

FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS NA SALA DE AULA: MINIMIZANDO O DESCOMPASSO ENTRE CONHECIMENTO ACADÊMICO E REALIDADE

Viviana Cocco Mariani^a
Emerson Martim^b

RESUMO

As aulas práticas de laboratório computacional têm como característica principal a participação efetiva dos alunos, o que se reflete no processo de ensino-aprendizagem. Entretanto, deve-se ter cuidado para que nas aulas de laboratório computacional os alunos não tenham a simples incumbência de averiguar a parte teórica, mas, sim, que participem ativamente, construindo novas conjecturas e explorando a criatividade no entendimento físico e na resolução de problemas aplicados. Com este objetivo, o presente trabalho visa relatar as experiências vivenciadas pelos autores na integração de aulas teóricas e práticas. Em especial, descreve-se uma das aplicações apresentadas em sala de aula, a síntese de amônia. Pela modelagem matemática desta aplicação, obtém-se um sistema de equações lineares, o qual é resolvido por meio de um dos aplicativos Matlab, Maple, Scilab e Excel. Um breve comparativo entre tais aplicativos é apresentado. Na solução numérica de aplicações observa-se que ocorre um melhor aproveitamento por parte dos alunos, levando-os a uma postura ativa diante dos instrumentos apresentados e capacitando-os a interpretar os fenômenos físicos envolvidos nos problemas propostos. Os resultados obtidos em sala de aula mostram que estudos de casos aplicados permitem que o ensino não seja fragmentado.

Palavras-chave: Engenharia química. Cálculo numérico. Matlab, Maple, Scilab, Excel.

ABSTRACT

The practical lessons of computational laboratory have, as a major characteristic, the effective participation of the students, which reflected in the teaching-learning process. However, care must be taken so that in the lessons of computational laboratory the students do not have the simple task of checking the theoretical content; on the contrary, they must actively participate in constructing new conjectures, and exploring the creativity in the physical understanding and in the resolution of applied problems. This paper aims at presenting the work experienced by the authors in the integration of theoretical and practical lessons. In special, one of the applications presented in the classroom, is stressed the ammonia synthesis. Through the mathematical modeling of this application, a system of linear equations is obtained which is solved by using tools such as Matlab, Maple, Scilab and Excel. A brief comparison among such tools is presented. In the numerical solution of applications it is observed that the students can take educational advantages by playing an active role using the presented instruments, enabling them to interpret the physical phenomena involved in the proposed problems. The results obtained in classroom demonstrate that these case studies overcome the fragmented approach in education.

Keywords: Chemical engineering. Numerical calculus. Matlab, Maple, Scilab, Excel.

INTRODUÇÃO

Um dos maiores desafios da educação é favorecer estilos pedagógicos que promovam um processo de ensino-aprendizagem estimulante, ativo, reflexivo e criativo. O grande desafio para os educadores consiste em assumir que o método didático tem uma pluralidade de aspectos e que o fundamental é

articular esses aspectos de forma equilibrada, sem considerá-los únicos e isoladamente.

As estratégias (procedimentos, técnicas e recursos) de ensino são facilitadoras do processo de ensino e aprendizagem. Por meio da utilização de diferentes instrumentos podem-se obter, de uma maneira mais apropriada e consistente, os objetivos pretendidos para os conteúdos propostos. O uso

^a Professora Adjunta do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Paraná; Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho. CEP 81611-970 - Curitiba, PR, Brasil; e-mail: viviana.mariani@pucpr.br

^b Professor Ajuento do Programa de Graduação em Engenharia Química, Pontifícia Universidade Católica do Paraná; Rua Imaculada Conceição, 1155, Prado Velho. CEP: 81611-970 - Curitiba, PR, Brasil; e-mail: emerson.martim@pucpr.br

de estratégias diversificadas melhora a motivação dos estudantes, principalmente quando permitem uma melhor relação dos conhecimentos científicos com a prática, com a realidade profissional, enfim, com os problemas práticos da sua área específica. As estratégias também atendem às necessidades dos estudantes quando permitem aplicar o que foi estudado, ou seja, a aquisição de novas competências e habilidades.

O professor deve sempre utilizar estratégias por meio das quais o estudante pense e adquira novos conhecimentos. É também papel do professor procurar mostrar e comunicar entusiasmo em relação ao conteúdo exposto em cada aula, relacionando-o com a prática; ele precisa promover o diálogo entre os estudantes e utilizar estratégias adequadas para o conhecimento se disseminar, independentemente do recurso utilizado na sua aquisição.

