

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

RAFAEL VINICIUS DA SILVA

O PAPEL DA DISCIPLINA DE PAPCEQ NA
FORMAÇÃO DO ENGENHEIRO QUÍMICO E
ELABORAÇÃO DE MATERIAL DIDÁTICO

SÃO CARLOS -SP
2021

RAFAEL VINICIUS DA SILVA

O PAPEL DA DISCIPLINA DE PAPCEQ NA FORMAÇÃO DO ENGENHEIRO QUÍMICO E
ELABORAÇÃO DE MATERIAL DIDÁTICO

Trabalho de conclusão de curso
apresentado ao Departamento de
Engenharia Química da Universidade
Federal de São Carlos, para obtenção
do título de bacharel em Engenharia
Química..

Orientador: Marcelo Perencin de Arruda
Ribeiro

São Carlos-SP
2021

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

BANCA EXAMINADORA

Orientador: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro - DEQ/UFSCar

Convidado: Antonio José Gonçalves da Cruz - DEQ/UFSCar

Professor da Disciplina: Ernesto Antonio Urquieta-Gonzalez - DEQ/UFSCar

Trabalho de Graduação apresentado no dia 17 de Novembro de 2021 perante a banca examinadora.

AGRADECIMENTO

Agradeço à minha família por todo apoio e compreensão mesmo estando distantes, aos meus amigos, que se tornaram uma segunda família, por toda a ajuda e todos os bons momentos e ao professor Marcelo pelas aulas, compreensão e ajuda com o trabalho.

RESUMO

A utilização de ferramentas de planilhas e também de linguagens de programação por estudantes de ciências exatas torna a resolução de problemas muito mais ágil. No curso de Engenharia Química da UFSCar temos na matriz curricular a disciplina de “Projeto de Algoritmos e Programação Computacional Para Engenharia Química” (PAPCEQ) que visa preparar os alunos para o uso desses instrumentos tanto para questões específicas do curso, quanto para resoluções de problemas gerais utilizando planilhas e programação para automatizar ou facilitar cálculos mais complexos.

Tendo isso em vista, este trabalho tem objetivo de discutir e demonstrar a importância dessa disciplina para a formação do engenheiro e elaborar um material didático em forma de apostila para auxiliar tanto o professor quanto os alunos no decorrer da disciplina. Para isso, foi feita uma breve revisão bibliográfica em materiais didáticos utilizados na disciplina e em problemas de engenharia de modo a entender como estão construídos materiais desse tipo e também buscando exemplos específicos em materiais de engenharia química, trazendo aplicações e problemas típicos da área de atuação do engenheiro químico. Como resultados, elaborou-se uma apostila como apêndice da monografia e o melhor entendimento e argumentações sobre a importância da disciplina para o currículo dos graduandos.

Palavras-chave: Planilhas. Cálculo Numérico. Engenharia Química. Material didático.

ABSTRACT

The usage of spreadsheets by science and technology students can be helpful solving complex problems quickly. In the UFSCar's chemical engineering course we have a specific subject to aid students in the usage of such technologies to solve specific chemical engineering problems and also to help automate and solve other kinds of situations.

This paper's goal is to discuss and demonstrate how important this subject is to the engineer education, also the main goal is to present a courseware, wich can be used to ministrare the subject and also as reference material for the students in other subjects. To achieve that, a brief literature review was made to understand how this kind of material is built and to seek for specific examples that can appear in day-to-day life of a chemical engineer. As for results, we have the courseware as an apendix and a better understanding of how important this subject is to the engineering students.

Keyword: Spreadsheet. Chemical Engineering. Courseware. Calculus.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Calculadora Balanço de massa

4

LISTA DE SIGLAS

PAPCEQ - Programação Computacional para Engenharia Química

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO E OBJETIVO	1
2	MATERIAIS E MÉTODOS	2
3	RESULTADOS	3
4	DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	4
5	CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS	6
	REFERÊNCIAS	7
	APÊNDICE A - APOSTILA PAPCEQ	8

1 INTRODUÇÃO E OBJETIVO

A disciplina de Projetos de Algoritmos e Programação Computacional para Engenharia Química (PAPCEQ) é ministrada no quarto período do curso e tem como objetivo preparar o aluno para a resolução de problemas por ferramentas computacionais.

Além da disciplina ser um diferencial dentro da formação de engenharia química (não está presente em grades curriculares em outras faculdades), ela também prepara o aluno para resolução de problemas que serão abordados mais à frente no curso, como exercícios de cinética e reatores e cálculo numérico.

A utilização de ferramentas de programação e planilhas eletrônicas é muito comum na vida do engenheiro não apenas durante a formação, mas também ao longo da carreira. Assim a disciplina de PAPCEQ se faz importante, mas além disso, também é interessante ter um material para consulta posterior à disciplina.

O objetivo primário deste trabalho é a elaboração de um material didático que vai ser utilizado como apoio ao ministrar a disciplina de PAPCEQ, tanto pelos alunos quanto pelos professores. A apostila também tem como objetivo ser material de consulta para os alunos, mesmo após a disciplina.

Para a elaboração, foram feitos levantamentos de materiais específicos de engenharia química, de materiais de planilhas e materiais de cálculo numérico para buscar inspirações, exemplos e embasamento para o conteúdo da apostila.

Como parte importante desse trabalho de graduação, temos uma discussão sobre a importância da disciplina de PAPCEQ para o curso e também para a formação do engenheiro químico.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

Para a discussão e elaboração do material, primeiramente foi necessário estudar como estão elaborados os materiais didáticos de planilhas, principalmente buscando entender como é a estrutura da linguagem utilizada.

Dentre esses materiais, foi escolhida a abordagem mais comum, que mostra os tópicos o mais fragmentado possível, isso facilita tanto a compreensão quanto eventuais consultas.

Também foram analisados materiais específicos de engenharia química, buscando exemplos práticos do dia a dia do engenheiro, além da ementa do curso, que já prevê esse tipo de exemplo, mesmo que sejam exemplos que ainda não tenham sido estudados pelos alunos, por estarem presentes em disciplinas que ainda serão ministradas na matriz curricular do curso.

Dentro dos materiais específicos para o engenheiro, foram considerados também materiais que não são focados na formação de um engenheiro químico, mas também são relevantes para engenharias no geral, como materiais de cálculo numérico.

3 RESULTADOS

Como resultados, temos a apostila presente no APÊNDICE A, material que pode ser utilizado ao ministrar a disciplina de PAPCEQ e também como consulta para os alunos.

Na apostila constam tanto fundamentos teóricos quanto exemplos práticos de utilização de planilhas na engenharia química, que se fazem presentes no cotidiano do engenheiro.

4 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

O material didático criado possui diversos exemplos que são apresentados ao longo do curso de Engenharia Química em diversas disciplinas diferentes, como cinética e reatores químicos, balanços de massa e energia e até mesmo cálculo numérico.

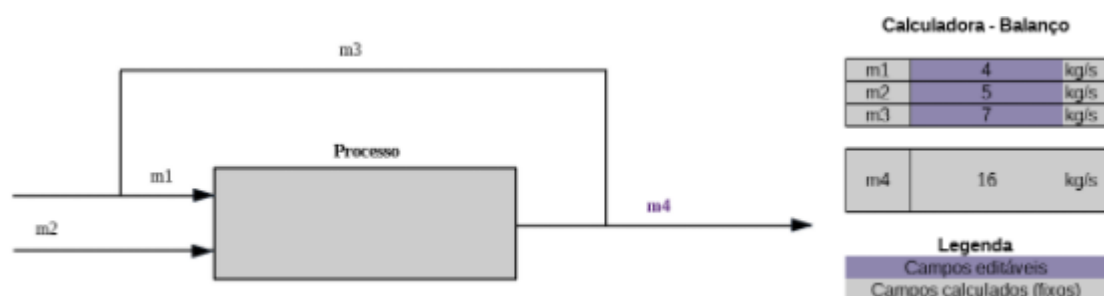
Nas primeiras páginas da apostila são apenas apresentados conceitos básicos, para favorecer um possível primeiro contato dos alunos com o aplicativo de planilha e em seguida avançamos para funções básicas e até mesmo algumas aplicações mais simples.

Os primeiros exemplos apresentados são mais simples e alguns apresentam estudos de caso em que se abordam por exemplo balanços de massa simples e fazem parte do cotidiano do engenheiro químico e podem ser ampliados para problemas mais complexos. Também é possível utilizar das fórmulas e ferramentas apresentadas para ficar mais intuitivo e até mais visual para apresentar os cálculos, como mostrado na figura 1 abaixo, que apresenta uma calculadora simples de balanço de massa de forma visual.

Esse exemplo em questão apresenta uma situação em que duas correntes passam por um processo genérico, em regime contínuo. Há também uma corrente de bypass.

Nesse exemplo é possível mostrar a capacidade de deixar problemas visuais, intuitivos e também mostrar que é muito simples editar o problema para se adequar a diferentes situações.

Figura 1: Calculadora Balanço de massa.



Em seguida são apresentados exemplos mais complexos, todos ligados aos

conhecimentos de planilhas apresentados na própria seção, como por exemplo o exemplo dos reatores de mistura perfeita operando de forma contínua (sistema de reatores em série). Este exemplo é amplamente abordado ao longo do curso, por também se tratar de uma situação muito cotidiana do trabalho do engenheiro.

Após esse ponto, os exemplos focam mais em problemas de cálculo numérico, que é uma disciplina que os alunos fazem apenas no quinto semestre de curso, mas é o principal uso de softwares de planilhas eletrônicas, visto que o intuito desses é facilitar e agilizar os cálculos práticos.

