



ANÁLISE E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS PARA ENGENHARIA QUÍMICA: CONTEÚDOS DISPONÍVEIS NA FORMA DE VÍDEOS ON-LINE

Luizildo Pitol Filho – luizildo@univali.br
Universidade do Vale do Itajaí, Centro de Ciências Tecnológicas da Terra e do Mar
Rua Uruguai, nº 458 – Centro
88302-202 – Itajaí – Santa Catarina

Cassio Felipe Groh – cassio_groh@hotmail.com
Universidade do Vale do Itajaí, Centro de Ciências Tecnológicas da Terra e do Mar
Uruguai, nº 458 – Centro
88302-202 – Itajaí – Santa Catarina

Resumo: *A disciplina de 'Análise e Simulação de Processos', do curso de Engenharia Química, requer que o estudante tenha assimilado diversos assuntos de disciplinas anteriores de conhecimento específico, tais como Termodinâmica, Balanço de Massa e Energia e Fenômenos de Transporte, de forma a escrever modelos matemáticos para processos da indústria química, para em seguida resolvê-los numericamente. As aulas presenciais, portanto, podem ser mais proveitosas se o aluno puder acessar, livremente pela internet, um resumo do que será discutido em classe. Foram produzidos vídeos curtos, de no máximo 20 minutos, em que se discutem os principais pontos a serem explanados em sala de aula, com a formulação completa de modelos matemáticos fenomenológicos representativos de diversos processos químicos clássicos, tais como reatores de mistura e tubulares, ou ainda unidades de separação rápida ou colunas cromatográficas. Em vídeos posteriores, os modelos foram resolvidos analítica e numericamente, possibilitando aos alunos verificarem a convergência de seus próprios algoritmos.*

Palavras-chave: Modelos matemáticos; Sala de aula invertida; Métodos numéricos

1. INTRODUÇÃO

A disciplina ‘Análise e Simulação de Processos’ é ministrada na 7ª fase do curso de Engenharia Química da Universidade do Vale do Itajaí (UNIVALI) e contém em sua ementa, entre outros tópicos, a modelagem de processos químicos nos regimes permanente e transiente. A localização desta disciplina nesta etapa da formação discente não é aleatória, já que, para compreender os fundamentos e aproveitá-la ao máximo, o acadêmico já deve manejar com desenvoltura conceitos dos fenômenos de transferência, das operações unitárias, de balanços materiais e de energia e também de cinética química e de termodinâmica. A metodologia adotada na disciplina é a construção, em

Organização



UDESC
UNIVERSIDADE
DO ESTADO DE
SANTA CATARINA



Promoção





sala de aula, de modelos fenomenológicos representativos de diferentes processos (reatores, biorreatores, colunas cromatográficas, entre outros), sendo que cabe aos alunos, divididos em grupos, elaborarem e resolverem modelos de processos que ocorrem no cotidiano e que também podem ser descritos através de balanços e equações constitutivas. Como apoios às aulas presenciais elaboraram-se vídeos curtos, de no máximo vinte minutos, para permitir que o aluno acesse previamente os conteúdos básicos a serem discutidos em classe. Esta iniciativa se baseia na metodologia de sala de aula invertida (*blended learning*), em que os alunos têm os conteúdos à sua disposição em diversas plataformas móveis e trabalham presencialmente divididos em grupos, sob a orientação do professor (VALENTE, 2014). Os vídeos tratam de diversos conceitos fundamentais, tais como balanços de massa, de energia e de espécies químicas, introduzindo processos mais avançados, tais como separação por colunas cromatográficas, e, em alguns casos, ainda apresentam a resolução, quer por métodos analíticos, quer por métodos numéricos, de cada processo.

2. ELABORAÇÃO DOS VÍDEOS E DESCRIÇÃO DO CONTEÚDO

Os vídeos foram filmados em uma sala de aula, usando um telefone celular com sistema operacional *Android*, em que os conteúdos estavam previamente escritos em um quadro branco. O professor explicava a elaboração completa do modelo, desde um esboço inicial, enumerando hipóteses, discutindo os balanços representativos do processo e as equações constitutivas. Finalmente, apresentavam-se as equações em sua forma final, acompanhadas das condições iniciais e de contorno, se necessárias. Os vídeos foram editados no *Windows Movie Maker* e disponibilizados em um canal no *Youtube*. A metodologia foi aplicada no semestre 2017.1, sendo que havia 24 alunos matriculados na disciplina.