Numa época em que o acesso à informação está amplamente difundido, selecionar informações e tomar decisões bem fundamentadas são competências valorizadas em qualquer profissão. No caso da engenharia, espera-se que, quando formado, o estudante tenha adquirido, por exemplo, capacidade para “resolver problemas concretos, modelando situações reais”, capacidade de “elaboração de projetos e proposição de soluções técnicas e economicamente competitivas”, bem como competências no âmbito das relações humanas no trabalho, tais como, capacidade de “comunicação e liderança para trabalhar em equipes multidisciplinares” (INEP, 2000).

De acordo com Valente (1999), o emprego de determinadas tecnologias pode estimular o aprendizado prático e dar razão ao trabalho em equipe, conduzindo ao encontro de novas informações para a conexão dos conhecimentos. Por outro lado, a ampla gama de atividades que as facilidades técnicas permitem pode, ou não, estar contribuindo para o processo de construção do conhecimento.

Em muitas situações, os recursos tecnológicos utilizados devem ser complementados por outras atividades, no sentido de auxiliar a construção do conhecimento. Para tal fim, uma aplicação envolvendo um processo químico será descrita e a solução, apresentada pelo uso de métodos numéricos, estes implementados pelo uso de programas computacionais, destacando, assim, a inserção das tecnologias na sala de aula, que visam minimizar o descompasso existente entre o conhecimento acadêmico e as aplicações do setor produtivo.

Um aspecto importante envolvido nos problemas combinados de balanço de matéria e/ou energia é assegurar que o conjunto de equações tenha, no mínimo, uma solução, e não mais que uma solução. A questão é saber quantas variáveis são desconhecidas e quantas têm seus valores especificados num problema (HIMMELBLAU; RIGGS, 2006). O

número de graus de liberdade é o número de variáveis num conjunto de equações independentes, para o qual os valores têm de ser especificados, de modo que as equações possam ser resolvidas. O número de graus de liberdade (N_{GL}) é dado por:

$$N_{GL} = N_V - N_E, \quad (1)$$

onde N_V é o número de variáveis e N_E , o número de equações independentes (balanços materiais e/ou energéticos, restrições, especificações, imposições). Como uma corrente pode conter c espécies, N_C é o número de espécies em uma corrente.

APLICAÇÃO DA SÍNTESE DA AMÔNIA

Descrição do processo

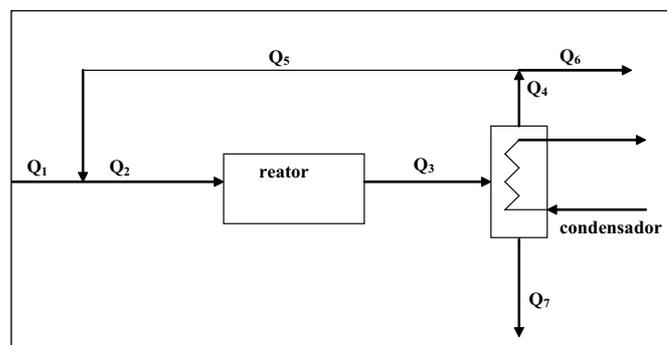


Figura 1 - Fluxograma do processo de produção de NH_3

Nesta seção a aplicação descrita está relacionada à reação química de síntese de amônia. Industrialmente, na produção de amônia pelo processo Haber, uma mistura de hidrogênio e nitrogênio em proporções estequiométricas entra em contato com um catalisador de óxido de ferro contendo um promotor, num reator que opera a pressões entre 800 e 1.000 atm e temperatura entre 500 e 600 °C (HIMMELBLAU; RIGGS, 2006).

O hidrogênio normalmente é obtido pela oxidação parcial de óleo combustível, seguida da conversão de Fisher-Tropsch do CO e da água produzidos a CO_2 e H_2 . O CO_2 é absorvido em água sob pressão. O nitrogênio é obtido pela remoção do oxigênio do ar por esta mesma reação de oxidação parcial; conseqüentemente, o gás de alimentação produzido encerra argônio do ar, metano proveniente da reação de redução e traços de CO (inertes), além dos reagentes N_2 e H_2 . O fluxograma é apresentado na Figura 1. Essa mistura de gases entra no processo, no qual ocorre a reação de produção de amônia. O produto efluente do reator passa por um condensador, com o objetivo de separar a amônia dos demais gases. Como a conversão por passagem no reator pode ser baixa, é adequado fazer um reciclo do material não reagido ao reator. Nesta corrente de reciclo há uma purga, cujo objetivo é remover as substâncias inertes do processo, além de parte dos reagentes que não

reagiram. Deseja-se obter as vazões desconhecidas do processo, além da conversão global, parâmetro de projeto muito importante.

Pelo fato de os cálculos de processos com reação química serem definidos em termos molares, tais como estequiometria, conversão, seletividade, todas as vazões e composições devem estar em base molar.