Dentre os temas de cálculo numérico abordados, é possível destacar as metodologias de cálculo para encontrar máximos e mínimos de funções (que podem ser utilizadas em otimizações) e métodos de cálculo de EDO (Equações Diferenciais Ordinárias) como Runge Kutta e Euler.

Esses cálculos, caso sejam feitos fora de *softwares*, costumam ser trabalhosos e demorados, daí a necessidade e a importância de saber utilizar as planilhas para ter um trabalho apenas para entender e montar metodologias a serem utilizadas para os cálculos, mas não há a necessidade de ter um esforço grande para realizar o cálculo.

Assim, os exemplos foram escolhidos com base na ementa do curso e também com base em próximas disciplinas e no trabalho do engenheiro após a sua formação na faculdade, logo, a apostila não serve apenas para ministrar essa disciplina, mas também como consulta dentro e fora da faculdade.

5 CONCLUSÕES/CONSIDERAÇÕES FINAIS

Como conclusões para o presente trabalho, podemos considerar que a apostila elaborada consegue cobrir, de forma satisfatória, a maior parte do plano de ensino da disciplina de PAPCEQ, praticamente a totalidade dos assuntos relacionados às planilhas.

Além disso, também cobre assuntos que não são o foco do curso (como tabelas dinâmicas), mas também podem ser relevantes para o dia a dia do engenheiro quando estiver exercendo sua função.

Uma vez que os *softwares* de planilhas são muito similares, a apostila elaborada pode ser utilizada para consultas independente do programa utilizado e também como as atualizações nesses não são muito significativas, do ponto de vista de usabilidade, a apostila pode ser utilizada por um tempo considerável.

Caso algum outro aluno queira complementar essa apostila, ainda é possível trazer exemplos diferentes e ainda mais assuntos que também são relevantes para engenheiros, como gráficos de tendência e equações e até avançar para a parte de programação (*Visual Basic*) da própria disciplina de PAPCEQ.

REFERÊNCIAS

MOURA, Luiz Fernando de; ROQUE, Bruna Fernanda de Sousa. Excel: cálculos para engenharia : formas simples para resolver problemas complexos. São Carlos, SP: EdUFSCar, 2013. 162, [1] p. ISBN 9788576003083

Manuais do OpenOffice e linguagem Basic do OpenOffice (em inglês).
https://wiki.openoffice.org/wiki/Documentation/OOo3_User_Guides/OOo3.3_User
https://wiki.openoffice.org/wiki/Documentation/BASIC_Guide

LIENGME, Bernard. A Guide to Microsoft Excel 2013 for Scientists and Engineers. Cambridge: Academic Press, 2015. 382 p.

ARENALES, Selma. Cálculo numérico aprendizagem com apoio de software. São Paulo Cengage Learning 2012 1 recurso online ISBN 9788522109678

FOGLER, H. Scott. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. 4. ed. Rio de Janeiro: Ltc, 2009

APÊNDICE A - APOSTILA PAPCEQ

Neste apêndice é apresentado o objetivo principal do trabalho, o material didático elaborado para a disciplina de PAPCEQ.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

APOSTILA - PAPCEQ

SÃO CARLOS -SP
2021

RAFAEL VINICIUS DA SILVA

Índice

A - Introdução e Objetivo	1
B – Primeiro contato com Planilhas	2
B1 - Elementos Básicos de Planilhas	2
B2 - Operações e Hierarquias	3
B3 - Operadores Lógicos (SE, E, OU e SEERRO)	4
B4 - Operadores com vetores e matrizes	5
B5 - Raízes e pontos de inflexão – Funções de uma variável	8
C – Nível Intermediário	12
C1 – Formatação Condicional	12
C2 – Funções de busca (PROCV e PROCH)	12
C3 – Tabelas dinâmicas	13
D – Métodos de cálculo numérico	16
D1 - Máximo e mínimo de funções - Método de Newton	16
D2 – Método de Euler	18
D3 – Runge-Kutta de 4ª Ordem	19
Referências Bibliográficas	22

A - Introdução e Objetivo

A disciplina de PAPCEQ (Projeto de algoritmos e programação computacional para engenharia química) é de extrema importância para a formação do engenheiro, por capacitar os alunos a resolver diversos problemas, tanto no decorrer do curso, quanto na vida profissional, utilizando planilhas eletrônicas.

Essa apostila tem como objetivo auxiliar o professor ministrante da disciplina de PAPCEQ por meio de exemplos, sendo um material didático para a parte de planilhas eletrônicas da ementa da disciplina.

Do ponto de vista do aluno, esse material visa servir como uma fonte de consulta durante a disciplina e durante as próximas do curso que utilizam planilhas para resolução de problemas.

B – Primeiro Contato com Planilhas

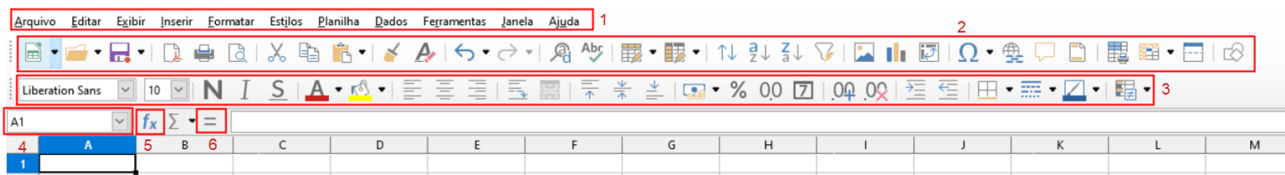
Esta primeira seção visa favorecer o primeiro contato com softwares de planilha, como por exemplo o Microsoft Excel, Google Sheets e Libreoffice, abordar hierarquias dos operadores, funções básicas que podem ser utilizadas para muitas aplicações.

Ao final desta, são apresentados métodos para encontrar raízes de funções de uma variável, tendo em vista o que é apresentado nesta seção e conhecimentos prévios do aluno.

B1 - Elementos Básicos de Planilhas

Ao abrir o LibreOffice Calc, você vai se deparar com as células e o menu, como mostrado na Figura 2.1, com alguns destaques que serão explicados a seguir.

Figura 2.1: Interface planilha.



1- As abas acima apresentam os menus com as opções de interação, por exemplo salvar arquivos, abrir um novo arquivo, exibir linhas de grade, impressão, opções de ajuda, entre outras.

2- Abaixo temos os pictogramas para representar os atalhos para cada função, como as pastas para abrir os arquivos, disquete para salvar, etc. Os atalhos podem ser alterados em Exibir → Barra de Ferramentas.

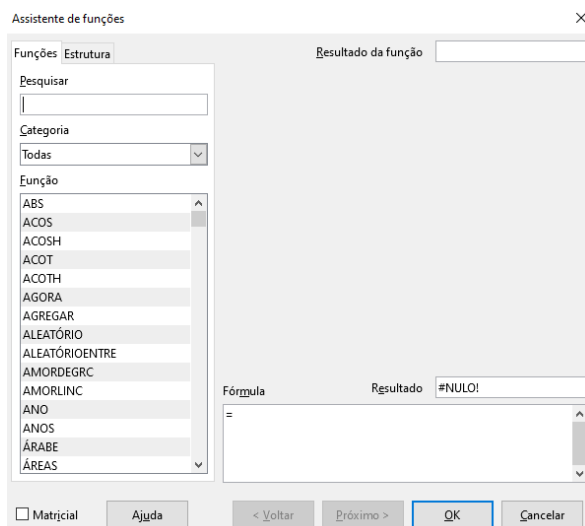
3- Nessa parte temos as opções de texto, como fonte, tamanho, cores das fontes e dos fundos das células, também há opções de formatação da da célula, como número, valor financeiro, data, etc. Também é possível utilizar o comando Ctrl+1 para formatar as células.

4- Mais próximo às células temos o nome da célula, representado por um concatenado da Coluna com a Linha em que a célula se encontra, no caso o cursor se encontra na célula A1, ou seja, primeira coluna e primeira linha. Para alterar o nome da célula basta editar esse campo com o nome desejado, mas não é possível alterar o nome para o nome de uma outra célula.

5- Ao lado, no botão “fx” podemos encontrar todas as funções que o Calc possui com uma breve descrição, é possível realizar pesquisas, como mostrado na Figura 2.2.

6- Na direita do botão “fx”, temos um sinal de “=” e uma caixa para texto, nela é possível escrever o que irá preencher a tela, para utilizar fórmulas, é necessário iniciar o texto com “=”, por exemplo, “=SOMA(A1;A2;A3)”.

Figura 2.2: Interface de busca de funções.



Na parte inferior, temos as abas do arquivo, é possível criar diversas abas em um mesmo arquivo e é possível utilizar valores em outras abas.

Não é possível passar por todas as funções e atalhos nessa breve introdução, então, para demais dúvidas sempre é possível utilizar o atalho “F1” para acessar a central de ajuda do LibreOffice, também é possível acessar pelo Link: [Ajuda LibreOffice Calc](#)

B2 - Operações e Hierarquias

Para realizar operações no Calc, basta iniciar a fórmula com o operador “=” e utilizar os operadores matemáticos:

- “+” para soma;
- “-” para subtração;
- “/” para divisão;
- “*” para multiplicação;
- “^” para exponencial.

As células utilizadas nos cálculos podem ser selecionadas utilizando o *mouse*, podem ser digitadas ou podem ser selecionadas utilizando os cursores do teclado.

Ao realizar operações matemáticas é necessário ter em mente a ordem que o Calc processará a equação.