O Quadro 1, a seguir, relaciona cada um dos vídeos veiculados.

Quadro 1 - Tópicos dos vídeos

	Título
1	Introdução aos modelos matemáticos
2	Balanços de massa e energia em um tanque
3	Balanços de massa, energia e molar em um reator de mistura
4	Reator tubular
5	Biorreatores
6	Flash: nem o Gordon, nem do da DC!
7	Tanque encamisado
8	Reator + Fermentador + Membrana + Reciclo
9	Introdução às variáveis adimensionais
10	Análise paramétrica
11	Resolução analítica de um CSTR
12	Resolução numérica de um CSTR
13	Resolução numérica por diferenças finitas
14	Transporte por convecção e difusão
15	Aquecimento por banho maria

Organização



Promoção





As seções a seguir dedicam-se a comentar os tópicos discutidos em cada um dos vídeos relacionados no Quadro 1.

2.1. Introdução aos modelos matemáticos

Neste vídeo (<https://www.youtube.com/watch?v=cadmm7UZ33w>), de 08'40" de duração, discutem-se as etapas para elaboração de um modelo matemático determinístico (SEBORG *et al*, 2010), que incluem:

- Esboço do processo;
- Enumeração das hipóteses;
- Construção dos balanços de massa, energia e de espécie química;
- Seleção de equações constitutivas;
- Identificação de variáveis independentes, dependentes e parâmetros;
- Estabelecimento de condições iniciais e de contorno.

Na aula introdutória da disciplina, mencionou-se o vídeo, comentando brevemente em que processos químicos os modelos matemáticos poderiam ser úteis, enfatizando-se como podem servir para compreender melhor resultados obtidos em laboratório ou em escala piloto, prestando-se ainda como ferramenta para a otimização dos processos químicos. Relacionou-se o conteúdo com disciplinas ministradas em outras fases da grade curricular, tais como Balanço de Massa e Energia, Fenômenos de Transporte, Operações Unitárias ou Termodinâmica.

2.2. Balanços de massa e energia em um tanque

O primeiro vídeo sobre modelagem propriamente dita (<https://www.youtube.com/watch?v=kBHgODJY48k>), de 09'44" de duração, descreve um tanque cilíndrico, em que há duas correntes materiais (uma de entrada e outra de saída), que também podem aportar energia térmica ao sistema (WELTY *et al*, 2008). Discute-se a hipótese de tanque perfeitamente agitado, em que uma amostra retirada em qualquer posição do tanque apresenta a mesma composição e temperatura do que qualquer outra, inclusive na saída. Outras hipóteses discutidas referem-se às propriedades termofísicas admitidas como constantes e à eventual transferência de calor e trabalho através das fronteiras do sistema. Escrevem-se os balanços de massa e energia no regime transiente (apresentando os termos de acúmulo, entrada, saída e geração), sendo que posteriormente se simplificam as equações para regime permanente. O volume de controle utilizado é o próprio tanque.

2.3. Balanços de massa, energia e molar em um reator de mistura

Este vídeo (<https://www.youtube.com/watch?v=4XUnL9E69g>), de 15' de duração, marca o início do estudo de reações químicas, para um reator de mistura, ou *Continuous Stirred Tank Reactor* (CSTR). Considera-se um tanque perfeitamente agitado, alimentado por uma corrente contendo um reagente genérico A, que sofre uma reação de primeira ordem com constante cinética independente da temperatura, convertendo-se no produto B. Admite-se que o reator seja perfeitamente agitado (SEBORG *et al*, 2010), que o tanque não receba calor do meio externo, que as propriedades termofísicas sejam constantes, entre outras hipóteses. O modelo transiente, que engloba os termos de acúmulo, entrada, saída, e geração ou consumo, leva em conta que as vazões de entrada

Organização



Promoção





e saída sejam diferentes, que cada vazão tenha um aporte de energia térmica e enfatiza-se a taxa de reação, com o eventual calor de reação. Considera-se que o volume de controle seja o próprio volume de líquido onde ocorre a reação química.