Por definição, volumes de controle (VC) são todas as unidades de processo, pontos de junção ou separação de correntes e o processo global (FELDER; ROUSSEAU, 2000). Dessa forma, na Figura 2 são apresentados os cinco volumes de controle do processo.

Análise dos graus de liberdade

Em VC1 (misturador), $N_C = 4$ (NH_3 , N_2 , H_2 , Inerte). Em cada corrente é possível desenvolver balanço material para (N_C-1) componentes, já que balanço para o último componente é redundante. A vazão do total é também uma variável. Dessa forma,

$$N_V = (N_C - 1) = 1 = N_C \quad (2)$$

Como no VC1 fazem parte três correntes (Q_1 ; Q_2 e Q_3): $N_V = 3N_C = 12$

- número de equações (N_E):
 - balanços materiais (N_2 , H_2 , Inerte): 3
 - especificações: não há NH_3 nas correntes 1, 2 e 5: 3
- $$N_E = 3 + 3 = 6$$
- $$\rightarrow N_{GL} = 12 - 6 = 6$$

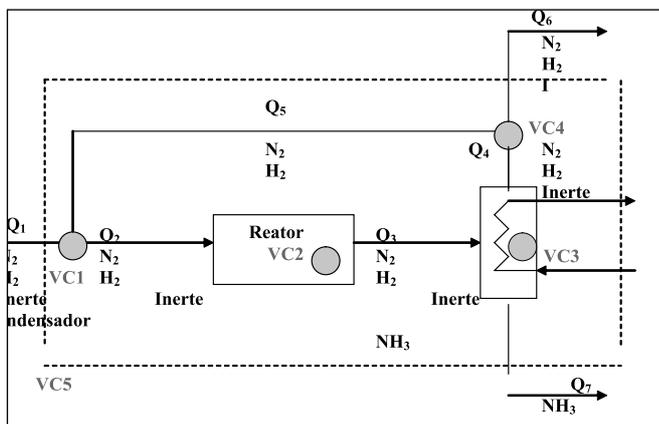


Figura 2 - Identificação dos volumes de controle e substâncias das correntes

Para o VC₂ (reator), em função da reação química, deve-se considerar o grau de avanço (ξ) da reação química. Assim:

$$N_V = 2N_C + 1 = 9$$

$$N_E \rightarrow \text{balanços materiais } (NH_3, N_2, H_2, \text{Inerte}): 4$$

$$(NH_3)_2 = 0 \quad 1$$

$$\text{Grau de avanço: } 1$$

$$\rightarrow N_{GL} = 9 - 6 = 3$$

Desenvolvendo-se o mesmo raciocínio para os demais equipamentos (VC), descontando-se as variáveis redundantes de conexão e as restrições redundantes eliminadas, é possível concluir que são sete os graus de liberdade do sistema, além do grau de avanço já considerado.

Parâmetros de processo

Alguns dados disponíveis do processo são a alimentação nova (Q_1) contém 100,0 mol/h de mistura e conforme dados de carga fornecidos acima, levam à: 73,2 mol H_2 , 24,4 mol de N_2 e 2,40 mol de inerte I (CH_4 e argônio). Todas as unidades de processo são adiabáticas, exceto o condensador.

A conversão por passe (X_{pp}) de H_2 é de 87,0%; 11,0% do N_2 que não reagiu é purgado (RN2); 10,0% do H_2 não reagido é purgado (RH2); todo o inerte é purgado. No condensador toda a amônia produzida é condensada e sai pura em Q_7 na forma de líquido saturado.

Com essas informações, é possível identificar os componentes de cada corrente no fluxograma apresentado na Figura 2.

Deseja-se implementar um programa que calcule automaticamente todas as vazões e composições, independentemente do valor estabelecido acima que seja alterado. Propõe-se aqui montar um sistema de equações a partir dos dados fornecidos.

Denotando-se a vazão de H_2 na corrente 1 por $(H_2)_1$, e assim sucessivamente, comece-se desenvolvendo balanço de massa para os inertes (I). Como os inertes não participam da reação química, a quantidade de inerte que entra em cada VC é igual à quantidade que sai. Dessa forma:

$$(I)_1 = (I)_2 = (I)_3 = (I)_4 = (I)_6 \quad (3)$$

Balanço de massa para o volume de controle 1 (VC1), que nada mais é que um misturador de correntes, a quantidade que entra de cada substância também sai:

$$(N_2)_1 + (N_2)_5 = (N_2)_2, \quad (4)$$

$$(H_2)_1 + (H_2)_5 = (H_2)_2. \quad (5)$$

Balanço de massa para o condensador (VC3). Como somente amônia está sendo condensada, todo o N_2 e H_2 proveniente da corrente 3 está passando para a corrente 4:

$$(N_2)_3 = (N_2)_4, \quad (6)$$

$$(H_2)_3 = (H_2)_4, \quad (7)$$

$$(NH_3)_3 = (NH_3)_7. \quad (8)$$

Para desenvolver o balanço de massa no purgador, faz-se necessário o uso da informação de que 11,0% do N₂ não reagido (N₂)₄ é purgado:

$$(N_2)_6 = 0,11 (N_2)_4, \tag{9}$$

$$(N_2)_5 = (1 - 0,11) (N_2)_4, \tag{10}$$

Para o H₂:

$$(H_2)_6 = 0,1(H_2)_4, \tag{11}$$

$$(H_2)_5 = (1 - 0,1) (H_2)_4. \tag{12}$$

Como a conversão por passe de H₂ é de 87%, então:

$$(H_2)_3 = (1 - 0,87) (H_2)_2. \tag{13}$$

A estequiometria da reação é (3H₂ + 1 N₂ → 2 NH₃). Desenvolvendo os balanços de massa no reator, chega-se a:

$$(N_2)_3 = (N_2)_2 - \frac{(X_{pp})(H_2)_2}{3}, \tag{14}$$

$$(NH_3)_3 = \frac{2(X_{pp})(H_2)_2}{3}. \tag{15}$$

Tem-se, portanto, um sistema linear de 12 equações (equações 4 a 15) e 12 incógnitas: (N₂)₂; (H₂)₂; (N₂)₃; (H₂)₃; (NH₃)₃; (NH₃)₇; (N₂)₄; (H₂)₄; (N₂)₅; (H₂)₅; (N₂)₆; (H₂)₆. As variáveis que podem ser alteradas são a alimentação nova de N₂ e H₂ (H₂)₁; (N₂)₁; conversão por passe: X_{pp}; razão de reciclo de

N₂ (RN2); razão de reciclo de H₂ (RH2). Assim, representando essas equações matricialmente, gere-se o sistema apresentado na Tabela 1.

Para a solução de sistemas de equações lineares, métodos numéricos devem ser aplicados. Assim, as aplicações envolvendo programação e matemática devem objetivar a aquisição do conhecimento tanto na matemática como na programação.

A aprendizagem de conceitos de programação e algoritmos envolve a aquisição de alguns conhecimentos e habilidades específicas. Em alguns cursos é desejável que os alunos pratiquem as técnicas de programação, ao passo que em outros eles podem utilizar os ambientes computacionais Matlab, Maple, Scilab, Excel etc., sem a necessidade de programar em linguagens de mais alto desempenho, como C ou Fortran.

Na próxima seção apresenta-se uma breve descrição dos ambientes computacionais utilizados em alguns cursos de engenharia e adotados nas aulas ministradas pelos autores deste trabalho, fazendo um comparativo entre os quatro ambientes computacionais citados.

Características dos ambientes computacionais

A primeira versão do Matlab foi destinada a cursos de teoria matricial, álgebra linear e análise numérica. Hoje sua capacidade foi estendida, sendo muito utilizado no desenvolvimento de projetos de engenharia, em virtude de sua poderosa capacidade de processamento matemático e visualiza-

Tabela 1 - Sistema matricial gerado

(N ₂) ₂	(H ₂) ₂	(N ₂) ₃	(H ₂) ₃	(NH ₃) ₃	(NH ₃) ₇	(N ₂) ₄	(H ₂) ₄	(N ₂) ₅	(H ₂) ₅	(N ₂) ₆	(H ₂) ₆					
1								-1				(N ₂) ₁				
	1								-1			(H ₂) ₁				
-1	X _{pp} /3	1										0				
	X _{pp} -1		1									0				
	-2X _{pp} /3			1								0				
				-1	1							0				
		-1				1						0				
			-1				1					0				
								RN2-1		1		0				
									RH2-1		1	0				
												RN2	1	0		
														RH2	1	0

O sistema esparso formado é:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0,29 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,13 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,58 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0,89 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0,9 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0,11 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0,10 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 24,4 \\ 73,2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ção gráfica. O Matlab apresenta diversos conjuntos de funções voltadas para aplicações específicas, os chamados *toolboxes*.

O Maple é um programa versátil, pelo qual se podem explorar computação algébrica e numérica, gráficos, animações, apresentando uma linguagem de programação. Por causa dessa versatilidade, tem encontrado grande aplicação, tanto do ponto de vista técnico como do ponto de vista educacional. A capacidade principal do Maple está nos algoritmos para resolução de problemas simbólicos.