Primeiro são realizados cálculos entre **parênteses**, caso estejam aninhados, serão realizados de dentro para fora, depois serão realizados cálculos de **potenciação**, depois cálculos de **divisão e multiplicação** (se iniciando da **esquerda para a direita**) e por fim, os cálculos de **soma e subtração**, também da esquerda para a direita.

Exemplo: Utilizando a Tabela 3.1 abaixo, vamos realizar o passo a passo do cálculo da seguinte fórmula: $=A1+A2^A3*((A4*A5+A6)+A7*A8)$

Tabela 3.1: Valores para exemplo hierarquia.

Célula	Valor
A1	1
A2	2
A3	3
A4	4
A5	5
A6	6
A7	7
A8	8

Começando pelos parênteses internos: $(A4 * A5 + A6)$;

1. Como há apenas multiplicação e soma, devemos começar pela multiplicação: $A4 * A5 = 4 * 5 = 20$;
2. Agora podemos seguir para a soma: $(20 + A6) = 20 + 6 = 26$;
3. Seguimos para os próximos parênteses: $(26 + A7 * A8)$;
4. A próxima operação a ser feita é a multiplicação: $A7 * A8 = 7 * 8 = 56$;
5. Agora podemos finalizar esses parênteses: $26 + 56 = 82$;
6. Como não há mais parênteses, temos: $A1 + A2 * A3 * 82$;
7. Seguindo a hierarquia, precisamos fazer o exponencial primeiro: $A2 * A3 = 2^3 = 8$;
8. Agora vamos seguir para a multiplicação: $8 * 82 = 656$;
9. Por fim, podemos realizar a soma: $1 + 656 = 657$.

B3 - Operadores Lógicos (SE, E, OU e SEERRO)

Alguns operadores lógicos são extremamente úteis para construção de fórmulas mais complexas, dentre eles, temos as funções “SE”, “E” e “OU”.

Começando pela função “SE”: Quando digitamos no campo de fórmulas “=SE(”, vemos que a função possui três argumentos, para a explicação, vamos usar o exemplo: “=SE(A1=1; “Primeiro”; “Segundo”)”.

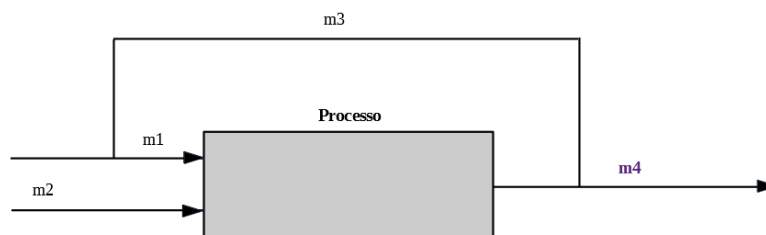
O primeiro argumento é o que vai ser testado e deve sempre retornar um valor binário (“VERDADEIRO” ou “FALSO”), no exemplo $A1=1$, o segundo argumento define o retorno da função caso a primeira parte seja verdadeira, ou seja, caso $A1$ seja igual a 1, a função vai retornar o texto “Primeiro”, caso $A1$ tenha qualquer valor diferente de 1, a função vai retornar “Segundo”.

Partindo para a função “E”: Quando inserimos a função “=E(” vemos que ela tem pelo menos 2 argumentos, cada argumento deve ser um teste lógico (assim como o primeiro da função “SE(”). Essa função vai retornar o valor lógico “VERDADEIRO” quando todos os critérios forem verdadeiros ao mesmo tempo ou o valor “FALSO” quando qualquer um dos testes lógicos é falso.

Por fim, a função “OU”: Ao inserir a função “=OU(” temos que a construção da função é muito similar à função “E”, mas para que a função “OU” retorne o valor lógico “VERDADEIRO” basta que um dos argumentos seja verdadeiro e para que retorne “FALSO” todos os argumentos devem ser falsos.

Exemplo: Para o processo químico genérico da Figura 4.1 abaixo, sendo conhecidas as vazões mássicas m_1 , m_2 e m_3 é possível montar uma calculadora para m_4 , em destaque.

Figura 4.1: Processo genérico.



Na Figura 4.2 vemos a interface da calculadora com a legenda indicando quais campos são editáveis (valores de m1, m2 e m3) e quais são calculados (valor de m4 e unidades).

Figura 4.2: Interface Calculadora Balanço

Calculadora - Balanço		
m1	4	kg/s
m2	5	kg/s
m3	7	kg/s
m4	16	kg/s
Legenda		
Campos editáveis		
Campos calculados (fixos)		

Na célula que apresenta o valor de m4, temos a fórmula:

`"=SE(OU(C6="";C7="";C8="");"Inserir todos os argumentos m1, m2 e m3";SE(E(C6>=0;C7>=0;C8>=0);SOMA(C6:C8);"Inserir vazões mássicas válidas"))"`

Na célula que apresenta a unidade de m4, temos a fórmula:

`"=SE(ÉTEXTO(C10);"";SE(E(D6="kg/s";D7="kg/s";D8="kg/s");"kg/s";"Não alterar as unidades de kg/s"))"`

A função “SEERRO” possui aplicações ainda mais amplas, pois pode ser combinada com praticamente qualquer outra função para consertar situações em que os resultados retornam qualquer tipo de erro.

Ela possui apenas dois termos, o primeiro é a função que estamos utilizando e o segundo é o valor que desejamos que seja retornado caso haja algum erro.

B4 - Operadores com vetores e matrizes

Operações matriciais podem ser muito trabalhosas para serem realizadas em operações manuais (no papel), mas utilizando planilhas esses cálculos se tornam muito simples e até mesmo mais fáceis de se organizar e visualizar.

Vale notar que para realizar operações matriciais, é necessário redigir as fórmulas e ao terminar apertar as teclas **Ctrl+Shift+Enter** para que o Calc realize os cálculos matriciais.

Quando isso é feito, aparecem sinais de chaves na fórmula (“{” no início e “}” ao final), indicando que é um cálculo matricial.

As fórmulas de operações matriciais no Calc sempre se iniciam com a sintaxe “MATRIZ.”, assim temos as fórmulas:

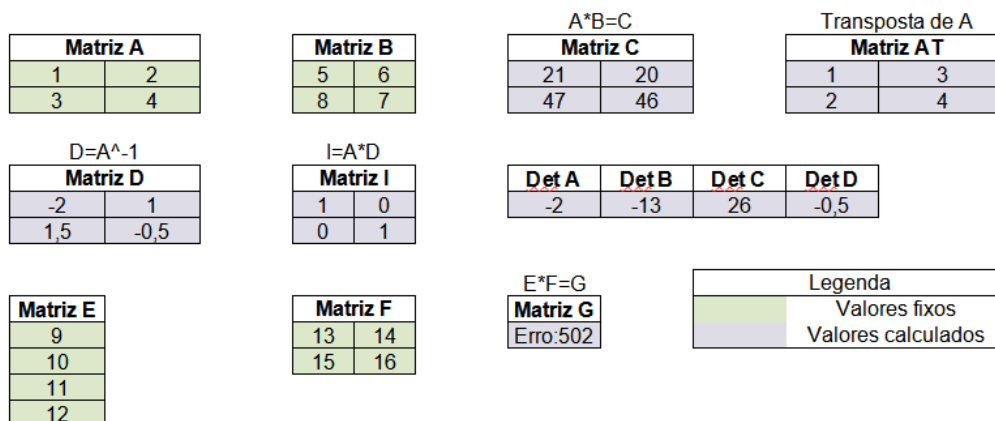
- **MATRIZ.MULT:** utilizada para multiplicação de matrizes;
- **MATRIZ.DETERM:** utilizada para cálculo do determinante de uma matriz;
- **MATRIZ.INVERSO:** utilizada para calcular a matriz inversa da matriz selecionada;
- **MATRIZ.UNIDADE:** retorna a matriz identidade com o tamanho correspondente ao da matriz selecionada.

Além dessas, outra função útil em operações matriciais é a função “TRANSPOR” para organizar os dados de modo a atender as suas necessidades.

Note que: caso uma operação matricial não seja possível, o Calc retornará a mensagem de “Erro:502”.

Na figura 5.1 abaixo, temos os exemplos das funções matriciais aplicadas às Matrizes A, B, E e F:

Figura 5.1: Exemplo operações matriciais.



Matrizes podem ser utilizadas para resolução de sistemas de equação de diversos modelos, vamos utilizar como exemplo reatores de mistura contínua perfeitamente agitados em série, conhecidos como CSTR (*continuous stirred tank reactors*), seguindo a Figura 5.2.

A reação a ser apresentada possui cinética de 1ª ordem e obedece a Equação 5.1:

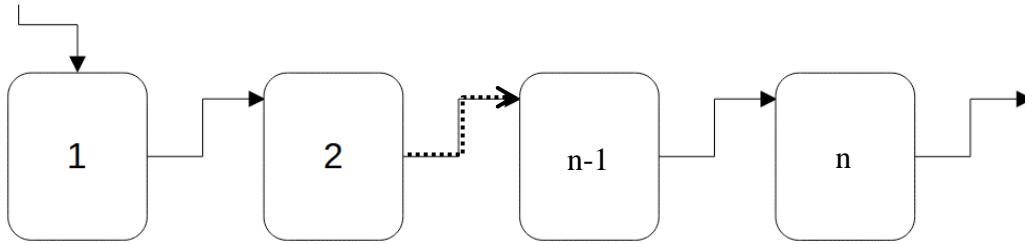
Equação 5.1: Equação CSTR com reação em primeira ordem.

$$REAGE = k * C_{As} * V$$

Sendo:

- C_{As} : Concentração de A que sai do reator;
- k : Constante de reação;
- V : Volume do reator.