2.4. Reator tubular

Ao contrário do que ocorre em um CSTR, em um reator tubular onde ocorre fluxo empistonado (*Plug Flow Reactor*, PFR) as espécies químicas experimentam variações na composição ao longo do reator (FOGLER, 2011). Neste vídeo (<https://www.youtube.com/watch?v=UN51D6EFpDY>), de 15' de duração, o balanço de cada espécie química é feito em um volume de controle, cuja área é a própria seção transversal do reator e cujo volume é um comprimento infinitesimal. Dentre as hipóteses, além de admitir propriedades termofísicas constantes e sistema adiabático, assume-se que o fluxo seja empistonado, ou seja, tão turbulento que não há gradientes radiais de velocidade, temperatura ou concentrações.

2.5. Biorreatores

O vídeo de biorreatores (<https://www.youtube.com/watch?v=WkawliwnILLI>), com 11'51" de duração, leva em consideração uma reação de fermentação em um reator de mistura perfeitamente agitado, em que um microorganismo cresce a uma determinada velocidade específica de crescimento, quando devidamente alimentado por um substrato qualquer, gerando uma quantidade de produtos (SCHMIDELL *et al*, 2008). Discutem-se os fatores de conversão de substrato em microorganismo e substrato em produto. Fala-se brevemente sobre os tipos de biorreatores: batelada, batelada alimentada e contínuo.

2.6. Flash! Nem o Gordon, nem o da DC!

Este vídeo (<https://www.youtube.com/watch?v=qVzkBeMn7eg>), de 13'23" de duração, cujo título alude a personagens fictícios da cultura pop, trata de unidades de separação rápida, também conhecidas como *flash*, em que uma corrente com uma mistura de componentes é separada em uma fase líquida (mais rica nos componentes menos voláteis) e uma fase vapor (mais rica nos componentes mais voláteis). A concentração de equilíbrio na fase vapor de cada um destes componentes é modelada de acordo com a Lei de Raoult (KORETSKY, 2004), sendo que, para este modelo, se introduz um coeficiente de transferência de massa para cada componente, que deve ser extraído a partir de correlações envolvendo os números adimensionais de Sherwood, Schmidt e Reynolds (WELTY *et al*, 2008).

2.7. Tanque encamisado

O vídeo sobre tanque encamisado, com duração de 12', considera a existência de três volumes de controle (<https://www.youtube.com/watch?v=4y8PXOSMPtM>): um tanque onde ocorre uma reação química, a camisa do tanque e a parede que separa estes dois sistemas. Apresentam-se os balanços de energia, admitindo-se que tanto o tanque quanto a camisa são perfeitamente agitados, e também se leva em consideração a condução de calor através da parede que separa o reator da camisa. Para tanto, derivou-se um balanço de energia com base na equação geral da difusão de calor em coordenadas cilíndricas (ÇENGEL & GHAJAR, 2012), sendo que a camisa foi modelada de acordo com estratégias consolidadas na literatura (SEBORG *et al*, 2010).

Organização



UDESC
UNIVERSIDADE
DO ESTADO DE
SANTA CATARINA



Promoção





2.8. Reator + fermentador + membrana + reciclo

Atendendo à demanda feita nas classes presenciais, elaborou-se um modelo com diversos volumes de controle, sendo que todos estavam conectados entre si. Uma reação ocorria em um tanque perfeitamente agitado, sendo que o produto desta reação migrava para um fermentador. A corrente de fermentado seguia à uma unidade de filtração por membranas e parte dos reagentes retornava ao reator através de um reciclo (HIMMELBLAU & RIGGS, 2014). Na modelagem da separação por membranas, introduziu-se o conceito de permeabilidade (MULDER, 1996). O vídeo está disponível em <https://www.youtube.com/watch?v=WMzC7xoIPU>, e tem 14'22" de duração.