O Scilab é um programa livre disponível em www.scilab.org. O uso do programa livre na educação é uma alternativa imprescindível a qualquer projeto educacional, tanto no setor público como no privado. Fatores tais como liberdade, custo, flexibilidade são estratégicos para a condução bem-sucedida de projetos educacionais mediados por computador. Para o setor educacional, muitas vezes carente de recursos, o programa livre é uma alternativa viável e que deve ser considerada seriamente (ALMEIDA, 2002b). O Scilab tem sido utilizado para aplicações em sistemas de controle e processamento de sinais. É um código fonte livre feito de três partes distintas: um interpretador, livrarias de funções (procedimentos Scilab) e livrarias de rotinas em Fortran e C. Essas rotinas não pertencem ao Scilab, mas são inteiramente chamadas pelo interpretador; algumas foram modificadas para melhor compatibilidade com o interpretador do Scilab. Uma das características-chave do Scilab é sua habilidade para trabalhar com matrizes, desde as mais simples às mais complexas matrizes numéricas.

A história do Excel no Brasil começa na versão 3.0, que é um marco fundamental para o produto. Lançado em 1991, o Excel 3.0 trazia na bagagem algumas armas irresistíveis. Ao longo de mais de uma década, o produto cresceu e incorporou recursos antes impensáveis, tanto que hoje dizer que uma planilha serve para fazer cálculos é uma meia-verdade. Debulhar números representa apenas a função básica de um programa como Excel, que hoje inclui funções de banco de dados, apresentação, linguagem e ambiente de programação e até um pouco de *design* (ALMEIDA, 2002a). Uma grande vantagem do programa Excel é que está disponível em quase todos os computadores e sua interface com demais programas do Windows é bastante familiarizada.

Sabe-se que a aprendizagem independe do ambiente computacional adotado. O aluno deve usar o raciocínio lógico ao elaborar as etapas para a solução de um problema, para depois programá-lo e analisar os resultados obtidos.

Solução numérica do sistema de equações

Um sistema linear possuindo m equações e n incógnitas (ou variáveis) é escrito usualmente na forma

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \quad (16)$$

onde a_{ij} são os coeficientes ($1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq n$); x_j , as variáveis (ou incógnitas) ($1 \leq j \leq n$) e b_i , as constantes do vetor de termos independentes ($1 \leq i \leq m$).

Usando notação matricial, o sistema linear pode ser representado por $Ax = b$, cuja solução consiste em calcular os valores de x_j ($j = 1, \dots, n$), caso eles existam, que satisfaçam as m equações simultaneamente. Usando notação matricial, o sistema linear pode ser representado por $Ax = b$. A respeito das soluções de um sistema linear de equações, o sistema pode ser impossível (ou incompatível), se não possui solução; possível (ou compatível), se possui solução. Caso o sistema seja possível, pode ser determinado, se apresentar solução única, ou indeterminado, se possuir infinitas soluções (BURDEN; FAIRES, 2000).

Para resolver o sistema de equações lineares são descritas a seguir as principais funções disponíveis nos quatro ambientes computacionais adotados.

No Matlab existem algumas funções predefinidas que podem ser utilizadas para se obter a solução de um sistema de equações lineares. Por exemplo, a inversa de uma matriz pode ser obtida por meio do comando *inv* ou do comando *linsolve*; a decomposição de Cholesky pode ser obtida usando-se o comando *chol*, ou, ainda, a decomposição LU pode ser obtida usando o comando *lu*. Os demais métodos devem ser programados utilizando as ferramentas disponíveis no Matlab.

No Maple os métodos diretos estão todos disponíveis em forma de funções no pacote *linalg* (de álgebra linear): a função *inverse* pode ser usada para obter a matriz inversa; a função *gaussjord*, para utilizar o método de Gauss-Jordan; a função *LUdecomp*, para utilizar o método de decomposição LU, e a função *cholesky*, para utilizar o método de Cholesky. Da mesma forma, no Scilab muitos comandos já estão disponíveis para resolver sistemas, alguns semelhantes ao Matlab.

No Excel existem três possibilidades de se resolver um sistema de equações lineares: método iterativo de Gauss-Seidel (processo iterativo, desde que seja diagonalmente dominante; o sistema linear apresentado acima é), pelo comando Solver do Excel e por meio do conceito de inversão de matrizes.

Apesar de muitas funções estarem disponíveis nesses ambientes computacionais, os alunos são incentivados a programar alguns dos métodos numéricos. Na Tabela 2 é apresentado o método de eliminação de Gauss para os ambientes computacionais Matlab, Maple e Scilab, respectivamente. O método

de eliminação de Gauss consiste em transformar o sistema linear original num sistema linear equivalente cuja matriz dos coeficientes fique na forma triangular superior, onde a solução é feita de forma retroativa. Dois sistemas são equivalentes quando possuem a mesma solução (BURDEN; FAIRES, 2000).