Figura 5.2: Modelo de “n” reatores CSTR em série.



O balanço do reagente “A” de um reator CSTR, sendo que a vazão volumétrica é constante, a reação é de primeira ordem e a operação é em estado estacionário, pode ser descrito pela Equação 5.2.

Equação 5.2: Balanço de massa em um reator CSTR em estado estacionário.

$$\text{ACUMULA} = \text{ENTRADA} - \text{SAÍDA} - \text{REAGE}$$

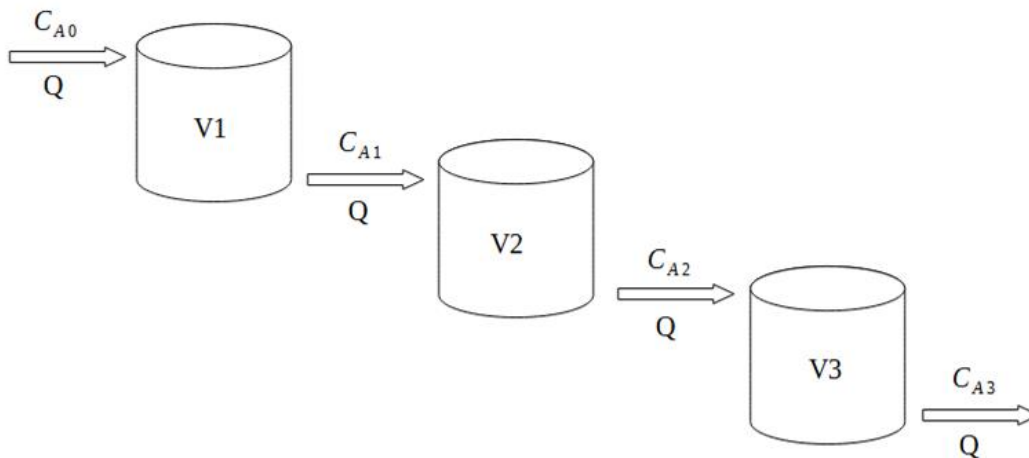
$$0 = C_{Ai} * Q - C_{As} * Q - k * C_{As} * V$$

Sendo:

- C_{Ai} : Concentração de A que entra no reator;
- C_{As} : Concentração de A que sai do reator;
- Q : Vazão volumétrica;
- k : Constante de reação;
- V : Volume do reator.

Vamos tomar como exemplo a Figura 5.3, em que temos definimos 3 reatores CSTR em série.

Figura 5.3: Exemplo Reatores CSTR em série.



Com a Equação 5.2 e tendo em mente a Figura 5.3, conseguimos montar o sistema de equações dado pela Equação 5.3.

Equação 5.3: Sistema de Equações de balanço - CSTR em série.

$$0 = Q * C_{A0} - Q * C_{A1} - k * C_{A1} * V_1$$

$$0 = Q * C_{A1} - Q * C_{A2} - k * C_{A2} * V_2$$

$$0 = Q * C_{A2} - Q * C_{A3} - k * C_{A3} * V_3$$

A forma matricial da equação é da forma $A*x=B$, então para encontrarmos a resolução do problema basta calcularmos $x=A^{-1}*B$, notem que C_{A0} não é uma incógnita do problema, logo, faz parte da matriz B.

Tendo tudo isso em vista, podemos calcular os valores de C_{An} seguindo a Figura 5.4.

Figura 5.4: Resolução Sistema de Equações CSTR.

Reator	Balanço
Reator 1:	$0=Q*CA0-Q*CA1-k*CA1*V1$
Reator 2:	$0=Q*CA1-Q*CA2-k*CA2*V2$
Reator 3:	$0=Q*CA2-Q*CA3-k*CA3*V3$

Constantes	
V1	10L
V2	10L
V3	10L
Q	0,5L
k	0,1 Min ⁻¹
CA0	1 mol/L

Matriz x
CA1
CA2
CA3

Matriz A		
-1,5	0	0
0,5	-1,5	0
0	0,5	-1,5

Matriz B
-0,5
0
0

Matriz A ⁻¹		
-0,667	0,000	0,000
-0,222	-0,667	0,000
-0,074	-0,222	-0,667

Resolução Matriz x	
CA1 =	0,333
CA2 =	0,111
CA3 =	0,037

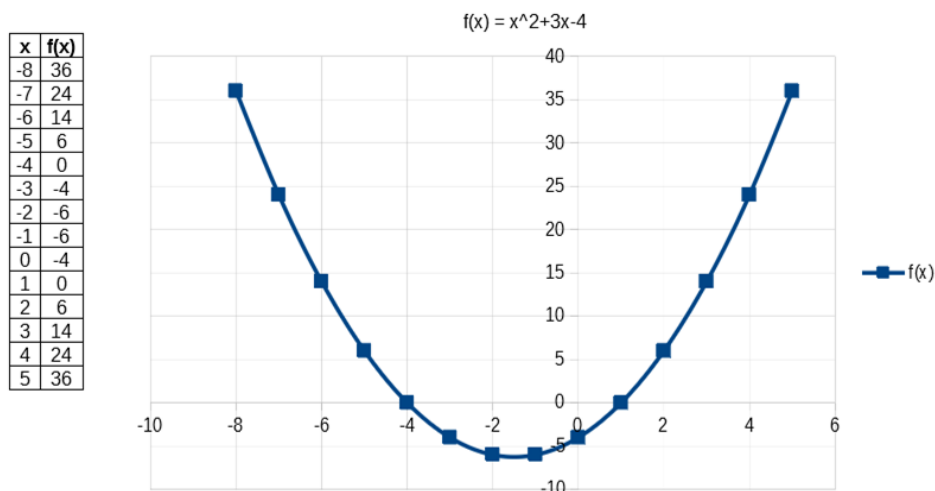
Sendo:

- C_{An} : As concentrações da substância "A" na saída de cada um dos reatores;
- V_n : O volume de cada reator;
- k : Constante cinética da reação;
- Q : Vazão volumétrica no processo.

B5 - Raízes e pontos de inflexão – Funções de uma variável

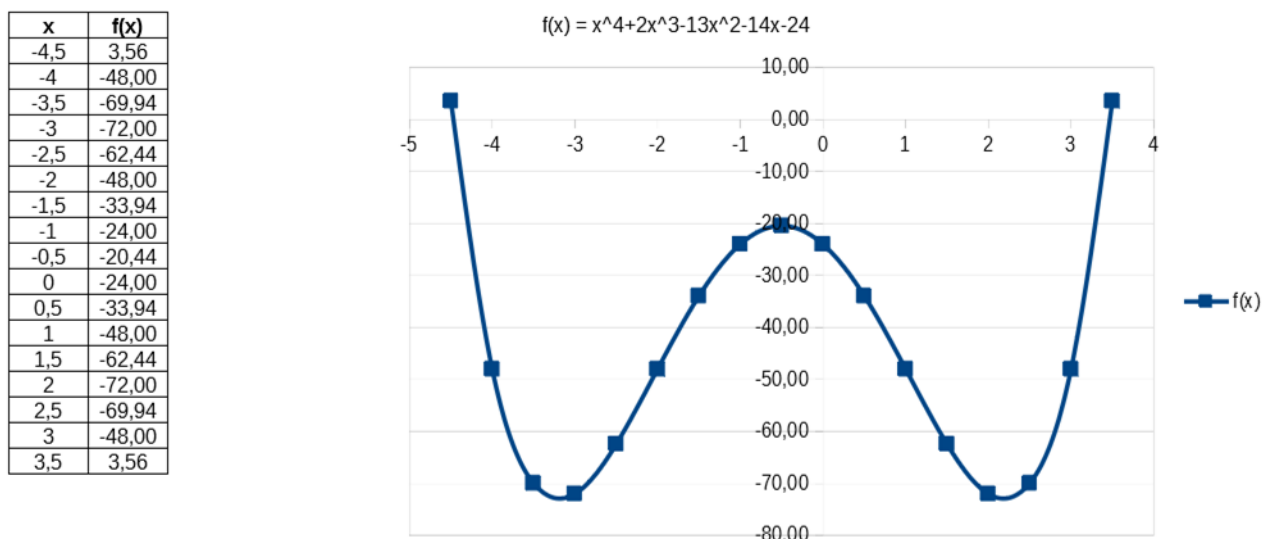
Usando planilhas fica muito simples visualizar graficamente funções de uma variável em intervalos estabelecidos. Em alguns casos é possível estabelecer quais são as raízes das funções por tentativa e erro, como no exemplo representado na Figura 6.1.

Figura 6.1: Exemplo de função quadrática.



Porém, algumas vezes não é simples encontrar as raízes de um polinômio, principalmente quando esse polinômio possui grau alto, como representado na Figura 6.2.

Figura 6.2: Exemplo de polinômio grau 4.



Nesse caso, as conclusões que tiramos são que a função possui 2 raízes imaginárias e outras 2 reais, mas não foi possível encontrá-las com um espaçamento de 0,5, apenas foi possível descobrir que elas se encontram nos intervalos entre -4,5 e -4 e a outra entre 3 e 3,5.

Utilizando o Calc também é possível estimar os pontos críticos (pontos de mínimo ou máximo locais) de funções, utilizando a mesma função do gráfico acima $f(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x - 24$, a única coisa que precisamos fazer fora do Calc é derivar a função, obtendo $f'(x) = 4x^3 + 6x^2 - 26x - 14$ e também $f''(x) = 12x^2 + 12x - 26$. Realizando essas operações, temos a seguinte tabela da Figura 6.3 com os pontos críticos e intervalos em que eles se encontram em destaque.