2.9. Introdução às variáveis adimensionais

É inegável que, na modelagem de sistemas químicos, o uso de variáveis adimensionais permite que um número reduzido de simulações reproduza um conjunto expressivo de situações. O vídeo (<https://www.youtube.com/watch?v=JEhg168Jpxg>), de 11'09" de duração, apresenta um modelo para uma coluna cromatográfica, em que um componente se distribui entre uma fase móvel e uma fase estacionária, transportando-se através da coluna por convecção e por dispersão axial. A isoterma de Langmuir é utilizada para modelar a adsorção do componente na fase estacionária. Introduzem-se variáveis adimensionais de tempo, de posição e a análise da relação entre os efeitos convectivos e os efeitos de dispersão é feita através do número adimensional de Peclet mássico (WELTY *et al*, 2008, RODRIGUES *et al*, 2012).

2.10. Análise paramétrica

Para otimizar um processo, pode-se partir para uma análise paramétrica, em que se verifica o efeito sobre uma variável quando um parâmetro sofre variações significativas. Para um CSTR (<https://www.youtube.com/watch?v=gD-PgU3ZfdY>) em que ocorrem reações de primeira ordem, verificou-se o efeito do tempo de residência sobre as concentrações de reagentes e produtos. Os balanços molares foram escritos em termos de concentrações adimensionais, para o regime permanente e apresentaram-se gráficos com as resoluções para diversos tempos de residência. Ao final, para umas reações em série, buscou-se o tempo de residência ótimo que maximizasse a concentração de um componente. A resolução foi novamente mostrada através de gráficos e também matematicamente. O vídeo tem 11'52" de duração.

2.11. Resolução analítica de um CSTR

As equações resultantes dos balanços molares de componentes para reações de primeira ordem ocorrendo em um CSTR, podem, no estado estacionário, ser resolvidas por integração direta (<https://www.youtube.com/watch?v=0gNDMuFY8Po>) ou mesmo por Transformadas de Laplace. Discute-se quando não é possível a resolução analítica, sendo necessário utilizar métodos numéricos. O vídeo tem duração de 8'39".

2.12. Resolução numérica de um CSTR

Eventualmente, pela complexidade das equações, a resolução analítica de um CSTR não é possível (https://www.youtube.com/watch?v=HpU_XinO2dM), o que requer o uso de técnicas numéricas. Para sistemas de Equações Diferenciais Ordinárias, discutem-se os métodos de Euler e Runge-Kutta (VALLE, 2012), comparando-se a eficiência de cada um destes métodos com a resolução analítica. Comenta-se a

Organização



UDESC
UNIVERSIDADE
DO ESTADO DE
SANTA CATARINA



Promoção





importância da escolha adequada do intervalo de integração em um vídeo de 12'15".

2.13. Resolução numérica por diferenças finitas

O balanço de espécies químicas em reatores tubulares para o regime transiente acaba recaindo em um sistema de Equações Diferenciais Parciais, que pode ser resolvido, por exemplo, por diferenças finitas. Uma vez definido o número de divisões, deve-se determinar, através de um critério de convergência, qual o intervalo máximo de integração no tempo a ser utilizado, de forma a obter resultados factíveis. Neste vídeo (<https://www.youtube.com/watch?v=n00Sd-HCVt8>), de 17'38" de duração, discute-se o critério de convergência e apresentam-se as equações discretizadas para um reator tubular, onde ocorre uma reação de primeira ordem. Ao final, mostram-se os gráficos das curvas de concentração obtidas para cada componente em função do tempo para diferentes posições, até que o sistema atinja o regime permanente.

2.14. Transporte por convecção e difusão

Neste vídeo (<https://www.youtube.com/watch?v=Ny4NXV73Gfk>), com duração de 12'19", apresenta-se um modelo em que se injeta um pulso de concentração em uma tubulação, sendo que o transporte do componente se dá por convecção e difusão. O modelo se assemelha bastante ao da coluna cromatográfica discutido no vídeo 9, com a diferença de que não há uma fase estacionária. São definidas variáveis adimensionais e apresentam-se as curvas de concentração à saída da tubulação, para diferentes números de Peclet mássico, em função do tempo adimensional. Enfatiza-se que as curvas são similares às obtidas experimentalmente em cromatografia.