No Matlab, para compilar o programa basta digitar `EliGauss(Ab)` na linha de comando, desde que o programa esteja salvo com o nome `EliGauss.m`, onde `Ab` é a matriz estendida, isto é, a matriz contendo os elementos da matriz `A` e os elementos do termo independente `b`, do sistema de equações lineares. No Maple, a execução do programa, por exemplo, para uma matriz de ordem 3×3 , deve seguir os passos apresentados a seguir:

```
A1: = linalg[matrix](3,3,[1,2,-3,2,-4,1,3,2,1]);
B1: = linalg[matrix](3,1,[5,0,5]);
x: = gauss(A1,B1);
```

Para executar o programa no Scilab os seguintes passos devem ser seguidos:

```
--> getf('x.sci')
--> Eg(Ab)
```

A solução obtida para o sistema de equações lineares da seção 2, pelo método de eliminação de Gauss, através de todos os ambientes computacionais adotados neste trabalho, é [27,3069; 82,8992; 3,2662; 10,7769; 48,0815; 48,0815; 3,2662; 10,7769; 2,9069; 9,6992; 0,3593; 1,0777].

Foram implementadas no programa Excel três formas de resolução do mesmo sistema. A primeira foi pelo método iterativo de Gauss-Siedel, necessitando-se de uma estimativa inicial para cada uma das 12 variáveis desconhecidas.

O método apresentou convergência, no entanto, para que todos os valores convergissem foram necessárias mais de cinquenta iterações, independentemente da estimativa inicial fornecida. Uma

Tabela 2 - Método de eliminação de Gauss no Matlab, Maple e Scilab

<pre>Function [x,iter] = EliGauss (Ab) n_l = size(Ab,1); n_c = size(Ab,2); for k = 1:(n_l-1) for i = (k+1):n_l m = -Ab(i,k)/Ab(k,k) Ab(i,k) = 0 for j = (k+1):n_c Ab(i,j) = Ab(i,j) + m*Ab(k,j) end end end x(n_l) = Ab(n_l,n_c)/Ab(n_l,n_l); for i=(n_l-1):-1:1 s = 0 for j = i+1:n_l s = s + Ab(i,j)*x(j) end x(i) = (Ab(i,n_c)-s)/Ab(i,i) end</pre>	<pre>restart:with(linalg): gauss:=proc(C,B) local A,j,i,k,n,m,x,s; A:=concat(C,B); n:=rowdim(A); for k to n-1 do for i from k+1 to n do m = evalf(-A[i,k]/A[k,k]); for j from k+1 to n+1 do A[i,j]:= evalf(A[i,j]+m*A[k,j]); od; A[i,k]:= 0: od; od; # Retrosubstituição x:= vector(n); x[n]:= A[n,n+1]/A[n,n]; for i from n-1 to 1 by -1 do s:= A[i,n+1]; for j from i+1 to n do s:= s-A[i,j]*x[j]; od; x[i]:= evalf(s/A[i,i]); od; x:= convert(x,matrix); RETURN(op(x)); end:</pre>	<pre>function x = Eg(Ab) // nl é o número de linhas // nc é o número de colunas da matriz Ab [nl, nc]=size(Ab); for k =1:nl-1, for i=(k+1):nl, m=-Ab(i,k)/Ab(k,k); Ab(i,k)=0; for j=k+1:nc, Ab(i,j)=Ab(i,j)+ m*Ab(k,j); end, end, end, n=nc-1; A = Ab(:,1:n); // matriz A b = Ab(:,nc) // vetor b x = zeros(n,1); x(n) = b(n)/A(n,n); for i = n-1:-1:1, soma = 0, for j = i+1:n, soma = soma + A(i,j)*x(j); end, x(i) = (b(i)-soma)/A(i,i); end Endfunction</pre>
---	---	---

vez implementado no Excel, é relativamente simples, já que o próprio programa realiza todos os cálculos iterativos.

A segunda maneira desenvolvida no programa Excel foi pelo uso do comando `Solver`. Uma vez estabelecidas todas as equações e informadas ao `Solver` na forma adequada, o programa automaticamente calcula todos os valores desconhecidos (BOGHI; SHITSUKA, 2005).

Matricialmente, a partir de um sistema $Ax = b$, pode-se obter x fazendo-se $x = A^{-1}b$. A partir da matriz `A`, é possível calcular no Excel sua inversa (A^{-1}) pelo comando: `matriz.inverso()`. Uma vez ob-

tida a inversa, é possível multiplicá-la pelo vetor `b`, através do comando `matriz.mult()`. Uma propriedade matricial importante é que $A^{-1}.b \neq b.A^{-1}$.