Figura 6.3: Tabela de valores de x e derivadas.

x	f'(x)	f''(x)
-4,5	-140,0	163,0
-4	-70,0	118,0
-3,5	-21,0	79,0
-3	10,0	46,0
-2,5	26,0	19,0
-2	30,0	-2,0
-1,5	25,0	-17,0
-1	14,0	-26,0
-0,5	0,0	-29,0
0	-14,0	-26,0
0,5	-25,0	-17,0
1	-30,0	-2,0
1,5	-26,0	19,0
2	-10,0	46,0
2,5	21,0	79,0
3	70,0	118,0
3,5	140,0	163,0

Na tabela é possível notar que encontramos o ponto $x=-0,5$ como sendo um máximo local, pois $f'(x)=0$ e $f''(x)<0$, nesse ponto $f(x)=-20,44$ segundo a Figura 6.3.

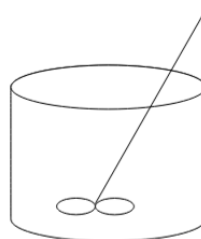
Sabemos também que existem outros dois pontos críticos, um no intervalo entre -3,5 e -3 e outro entre 2 e 2,5, pois nesses intervalos notamos que $f'(x)$ passa por uma inversão de sinal e, por se tratar de uma função contínua, passa pelo ponto $f'(x)=0$. Além disso, podemos concluir que são pontos de mínimo, pois $f''(x)>0$ em todo esse intervalo e também se trata de uma função contínua.

Posteriormente, vamos explorar como encontrar esses pontos por metodologias de cálculo numérico e ferramentas automáticas do próprio Calc (atingir meta e solver).

Utilizando os conhecimentos apresentados, é possível também plotar e visualizar como se comportam concentrações de reagentes em reatores batelada por meio de gráficos, para mostrar o exemplo vamos falar brevemente sobre reatores em batelada.

Exemplo: Um reator em batelada se trata de um tanque onde ocorre a reação, é representado como mostra a Figura 6.4 abaixo. Como nesse reator não há entrada nem saída, temos apenas que o que reage equivale ao que é acumulado no reator.

Figura 6.4: Representatividade Reator Batelada.



$$\text{SAI} = \text{ENTRA} - \text{ACUMULA} - \text{REAGE}$$

$$\text{REAGE} + \text{ACUMULA} = 0$$

Tendo isso em vista, temos que a Equação 6.1 representa o balanço diferencial de um reator batelada, com uma reação $A \rightarrow B$ de primeira ordem, em função do reagente A:

Equação 6.1:

$$-dC_A/dt = -r_A = -kC_A$$

Sendo:

- C_A : a concentração molar de A na mistura após um tempo específico;
- t : o tempo de reação;
- r_A : a velocidade de reação;
- k : a constante de velocidade da reação.

Com isso, podemos montar o exemplo para visualizar graficamente como funciona a reação nesse reator, dados que:

Para $t=0$, temos que $C_A = C_{A0} = 10 \text{ mol/L}$ e que $k=0,5 \text{ mol/L/h}$ e vamos considerar a seguinte integração, de $t=0$ até $t=t_1$, em horas, da Equação 6.1, gerando a Equação 6.2:

Equação 6.2:

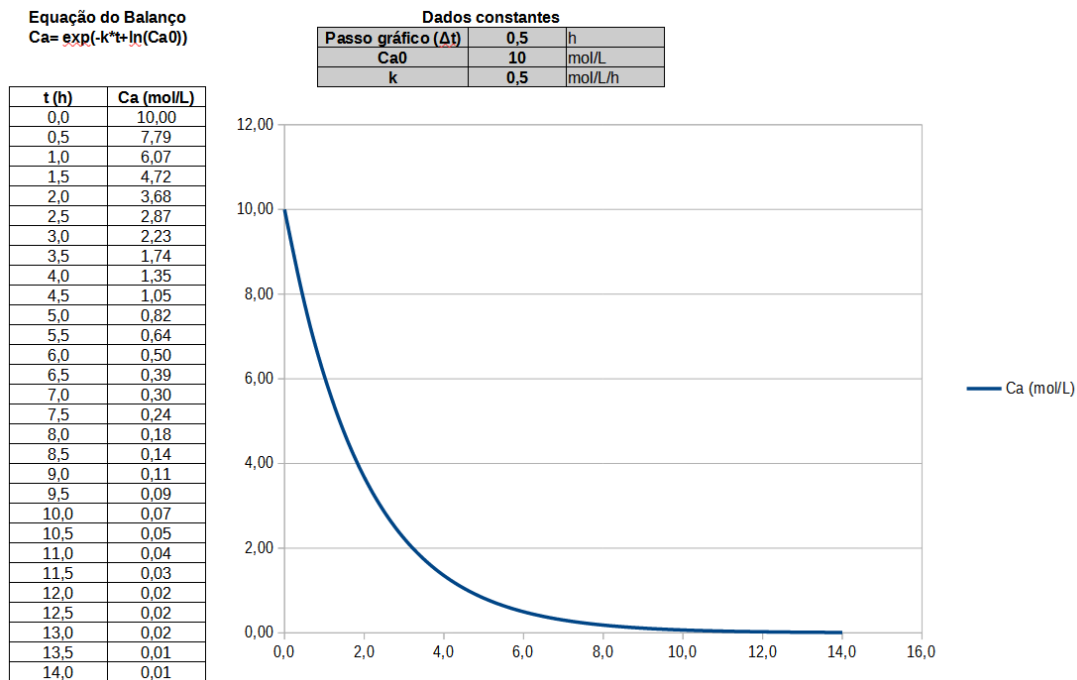
$$\int dC_A/C_A = -k^* \int dt$$

$$\ln(C_A) - \ln(C_{A0}) = -k^*(t_1 - 0)$$

$$C_A = C_{A0} * \exp(-kt_1)$$

Utilizando a Equação 6.2, conseguimos plotar o gráfico com os dados representados na Figura 6.5 e monitorar como ocorre a variação da concentração do reagente A no interior do reator.

Figura 6.5: Concentração do reagente A em reator batelada ao longo do tempo.



C – Nível Intermediário

Nesta seção serão apresentadas funções e aplicações intermediárias, como formatações condicionais e funções de busca.

Além disso, também há uma breve abordagem sobre tabelas dinâmicas, que também possuem uma ampla gama de aplicações, mas não costumam ser utilizadas ao longo do curso de engenharia química.

C1 - Formatação Condicional

A formatação condicional pode ser utilizada para deixar mais visual os resultados das planilhas, sendo possível formatar células com valores maiores ou menores que determinado valor, também é possível fazer a formatação baseado em valores específicos.

Para utilizar esse recurso, basta acessar na barra superior Formatar → Condicional e selecionar o tipo de formatação desejado. Pode ser formatar células com valores específicos (podem ser tanto numéricos quanto em texto), com valores maiores ou menores que outro valor (pode ser um valor fixo ou comparado com outra célula), entre outros tipos de comparação.

Um bom treino para essa função é utilizar a função “SE” para retornar se um aluno está aprovado, de recuperação ou reprovado em uma disciplina, com base na média e na porcentagem de presença do aluno na disciplina.

C2 - PROCV e PROCH

O Calc possui algumas funções que podemos utilizar para buscar algum valor e encontrar um outro valor atrelado ao primeiro, como “ÍNDICE”, “CORRESP”, “PROCV” e “PROCH”, sendo as duas últimas as mais conhecidas e utilizadas.

Estas funções são utilizadas para buscar os valores em coluna (PROCV) e em linha (PROCH).

Elas possuem sintaxes semelhantes, compostas por 4 termos:

- 1º: O valor que será buscado;
- 2º: A matriz onde desejamos fazer a busca (um ponto importante, é que essas funções realizam buscas apenas na primeira coluna no caso do PROCV e na primeira linha no caso do PROCH);
- 3º: O número da coluna (PROCV) ou da linha (PROCH) onde está o correspondente que estamos buscando;
- 4º: Critério de pesquisa, esse é um campo binário, ou seja, 1 ou 0, caso utilizado o valor 1, a busca será de um valor aproximado, caso seja utilizado 0, a função vai buscar exatamente o valor inserido no primeiro termo.

Essas funções são muito úteis para encontrar valores em bases de dados extensas e serão apresentadas em exemplos a seguir.

O maior cuidado que temos que tomar ao usar essas funções é que elas retornam o primeiro valor encontrado, então em uma base em que a chave de busca se repete, pode ser que não seja encontrado o valor esperado, ou seja, no caso do PROCV, a função retorna o valor encontrado na linha mais acima e para o PROCH, o valor na coluna mais à esquerda.