2.15. Aquecimento por banho maria

Finalmente, o último vídeo (https://www.youtube.com/watch?v=mYlbHFz0_ew), de 19'49", leva em consideração o aquecimento por banho maria, em que um tanque perfeitamente agitado, com parede metálica de uma determinada espessura, sujeito a uma condição inicial de temperatura, é subitamente imerso em um reservatório infinito com temperatura mais alta, promovendo o aquecimento do fluido dentro do tanque. São escritos balanços de energia no tanque e na parede, sendo que na parede utilizam-se coordenadas cilíndricas. Utilizam-se as condições de contorno de Dirichlet para expressar a troca de calor nas interfaces tanque-parede e parede-reservatório. Ao final apresentam-se as curvas de variação da temperatura do fluido contido no tanque, obtidas mediante integração numérica do conjunto de equações na forma adimensionalizada.

3. DINÂMICA EM SALA DE AULA

Antes de cada aula, os alunos eram informados sobre o vídeo que seria trabalhado em sala de aula. O professor observou que muitos dos alunos já chegavam em classe com os balanços escritos, o que facilitava a compreensão. Durante 1h30 de aula, o professor fazia uma introdução do tópico a ser estudado, revisando brevemente os conceitos vistos em disciplinas anteriores, e passava a reescrever os modelos matemáticos para cada situação proposta, e também sugerindo alterações nos modelos.

No balanço de massa para um tanque, por exemplo, procurava-se verificar como o modelo seria alterado se a vazão de saída do tanque obedecesse à Lei de Torricelli, ao invés de pré-estabelecida.

Organização



Promoção





A partir do estudo da análise paramétrica, por apresentar também os gráficos da resolução, os alunos eram encorajados a reproduzir os dados constantes no vídeo e propor alterações no modelo, a fim de verificar o que ocorreria se novos fenômenos fossem contemplados. Por exemplo, na aula em que se debatia o efeito do transporte por convecção e difusão para diferentes números de Peclet mássico, sugeriu-se aos alunos que introduzissem no modelo uma fase estacionária, para uma isoterma de adsorção linear.

4. TEMPO DE EXIBIÇÃO DE CADA VÍDEO

O canal do *Youtube* permite monitorar através da ferramenta *Analytics*, o número de visualizações e o tempo total de exibição de cada vídeo, entre outros parâmetros. O Quadro 2 a seguir relaciona, para cada vídeo, o número de visualizações, o tempo de exibição (contabilizados até 20.05.2017) e a data de publicação.

Quadro 2 - Parâmetros para cada vídeo

	Título	Data publicação (dd/mm/17)	Visualizações	Tempo de exibição (min)
1	Introdução aos modelos matemáticos	17/02	152	405
2	Balancos de massa e energia em um tanque	22/02	87	234
3	Balancos de massa, energia e molar em um reator de mistura	06/03	92	401
4	Reator tubular	09/03	111	386
5	Biorreatores	16/03	26	64
6	Flash: nem o Gordon, nem do da DC!	16/03	55	193
7	Tanque encamisado	16/03	51	121
8	Reator + Fermentador + Membrana + Reciclo	22/03	47	130
9	Introdução às variáveis adimensionais	01/04	43	168
10	Análise paramétrica	05/04	58	192
11	Resolução analítica de um CSTR	17/04	55	168
12	Resolução numérica de um CSTR	17/04	56	231
13	Resolução numérica por diferenças finitas	20/04	76	240
14	Transporte por convecção e difusão	27/04	73	261
15	Aquecimento por banho maria	05/05	57	306

Organização



Promoção





Com relação aos dados apresentados no Quadro 2, o baixo número de visualizações do vídeo de Biorreatores refere-se ao fato de que o vídeo teve de ser reapresentado, pois havia erros na formulação do modelo. Já o tempo de exibição e o número de acessos expressivos a partir dos vídeos mais recentes (do décimo vídeo em diante) se refere ao fato de que, nesta etapa da disciplina, os alunos deveriam resolver os modelos matemáticos analítica ou numericamente, e não somente formulá-los, como se solicitava anteriormente. Além disso, deveriam resolver problemas com base nestes. Nota-se que o vídeo do aquecimento por banho maria, por envolver uma Equação Diferencial Parcial em coordenadas cilíndricas, teve um dos maiores tempos de exibição, embora tivesse sido recentemente publicado.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A metodologia adotada serviu para facilitar aos alunos o acesso dos tópicos da disciplina de Análise e Simulação de Processos do curso de Engenharia Química da Universidade do Vale do Itajaí. Embora curtos, os vídeos, transmitidos aos alunos previamente às aulas, contemplavam um resumo da modelagem desenvolvida em classe e dos diversos aspectos a serem estudados. Como se relatou no presente artigo, os processos analisados nos vídeos cobriam vários tópicos tradicionalmente estudados na disciplina, tais como balanços em reatores, possibilitando que os alunos comparassem ainda os resultados obtidos de suas simulações com os dados apresentados nos vídeos.