Independentemente da alternativa escolhida, foi possível encontrar as 12 variáveis desse processo. A solução fornecida para o sistema de equações lineares através do Excel é $(N_2)_2 = 27,30065$; $(H_2)_2 = 82,8992$; $(N_2)_3 = 3,2657$; $(H_2)_3 = 10,7769$; $(NH_3)_7 = 48,0815$; $(N_2)_4 = 3,2657$; $(H_2)_4 = 10,7769$; $(N_2)_5 = 2,9065$; $(H_2)_5 = 9,6992$; $(N_2)_6 = 0,3592$; $(H_2)_6 = 1,0777$.

De posse desses valores, foram calculadas todas as vazões e composições molares do processo, representados no fluxograma da Figura 3.

Caso o sistema de equações não fosse linear, como em várias aplicações na engenharia química, os métodos de Gauss-Seidel e a inversão de matrizes não seriam aplicáveis. No entanto, o comando Solver do Excel ainda poderia ser utilizado.

Qualquer alteração nos dados da planilha do Excel possibilita, automaticamente, o cálculo de novos valores. A única restrição é que o reagente H_2 seja o reagente limitante. Por exemplo, se houver uma diminuição da temperatura e a conversão por passe for alterada para 80%, basta alterar a conversão na caixa de parâmetros de processos que, automaticamente, todos os demais parâmetros do processo serão recalculados.

Na planilha do Excel utilizando o Solver, é necessário solicitar que uma nova simulação seja realizada.

Com todos os parâmetros calculados, pode-se calcular ainda a conversão global do processo, para o H_2 , que é o reagente limitante, calculado pela relação entre o que entra e sai de H_2 do processo global (VC5), conforme segue.

Para os valores apresentados, a conversão global encontrada foi de 97,6%, indicando que 97,6% do H_2 (reagente limitante) foi convertido. A conversão global é sempre maior que a conversão por passe.

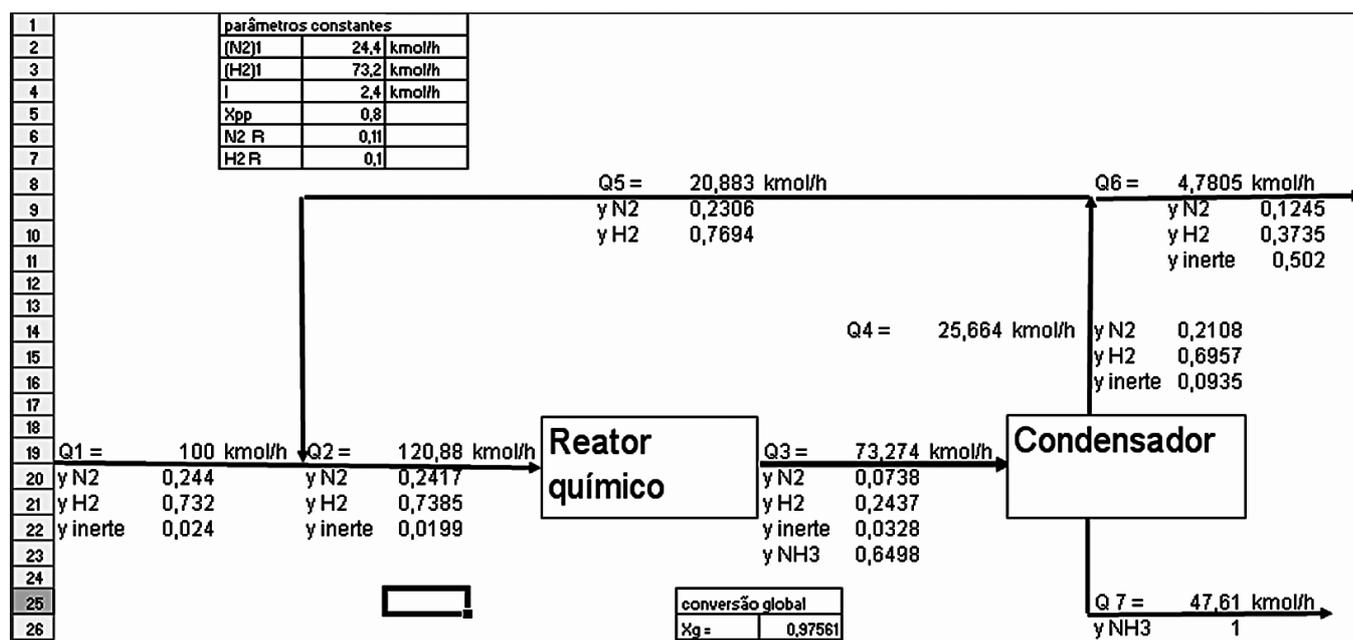


Figura 3 - Fluxograma da síntese de amônia

CONCLUSÕES

Mostrou-se que, com um trabalho conjunto de pesquisa continuada, é possível tornar as aulas mais dinâmicas e motivadoras. Independentemente das estratégias de ensino utilizadas, problemas pontuais continuam a existir e deverão ser solucionados por meio da manutenção dessa interação constante entre ambos.