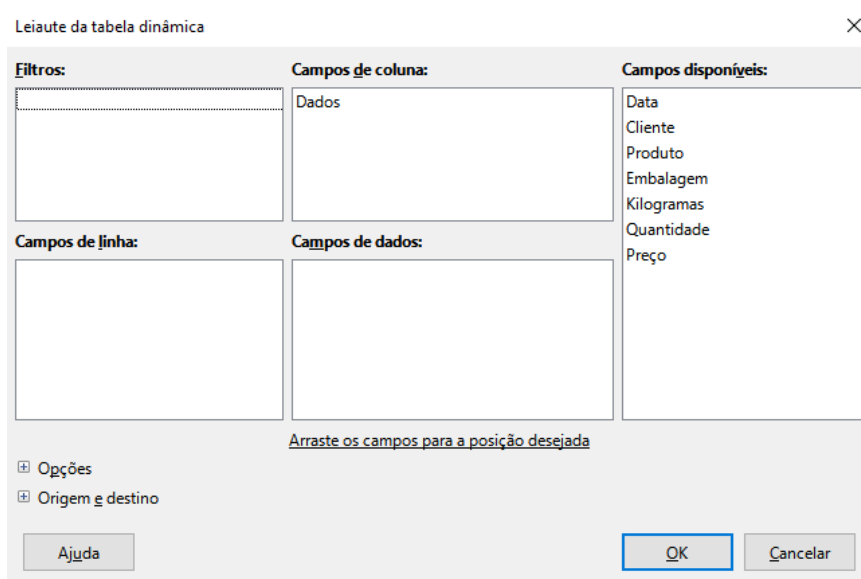
C3 - Tabelas dinâmicas

A função de tabela dinâmica é muito útil quando trabalhamos com uma base de dados maior, por meio dela conseguimos agrupar os dados da maneira que for mais conveniente. Para o exemplo a ser apresentado foi gerada uma base com dados de vendas de produtos químicos (os dados foram gerados aleatoriamente).

Para criar uma tabela dinâmica, é necessário selecionar a base de dados inteira e no menu “Inserir” selecionar “Tabela dinâmica”. Ao fazer isso, um primeiro menu irá aparecer, com opções de células selecionadas e opções avançadas de criação, então basta avançar por ele.

Em seguida, temos um outro menu representado na Figura B2.1:

Figura B2.1: Menu de criação de tabela dinâmica.



Nesse menu, basta arrastar os campos desejados para definir como a tabela dinâmica irá agregar os dados. Os campos que aparecem na Figura B2.1 representam:

- Data: Data da compra;
- Cliente: Nome do cliente;
- Produto: Qual o material que foi comprado;
- Embalagem: Tipo de embalagem do produto (tamanho da embalagem);
- Kilogramas: Quantidade de quilogramas na embalagem;
- Quantidade: Quantidade de embalagens que foi comprada;
- Preço: Preço que foi pago pelo cliente.

Na região dos filtros, podemos inserir campos que desejamos filtrar a tabela inteira, mas eles não aparecem na tabela. Ao mesmo tempo é possível filtrar dados em outros campos e assim eles aparecem na tabela.

Nas linhas e colunas escolhemos o que queremos ver por linha e por coluna e no campos de dados, escolhemos quais dados queremos que a tabela dinâmica nos traga.

Na tabela de exemplo da Figura B2.2, escolhemos ver as quantidades de embalagens que foram vendidas no ano de 2020, com uma visualização mês a mês.

Figura B2.2: Tabela dinâmica resultante.

Soma - Quantidade	Data														
Embalagem	01/2020	02/2020	03/2020	04/2020	05/2020	06/2020	07/2020	08/2020	09/2020	10/2020	11/2020	12/2020	Total Resultado		
Material A - 100kg	5385	5800	5448	5754	5801	5948	5877	5518	5388	6246	5990	5639	68794		
Material A - 500kg	6060	5995	6001	5276	5520	5507	5344	5474	5698	6171	5463	5819	68328		
Material A - 50kg	5537	5997	5750	5857	5508	5538	5128	6181	6372	5397	6082	6187	69534		
Material B - 50kg	5738	5704	5831	5955	6001	6054	5906	5741	5425	5701	5315	5001	68372		
Material B - 100kg	5470	5616	5766	6112	5787	5567	5563	5357	5240	5568	6332	5485	67863		
Material B - 25kg	5458	5929	5447	5679	5224	5756	5499	5464	5788	5842	5772	5935	67793		
Material C - 100kg	5888	5973	5311	5762	6057	5832	5492	5679	5412	5827	5669	6013	68915		
Material C - 200kg	5791	6004	5893	6156	5573	5272	5742	5707	5944	6003	6171	5435	69691		
Total Resultado	45327	47018	45447	46551	45471	45474	44551	45121	45267	46755	46794	45514	549290		

É possível escolher como os dados serão agregados e exibidos, por exemplo, podemos escolher ver a média de preços das transações por embalagem e por mês, ou ver a soma da quantidade vendida de cada embalagem por mês, que é o que está sendo exibido. Também é possível visualizar apenas valores máximos ou mínimos, desvio padrão, entre outros.

Caso seja necessário editar a tabela, basta clicar com o direito em qualquer célula da tabela dinâmica e selecionar “Propriedades” que o menu da figura B2.1 é aberto novamente.

Ao dar um duplo clique em qualquer campo, é aberta uma janela com algumas opções e abaixo encontramos um botão de “Opções”, clicando nele, podemos selecionar “Repetir os rótulos dos itens” caso tenhamos mais de um campo nas linhas ou colunas, assim uma nova base de dados mais simples é formada.

A partir dessa base de dados mais simples e utilizando da função “CONCATENAR”, que basicamente une o conteúdo de duas células em uma só, podemos criar chaves de busca.

Tendo essas chaves, podemos utilizar PROCV para encontrar os dados desejados, uma vez que, agora sabemos que não temos mais repetições de itens.

A Figura B2.3 mostra a tabela dinâmica junto com a chave de busca:

Figura B2.3: Tabela dinâmica final, com chave de busca.

Soma - Quantidade		Data											Total	Resultado	
CHAVE DE BUSCA	Embalagem	01/2020	02/2020	03/2020	04/2020	05/2020	06/2020	07/2020	08/2020	09/2020	10/2020	11/2020	12/2020		
Cliente 1	Material A - 100kg	239	261	192	235	78	184	182	186	188	242	184	190		2361
Cliente 1	Material A - 500kg	208	170	254	194	216	339	166	202	120	244	250	111		2474
Cliente 1	Material A - 50kg	231	216	181	216	132	113	179	260	221	176	242	224		2391
Cliente 1	Material B - 50kg	184	117	229	267	226	168	172	166	205	108	149	129		2120
Cliente 1	Material B - 100kg	182	195	260	217	277	233	282	183	212	122	196	208		2567
Cliente 1	Material B - 25kg	159	182	247	107	288	225	232	244	176	240	162	194		2456
Cliente 1	Material C - 100kg	165	108	265	221	208	261	182	235	169	255	126	181		2376
Cliente 1	Material C - 200kg	239	152	236	170	195	157	112	197	163	291	185	146		2243
Cliente 10	Material A - 100kg	184	263	144	203	209	147	117	224	157	103	373	232		2356
Cliente 10	Material A - 500kg	261	121	278	197	170	143	164	134	257	252	122	199		2298
Cliente 10	Material A - 50kg	240	186	211	239	210	112	171	148	242	171	250	158		2338
Cliente 10	Material B - 50kg	231	166	154	127	308	211	251	286	172	229	125	246		2506
Cliente 10	Material B - 100kg	125	203	226	196	226	161	147	128	167	158	188	159		2084
Cliente 10	Material B - 25kg	235	229	216	208	187	198	110	255	119	196	168	202		2323
Cliente 10	Material C - 100kg	218	241	171	140	270	226	217	96	174	252	118	210		2333
Cliente 10	Material C - 200kg	142	153	129	165	224	220	184	175	113	121	160	187		1973
Cliente 11	Material A - 100kg	215	172	247	258	236	216	218	114	260	230	161	142		2469
Cliente 11	Material A - 500kg	220	226	222	144	239	124	226	155	221	144	115	221		2257
Cliente 11	Material A - 50kg	157	192	213	190	311	235	176	174	284	164	187	169		2452
Cliente 11	Material B - 50kg	193	88	176	211	141	223	323	252	218	258	248	240		2571
Cliente 11	Material B - 100kg	312	198	218	262	174	97	189	256	194	230	156	161		2447
Cliente 11	Material B - 25kg	170	132	229	200	177	154	159	243	264	165	247	151		2291
Cliente 11	Material C - 100kg	165	213	111	251	206	144	162	134	225	244	156	210		2221
Cliente 11	Material C - 200kg	196	143	197	162	178	74	206	210	205	238	189	120		2118
Cliente 12	Material A - 100kg	176	131	163	280	190	216	122	195	177	105	164	211		2110
Cliente 12	Material A - 500kg	189	254	198	167	270	189	193	153	141	132	163	231		2280
Cliente 12	Material A - 50kg	133	222	211	205	179	210	146	178	300	175	164	188		2311
Cliente 12	Material B - 50kg	170	170	194	208	149	221	172	149	179	209	234	136		2191
Cliente 12	Material B - 100kg	186	243	229	270	291	239	178	242	164	314	117	198		2671
Cliente 12	Material B - 25kg	270	236	152	234	242	200	207	124	193	74	164	161		2257
Cliente 12	Material C - 100kg	227	200	187	280	200	184	254	216	135	219	259	355		2716
Cliente 12	Material C - 200kg	320	269	205	282	181	275	194	232	195	215	192	258		2618

Com isso, conseguimos resumir bases de dados em poucas linhas e deixar mais simples e certas buscas, cálculos e visualizações.

O maior cuidado que temos de tomar ao utilizar tabelas dinâmicas é que elas aumentam a necessidade de uso do processador, o que deixa a planilha mais lenta ao ser executada e podem causar perdas de desempenho caso a planilha possua muitas tabelas dinâmicas e muitos cálculos.

D - Métodos de cálculo numérico

A seguir serão apresentados métodos matemáticos relevantes para a formação do engenheiro, dentre eles será apresentada uma outra forma de encontrar máximos e mínimos de funções (Método de Newton), além de outros métodos que serão abordados futuramente em outras disciplinas (como o método de Euler e o Runge Kutta).

D1 - Máximo e mínimo de funções - Método de Newton

Além de utilizar o método gráfico e metodologias algébricas de derivadas é possível encontrar esses valores por métodos iterativos.