Agradecimentos

Os autores agradecem à direção do Centro de Ciências Tecnológicas da Terra e do Mar, da Universidade do Vale do Itajaí, por permitir as gravações dos vídeos em suas dependências. Além disso, agradecem ao Prof. Marco Antônio Pinheiro, da mesma Instituição, pelas orientações sobre sala de aula invertida, e à Prof^a. Patrícia Fóes Scherer Costódio, coordenadora da Engenharia Química, pelo apoio.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ÇENGEL, Y.A.; GHAJAR, A.J. Transferência de calor e massa: uma abordagem prática. McGraw-Hill, 2012.

FOGLER, H.S. Essentials of chemical reaction engineering. Prentice-Hall, 2011.

HIMMELBLAU, D.M.; RIGGS, J.B. Engenharia química: princípios e cálculos. LTC, 2014, 836p.

KORETSKY, M.D. Engineering and chemical thermodynamics. John Wiley & Sons, 2004, 553p.

MULDER, J. Basic Principles of membrane technology. Kluwer Academic Publishers, 1996, 564p.

RODRIGUES, A.E.; PEREIRA, C.S.M.; SANTOS, J.C, Chromatographic

Organização



UDESC
UNIVERSIDADE
DO ESTADO DE
SANTA CATARINA



Promoção





Reactors, Chemical Engineering & Technology, 2012, v.35, n.7, 1171-1183.

SCHMIDELL, W.; LIMA, U.A.; AQUARONE, E.; BORZANI, W. Biotecnologia industrial. vol 2: Engenharia Bioquímica. Editora Edgard Blucher, 2008, 554p.

SEBORG, D.E.; EDGAR, T.F.; MELLICHAMP, D.A. Process dynamics and control. John Wiley & Sons, 2010, 514p.

VALENTE, J.A. Blended learning e as mudanças no ensino superior: a proposta da sala de aula invertida. Educar em Revista, Curitiba, Brasil, Edição Especial n. 4/2014, p. 79-97. Editora UFPR

VALLE, K.N.F; UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, Programa de pós-graduação em matemática para professores com ênfase em cálculo. Métodos Numéricos de Euler e Runge-Kutta, 2012, 40p.

WELTY, J.R.; WICKS, C.E.; WILSON, R.E.; RORRER, G.E. Fundamentals of momentum, heat and mass transfer. John Wiley & Sons, 2008, 711p.

CHEMICAL ENGINEERING PROCESS ANALYSIS AND SIMULATION: CONTENTS PRESENTED THROUGH ON-LINE VIDEOS

Abstract: *In order to succeed in subjects such as 'Process Analysis and Simulation', taught in Chemical Engineering, the students should have assimilated a variety of contents from previous specific subjects, such as Thermodynamics, Mass and Energy Balances and Transport Phenomena, among others, to derive mathematical models for processes of chemical industries and to solve them numerically. In-classes, therefore, may be more effective as long as the student is able to access, freely and remotely, the key points of the topics to be discussed before classes. Short videos were produced, where the main topics are discussed, with the complete formulation of phenomenological mathematical models representatives of classic chemical processes, such as stirred reactors or tubular reactors, or even flashes or chromatographic columns. In further videos, the models were solved, analytically and numerically, and then the students could verify the convergence of their own algorithms.*

Key-words: *Mathematical models; Flipped classroom; Numerical methods*

...

Organização



UDESC
UNIVERSIDADE
DO ESTADO DE
SANTA CATARINA



Promoção