Como a disciplina aqui abordada é numérica, apresenta-se aos estudantes a oportunidade de se familiarizarem também com os *softwares* abertos, em especial o Scilab. A planilha do Excel é adequada para resolver os problemas mais simples da engenharia química, cuja forma de programar seja extremamente simples. Assim, os futuros engenheiros podem cumprir o seu papel técnico-científico, concebendo e desenvolvendo também estruturas mais adequadas técnica e economicamente e não sendo meros repetidores de passos pré-progra-

dados. Os instrumentos de cálculo devem ser utilizados de maneira satisfatória, disponibilizando tempo para a criatividade.

REFERÊNCIAS

- ALMEIDA, E. P. As planilhas fazem história. *Info Exame - Guia do Excel*, São Paulo, p. 10-17, 2002a.
- ALMEIDA, R. Q. Software livre na educação. *Boletim EAD - Unicamp/Centro de Computação/Equipe EAD*. Disponível em: [http://www.ead.unicamp.br/ead/index_html?](http://www.ead.unicamp.br/ead/index_html? foco=Publicacoes), foco=Publicacoes, 2002b.
- BARROSO, C. L. et al. *Cálculo numérico - com aplicações*. 2. ed. São Paulo: Harbra, 1987.
- BOGHI, C.; SHITSUKA, R. *Aplicações práticas com o Microsoft Office Excel 2003 e Solver: ferramentas Computacionais para a tomada de decisão*. São Paulo: Érica, 2005. 262p.

BURDEN, R. L.; FAIRES J. D. *Numerical analysis*. 7. ed. PWS Publishing Co, 2000.

FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W. *Elementary principles of chemical process*. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 2000. 675p.

HIMMELBLAU, D. M.; RIGGS, J. B. *Engenharia química: princípios e cálculos*. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006. 846p.

INEP. *Revista do Provão*, Brasília: Instituto Nacional de Estudos e Pesquisas Educacionais, n. 5, p.14-15, 2000.

MARIANI, V. C. Laboratório computacional na disciplina de cálculo numérico - um relato. In: COBENGE, XXX. Piracicaba, *Anais...* p 1-10, 2002.

PALACIOS, J. O. An introduction to the treatment of neurophysiological signals using Scilab-Version 0.02. Disponível em: <http://www.neurotraces.com/scilab/scilab2/node2.html>. Acesso em: 2001.

RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. *Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais*. 2. ed. Rio de Janeiro: Makron Books, 1996.

SILVA, J.; LAIDENS, G. Uma abordagem multidisciplinar nos experimentos de potenciometria. In: COBENGE, XXIX. Porto Alegre, *Anais...* p 1-8, 2001.

The Math Works Inc. *Matlab*: versão do estudante, Makron Books, 1997.

VALENTE, J. A. Informática na educação: uma questão técnica ou pedagógica? *Pátio* – Revista Pedagógica, Porto Alegre: Artmed, n. 9, p. 21-23, 1999.

DADOS DOS AUTORES



Viviana Cocco Mariani

Possui graduação em Matemática pela Universidade Federal de Santa Maria (1993), mestrado em Ciência da Computação pela Universidade Federal de Santa Catarina (1997) e doutorado em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal de Santa Catarina (2002). É professora do departamento de Engenharia Mecânica da PUC-PR, atuando na área de Engenharia e Ciências Térmicas. Participa como revisora dos periódicos *IEE Proc. Generation, Transmission & Distribution* e *IEE Proc. Science, Measurement & Technology*. Desenvolve ferramentas numéricas utilizando métodos como diferenças finitas, volumes finitos, Elafint, otimização, algoritmos genéticos, redes neurais etc. Seus estudos têm ênfase na análise de escoamentos laminares e turbulentos em ambientes, além da análise de transferência de calor e massa durante o processo de secagem ou congelamento de alimentos.



Emerson Martin

Possui graduação em Engenharia Química pela Universidade Federal de São Carlos (1994), mestrado em Engenharia Química pela Universidade Estadual de Campinas (1997) e doutorado em Engenharia Química pela Universidade Estadual de Campinas (2003). Atualmente é professor Adjunto da Pontifícia Universidade Católica do Paraná e consultor da Fundação Araucária de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Paraná. Tem experiência na área de química, com ênfase em cinética química e catálise, atuando principalmente nos seguintes temas: ensino na graduação, catálise, metano, cálculo numérico, biodiesel, extração de óleos.