Para esse próximo exemplo, vamos utilizar o método de Newton Raphson, que a partir da série de Taylor e considerando que a função não tenha grande variação ($x_n \approx x_{n+1}$), chegamos na equação A1.1 abaixo:

Equação A1.1: Algoritmo para cálculo pelo método de Newton.

$$x_n = x_{n+1} - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Como a função depende de uma função derivada e como já mostramos que a derivada é zero em pontos de inflexão, então vemos que nesses pontos o método de Newton nos retorna uma divisão por zero.

Para aplicar esse método, vamos utilizar a função e já calculando a primeira derivada e segunda derivada da função, pela Equação A1.2.

Equação A1.2: Função exemplo – Método de Newton.

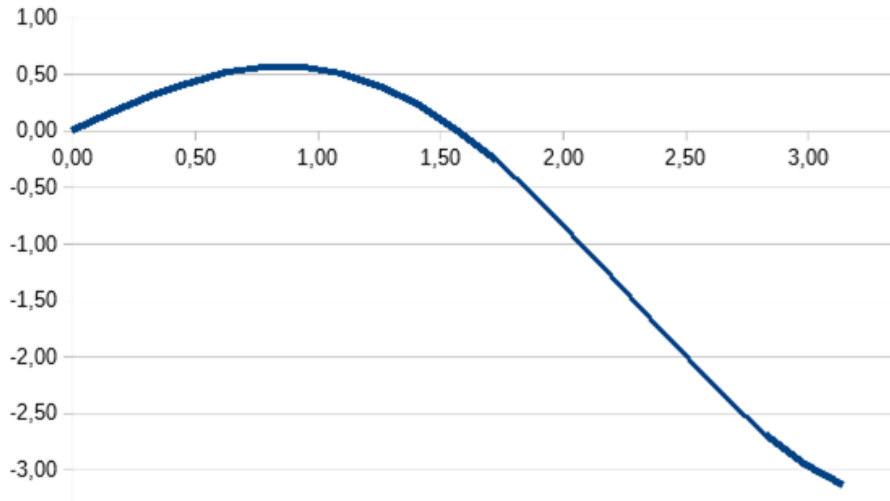
$$f(x) = x \cdot \cos(x)$$

$$f'(x) = \cos(x) - x \cdot \sin(x)$$

$$f''(x) = -2 \cdot \sin(x) - x \cdot \cos(x)$$

Verificando o gráfico de $f(x)$ com $0 \leq x \leq \pi$, obtemos a Figura A1.1:

Figura A1.1: Gráfico de $f(x) = x \cdot \cos(x)$.



Pelo gráfico, podemos observar que existe uma raiz nesse intervalo e que se encontra no intervalo $1,5 < x < 2$, além disso, também podemos observar um máximo local no intervalo $0,5 < x < 1$.

Utilizando o método de Newton Raphson, podemos encontrar a raiz da função e também o ponto de máximo, com poucas iterações, já que temos bons chutes iniciais (de 1,5 para a raiz e 0,5 para o ponto de máximo) por conta do auxílio gráfico, como mostrado na Figura XX:

Figura A1.2: Tabelas de cálculos iterativos de raiz e ponto de máximo.

Raiz				Ponto de máximo			
x	f(x)	f'(x)	x(n+1)	x	f'(x)	f''(x)	x(n+1)
1,500000	0,106106	-1,425505	1,574434	0,500000	0,637870	-1,397642	0,956390
1,574434	-0,005727	-1,578061	1,570805	0,956390	-0,205008	-2,185565	0,862589
1,570805	-0,000013	-1,570813	1,570796	0,862589	-0,004689	-2,080150	0,860335
1,570796	0,000000	-1,570796	1,570796	0,860335	-0,000003	-2,077219	0,860334
				0,860334	0,000000	-2,077217	0,860334

Reparem que encontramos as raízes e pontos de máximo com uma precisão de 6 casas decimais com poucas iterações.

Caso isso fosse feito fora de um software de planilhas, utilizando o mesmo chute inicial, esse processo seria demorado, pois precisaríamos realizar todo o processo várias vezes novamente, na planilha, basta escrever a fórmula apenas uma vez e copiar para o restante da tabela.

Utilizando a ferramenta “Atingir meta” se torna ainda mais trivial encontrar esses pontos (basta acessar “Ferramentas” → “Atingir meta...” no topo da tela).

A limitação dessa ferramenta é ter que saber quais valores estamos buscando, pois nela você seleciona a função que desejamos atingir a meta, no caso $f(x)$, a célula que desejamos variar, que no caso seria x , e o valor que desejamos atingir, ou seja, precisamos conhecer os valores de máximo e mínimo, mas para encontrar raízes ela funciona bem.

D2 - Método de Euler

O método de Euler também é proveniente da série de Taylor, é a expansão da série em torno de um ponto com o termo linear truncado, na prática, ele serve para resolver numericamente Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's), o modelo exige que tenhamos um valor inicial. O método pode ser representado pela Equação A2.1.

Equação A2.1: Modelo de Euler.

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x, y), \text{ com } y(x_0) = y_0$$

Ele consiste em cálculos iterativos, onde colocamos um passo de tamanho "h" e temos que o valor de y_{n+1} é dado pela Equação A2.2:

Equação A2.2: Iterações pelo método de Euler.

$$y_{n+1} = y_n + h * y'_n$$

O passo (h) é dado pela Equação A2.3:

Equação A2.3: Fórmula do passo de Euler.

$$h = \frac{x_f - x_i}{n - 1}$$

Sendo que:

- x_f : valor final de x;
- x_i : valor inicial de x;
- n: número de passos escolhido.

Utilizando esse método não é necessário resolver algebricamente a equação, então podemos trazer esse modelo genérico para nossa realidade com a equação de balanço do reator batelada, já mostrada anteriormente, assim temos a Equação A2.4.

Equação A2.4: Equação do Reator Batelada.

$$C'_A = \frac{dC_A}{dt} = -k * C_A, \text{ com } C_A(t = 0) = C_{A0}$$

Vamos utilizar os mesmos valores, sendo: quando $t=0$, temos que $C_A = C_{A0} = 10$ mol/L e que $k=0,5$ mol/L/h, vamos descobrir qual o valor numérico de C_A para $t=5h$, tendo esses valores e assumindo um passo $n=51$ temos a Equação A2.5:

Equação A2.5: Modelo de Euler Aplicado ao Reator Batelada.

$$C_{A(n+1)} = C_{A(n)} + h * (C'_{A(n)}) = C_{A(n)} - h * k * C_{A(n)}$$

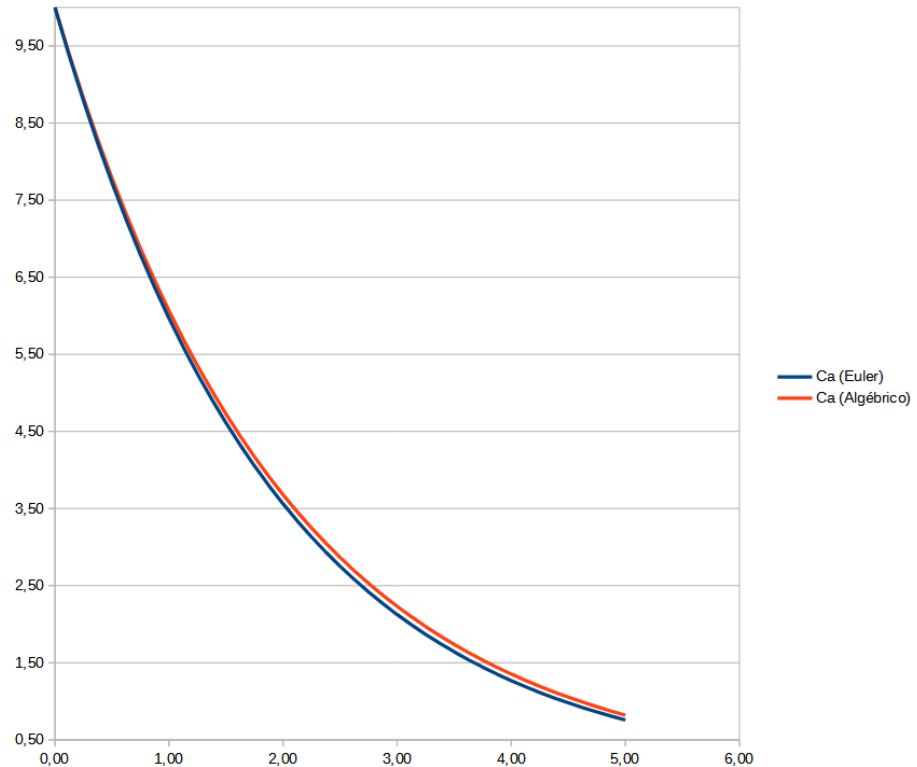
Como já fizemos os cálculos algébricos no exemplo da seção B5, podemos plotar tanto o gráfico do C_A calculado quanto do C_A real. Fazendo os cálculos utilizando a Equação A2.5 e calculando qual a porcentagem de erro do modelo em relação ao valor esperado, na

Figura A2.1 podemos ver qual foi essa diferença. A porcentagem de erro é dada pelo módulo da diferença entre C_A calculado e C_A real, sobre o C_A real.

Figura A2.1: Comparação de C_A pelo modelo de Euler com o cálculo de C_A algébricamente.

