.37,3.22,3.08];
> p:=interp(px,py,x);
> p := subs(x=1.8,p);
```

px := [0, 1, 2, 3, 4, 5]

py := [3.95, 3.73, 3.54, 3.37, 3.22, 3.08]

$p := - 0{,}0001667x^5 + 0{,}002083334x^4 - 0{,}01x^3 + 0{,}03291666668x^2 - 0{,}2448333x + 3{,}95$

p := 3,576350720

Assim, o valor obtido para a concentração de HI após 1,8 horas é aproximadamente 3,6M.

Questão 4 – Um vinicultor produz vinho através de uma mistura de três vinhos, a fim de obter os teores desejados de álcool e açúcar. Quanto deve ser usado de cada vinho para se obter a mistura, conforme dados apresentados na "Tabela 5".

Tabela 5 – Tipos de vinhos.

Discriminação	% álcool	% açúcar
Vinho A	14,6	0,2
Vinho B	16,7	1,0
Vinho C	17,0	12,0
Mistura	16,0	3,0

Seja x_1 a quantidade (%) de vinho A, x_2 a quantidade (%) de vinho B, x_3 a quantidade (%) de vinho C, logo o sistema resultante é:

Açúcar:	$3 = 0,2\ x_1 + x_2 + 12\ x_3$
Álcool:	$16 = 14,6x_1 + 16,7x_2 + 17x_3$
Restante (água, uva, etc.):	$81 = 85,2\ x_1 + 82,3\ x_2 + 71x_3$

Usando a matriz aumentada Ab

$$Ab = \begin{bmatrix} 0,2 & 1 & 12 & 3 \\ 14,6 & 16,7 & 17 & 16 \\ 85,2 & 82,3 & 71 & 81 \end{bmatrix} \tag{4}$$

e resolvendo pelo método de eliminação de Gauss (Faires e Burden, 2000) (implementado em Matlab e apresentado em sala de aula), a solução do sistema é $x_1 = 0,36307961504812$; $x_2 = 0,42869641294838$ e $x_3 = 0,20822397200350$, isto é, será usado aproximadamente 36% de vinho A, 43% de vinho B e 21% de vinho C para obter a mistura desejada.

As quatro aplicações mostram a importância do estudo de métodos numéricos para a resolução de sistemas lineares, zeros de funções e interpolação de dados, em cursos de Engenharia. Não obstante existe na literatura nacional e internacional um grande número de livros abordando estes assuntos (Penny e Lindfield, 1999; Ruggiero e Lopes, 1997).

3. CONCLUSÕES

Nos últimos anos têm aumentado a utilização de *softwares* matemáticos no ensino. Com o aumento das facilidades computacionais, os docentes não podem ignorar as influências e o impacto das ferramentas tecnológicas no processo de ensino-aprendizagem. Contudo a parcela de docentes que utilizam estas ferramentas ainda está longe de ser a adequada. De um modo geral, as facilidades e vantagens trazidas pelos aplicativos computacionais no ensino aumentam a motivação e o aprendizado, e conseqüentemente resultam num maior rendimento dos alunos.

Deve-se lembrar que os exemplos apresentados, neste artigo, utilizaram apenas uma pequena parcela dos recursos oferecidos pelo Matlab, Excel ou Maple. Muitas outras ferramentas contidas nestes aplicativos, diferentes das exploradas aqui, podem ser utilizadas em outras situações. Os procedimentos aqui apresentados podem ser utilizados nos mais diversos cursos, tais como Matemática, Engenharias e Ciência da Computação, para resolução de sistemas de equações lineares, obtenção de zeros de funções e interpolação de um conjunto de dados.

Vale ressaltar a importância da integração da disciplina de Cálculo Numérico com as disciplinas presentes no programa de Engenharia Química, tais como Fenômenos de Transporte, Química Geral, Introdução a Engenharia Química e Operações Unitárias, possibilitando que os problemas resolvidos com os softwares computacionais sejam fisicamente atrativos para os alunos. Sem dúvida, o uso do computador e de aplicativos matemáticos tem papel preponderante na aprendizagem.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BALACHEFF, N., Kaput, J. **Computer-Based Learning Environments in Mathematics**. In: Bishop A. (ed.) International Handbook in Mathematics Education. pp. 469-501. 1997.

CUTLIP, M. B., SHACHAN, M. **Problem Solving in Chemical Engineering with Numerical Methods,** Prentice Hall, 1999.

FAIRES, J. D., BURDEN, R. L. **Numerical Analysis**, 7ª ed., Brooks/Cole Pub Co, 2000.

GRAVINA, M. A., SANTAROSA, L. M., A Aprendizagem da Matemática em Ambientes Informatizados, In: IV Congresso RIBIE, **Anais**, Brasília, 1998.

HEBENSTREINT, J. **Simulation e Pédagogie, une Recontre du Troisième Type**, Gif Sur Yvette: École Superieure d'Eletricité, 1987.

PENNY, J., LINDFIELD, G. R. **Numerical Methods Using Matlab**, 2ª ed., Prentice Hall, 1999.

RUGGIERO, M. A. G., LOPES, V. L. R. **Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais**. Makron Books, 2ª ed., 1997.

The Math Works Inc. **Matlab: Versão do Estudante**, Makron Books, 1997.

SMITH, J. M., VAN NESS, H. C., **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**, 3ª ed., Guanabara Koogan, 1980.

COURSE OF CHEMICAL ENGINEERING: A STORY OF THE ADOPTED APPLICATIONS

Abstract: *The teaching-learning process must be in constant update. In this context, the alternatives are innumerable. The teacher and the students are main factors in this teaching-learning process. Education must be both conceptual and experiential. Abstract concepts are elegant and powerful, but learning is always enhanced by direct experience with software and lectures of computational laboratory. With this objective some applications to the students involving the contents of disciplines of Mathematics Applied to Chemical Engineering II of Pontifical Catholic University of Parana are presented. This paper describes some of these applications and presents the numerical solution with Excel or Maple or Matlab computational environments. This approach aims to dispense with the concept of passive theoretical learning and encourages an attitude of active education.*

Key-words: *Software, Chemical Engineering, Applied Education*