Constantes	
CA0	10 mol/L
k	0,5 mol/L/h
ti	0 h
tf	5 h
n	41 passos
h	0,125 h

t	Ca (Euler)	Ca (Algébrico)	Erro do modelo
0,00	10,00	10,00	0,00%
0,13	9,38	9,39	0,20%
0,25	8,79	8,82	0,41%
0,38	8,24	8,29	0,61%
0,50	7,72	7,79	0,81%
0,63	7,24	7,32	1,01%
0,75	6,79	6,87	1,22%
0,88	6,37	6,46	1,42%
1,00	5,97	6,07	1,62%
1,13	5,59	5,70	1,82%
1,25	5,24	5,35	2,02%
1,38	4,92	5,03	2,22%
1,50	4,61	4,72	2,42%
1,63	4,32	4,44	2,62%
1,75	4,05	4,17	2,81%
1,88	3,80	3,92	3,01%
2,00	3,56	3,68	3,21%
2,13	3,34	3,46	3,41%
2,25	3,13	3,25	3,60%
2,38	2,93	3,05	3,80%
2,50	2,75	2,87	4,00%
2,63	2,58	2,69	4,19%
2,75	2,42	2,53	4,39%
2,88	2,27	2,38	4,58%
3,00	2,12	2,23	4,77%
3,13	1,99	2,10	4,97%
3,25	1,87	1,97	5,16%
3,38	1,75	1,85	5,36%
3,50	1,64	1,74	5,55%
3,63	1,54	1,63	5,74%
3,75	1,44	1,53	5,93%



No fim das iterações, temos o valor para $t=5h$, sendo: CA (Euler) = 0,76 mol/L e CA (Algébrico) = 0,82 mol/L, o que nos gera um erro de 7,8%.

Notem que, quanto mais passos utilizamos, menor o valor do “h”, então é possível manipular esse valor, e isso também faz com que o erro diminua.

D3 - Runge-Kutta de 4ª Ordem

Diferente dos apresentados anteriormente, os métodos de Runge-Kutta (RK) não requerem cálculos de derivadas e também são conhecidos como um aperfeiçoamento do método de Euler.

O método de Runge-Kutta de 4ª Ordem (RK4) é proveniente do polinômio de Taylor e utiliza inclinações (dadas pelos componentes k_n na Equação A3.1) para encontrar as soluções adequadas.

A equação que descreve o Runge-Kutta de 4ª ordem está representada na Equação A3.1, mas o cálculo iterativo segue a Equação A3.2.

Equação A3.1: Algoritmo de cálculo de RK4.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} * (k_1 + 2 * k_2 + 2 * k_3 + k_4)$$

Os valores de k seguem as equações representadas abaixo pela Equação A3.2.

Equação A3.2: Fórmulas dos k's de RK4.

$$k_1 = f(t_n, y_n) = y'_n$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3)$$

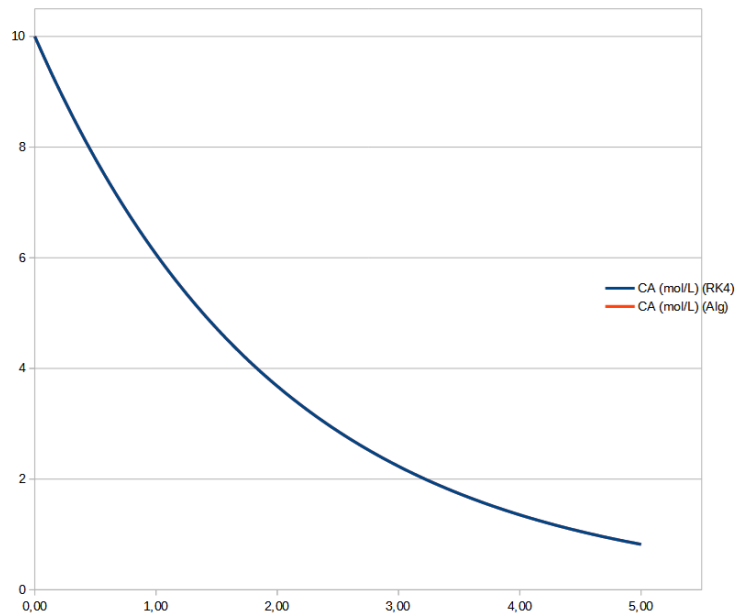
Vamos utilizar novamente o reator batelada como exemplo, assim temos como comparar os resultados dos dois modelos matemáticos e o cálculo algébrico de forma rápida.

Utilizando o modelo, conseguimos chegar na tabela e no gráfico representado na Figura A2.2.

Figura A2.2: Concentração do Reator batelada pelo modelo de Runge-Kutta de 4ª Ordem.

Constantes	
h	0,125 h
k	0,5 h ⁻¹
CA0	10 mol/L
tf	5 h

n	t(h)	k1	k2	k3	k4	CA (mol/L) (RK4)	CA (mol/L) (Alg)	Erro (%)
0	0,00	-	-	-	-	10	10,000	0,000000%
1	0,13	-5,000	-4,844	-4,849	-4,697	9,394	9,394	0,000001%
2	0,25	-4,697	-4,550	-4,555	-4,412	8,825	8,825	0,000002%
3	0,38	-4,412	-4,275	-4,279	-4,145	8,290	8,290	0,000003%
4	0,50	-4,145	-4,016	-4,020	-3,894	7,788	7,788	0,000003%
5	0,63	-3,894	-3,772	-3,776	-3,658	7,316	7,316	0,000004%
6	0,75	-3,658	-3,544	-3,547	-3,436	6,873	6,873	0,000005%
7	0,88	-3,436	-3,329	-3,332	-3,228	6,456	6,456	0,000006%
8	1,00	-3,228	-3,127	-3,131	-3,033	6,065	6,065	0,000007%
9	1,13	-3,033	-2,938	-2,941	-2,849	5,698	5,698	0,000008%
10	1,25	-2,849	-2,760	-2,763	-2,676	5,353	5,353	0,000008%
11	1,38	-2,676	-2,593	-2,595	-2,514	5,028	5,028	0,000009%
12	1,50	-2,514	-2,436	-2,438	-2,362	4,724	4,724	0,000010%
13	1,63	-2,362	-2,288	-2,290	-2,219	4,437	4,437	0,000011%
14	1,75	-2,219	-2,149	-2,152	-2,084	4,169	4,169	0,000012%
15	1,88	-2,084	-2,019	-2,021	-1,958	3,916	3,916	0,000013%
16	2,00	-1,958	-1,897	-1,899	-1,839	3,679	3,679	0,000013%
17	2,13	-1,839	-1,782	-1,784	-1,728	3,456	3,456	0,000014%
18	2,25	-1,728	-1,674	-1,676	-1,623	3,247	3,247	0,000015%
19	2,38	-1,623	-1,573	-1,574	-1,525	3,050	3,050	0,000016%
20	2,50	-1,525	-1,477	-1,479	-1,432	2,865	2,865	0,000017%
21	2,63	-1,433	-1,388	-1,389	-1,346	2,691	2,691	0,000018%
22	2,75	-1,346	-1,304	-1,305	-1,264	2,528	2,528	0,000018%
23	2,88	-1,264	-1,225	-1,226	-1,188	2,375	2,375	0,000019%
24	3,00	-1,188	-1,150	-1,152	-1,116	2,231	2,231	0,000020%
25	3,13	-1,116	-1,081	-1,082	-1,048	2,096	2,096	0,000021%
26	3,25	-1,048	-1,015	-1,016	-0,985	1,969	1,969	0,000022%
27	3,38	-0,985	-0,954	-0,955	-0,925	1,850	1,850	0,000023%
28	3,50	-0,925	-0,896	-0,897	-0,869	1,738	1,738	0,000023%
29	3,63	-0,869	-0,842	-0,843	-0,816	1,632	1,632	0,000024%
30	3,75	-0,816	-0,791	-0,792	-0,767	1,534	1,534	0,000025%



Notem que o erro desse modelo é muito menor do que utilizando o modelo de Euler, nos pontos mais distantes do ponto inicial ainda conseguimos um erro na casa de 10⁻⁵% (por isso só é possível visualizar uma curva, pois elas estão sobrepostas). Além disso, como os valores de k dependem dos valores da iteração anterior, não é possível calcular os valores de k para t=0.

O erro do método de RK é menor conforme diminuimos o passo (h) e aumentamos a ordem (no caso, utilizamos 4ª ordem)

A vantagem de utilizar esse tipo de modelo em uma planilha é que temos uma calculadora para esse tipo de equação, basta alterar os valores constantes para encontrar soluções de problemas diferentes, e também é possível visualizar se o problema está convergindo, ou seja, se todas as equações foram montadas corretamente.

Por outro lado, caso seja analisada alguma função diferente, como uma reação de segunda ordem, por exemplo que $r_A = -kC_A^2$, o problema todo precisa ser alterado.

Referências Bibliográficas

MOURA, Luiz Fernando de; ROQUE, Bruna Fernanda de Sousa. Excel: cálculos para engenharia : formas simples para resolver problemas complexos. São Carlos, SP: EdUFSCar, 2013. 162, [1] p. ISBN 9788576003083

Manuais do OpenOffice e linguagem Basic do OpenOffice (em inglês).
https://wiki.openoffice.org/wiki/Documentation/OOo3_User_Guides/OOo3.3_User
https://wiki.openoffice.org/wiki/Documentation/BASIC_Guide

LIENGME, Bernard. A Guide to Microsoft Excel 2013 for Scientists and Engineers. Cambridge: Academic Press, 2015. 382 p.

ARENALES, Selma. Cálculo numérico aprendizagem com apoio de software. São Paulo Cengage Learning 2012 1 recurso online ISBN 9788522109678

FOGLER, H. Scott. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. 4. ed. Rio de Janeiro: Ltc, 2009