IMPLEMENTAÇÃO DE FERRAMENTA COMPUTACIONAL PARA SOLUÇÃO DE BALANÇOS DE MASSA BICOMPONENTES EM SISTEMAS HOMOGÊNEOS

Bruno Henrique Manfrin TORMEM[1], Carlos Catusso Della PASQUA[1], Vinícius Franzen RAMILO[1], Francisco Antonio Fernandes REINALDO[2] Jeconias Rocha GUIMARÃES[3], Vilmar STEFFEN[4]

[1]Curso de Engenharia Química
Universidade Tecnológica Federal do Paraná – Campus Francisco Beltrão
Francisco Beltrão – Paraná – Brasil

[2]Departamento Acadêmico de Informática
Universidade Tecnológica Federal do Paraná – Campus Francisco Beltrão
Francisco Beltrão – Paraná – Brasil

[3]Departamento Acadêmico de Física, Estatística e Matemática
Universidade Tecnológica Federal do Paraná – Campus Francisco Beltrão
Francisco Beltrão – Paraná – Brasil

[4]Departamento Acadêmico de Engenharias
Universidade Tecnológica Federal do Paraná – *Campus* Francisco Beltrão
Francisco Beltrão – Paraná – Brasil

E-mails: brunotormem@alunos.utfpr.edu.br, carlos.cdp3.14@gmail.com, viniciusramilo@alunos.utfpr.edu.br, jeconiasguimaraes@gmail.com, reinaldo+inf@professores.utfpr.edu.br, vilmars@utfpr.edu.br

RESUMO: *No contexto atual há uma procura por softwares que estejam disponíveis de maneira gratuita para auxiliar pessoas inseridas no âmbito de processos industriais; neste contexto torna-se interessante a implementação de um instrumento computacional. No presente trabalho, implementou-se uma ferramenta computacional capaz de obter a solução para modelos matemáticos derivados a partir de balanços de massa em sistemas bicomponentes sem reação química, com ou sem uso de corrente de reciclo. Modelos matemáticos não-lineares são obtidos a partir de balanços de massa, os quais envolvem inúmeras variáveis e, devido à grande possibilidade de variáveis e combinações de variáveis desconhecidas, a solução manual pode ser bastante trabalhosa. A ferramenta computacional foi desenvolvida de forma que o mesmo procedimento de solução é aplicado para todas as combinações possíveis de variáveis desconhecidas. Para solução numérica do sistema de equações utilizou-se o método numérico de Broyden, adaptado do método de Newton-Raphson, com controle do tamanho do passo em cada iteração buscando a maior chance de convergência. Desenvolveu-se uma interface gráfica para facilitar o uso da ferramenta. Para desenvolver o programa utilizou-se da linguagem de programação Python e suas respectivas bibliotecas. A biblioteca KivyMd foi utilizada para elaborar a interface gráfica e a biblioteca NumPy foi utilizada para desenvolver a parte numérica. Os resultados*

obtidos são positivos, obtendo resultados de forma eficiente, alertando o usuário sobre a inserção de dados errados e possibilitando uma consulta a figuras ilustrativas do processo.

Palavras-chave: *Balanço de massa, Ferramenta Computacional, Python.*

INTRODUÇÃO

No cotidiano de engenheiros, comumente, há o uso de softwares para facilitar cálculos e a resolução de problemas, com isso viabiliza-se a inovação e criação de novas ferramentas para diferentes problemas que possam ser enfrentados por engenheiros.

A linguagem Python é, usualmente, utilizada para o desenvolvimento de novas tecnologias para o ramo científico e industrial. A programação em Python, nesse sentido, destaca-se pela simplicidade e clareza. Apesar de simples, é uma linguagem importante, pois pode ser usada para administrar sistemas e desenvolver grandes projetos (MENEZES, 2010). Além disso, possui código aberto, sendo vastamente empregado nas diversas áreas de engenharia e seus derivativos. Para desenvolver uma ferramenta computacional é preciso definir as tecnologias que serão empregadas e o modelo de metodologia. A programação orientada a objetos (POO) é recorrente no desenvolvimento de ferramentas computacionais e tem como característica a resolução de problemas de maneira gradual. Softwares atuais, que resolvem modelos matemáticos de processos na área de engenharia química, em geral, possuem alto custo agregado, pois os problemas enfrentados nessas rotinas, como por exemplo a resolução de balanços de massa, usualmente são não lineares, o que torna a solução manual trabalhosa e suscetível a erros. Com base nisso, o desenvolvimento de softwares gratuitos que realizem balanço de massa é de grande interesse para engenheiros, estudantes e pesquisadores. O balanço de massa é fundamental para a análise de um novo processo, bem como de processos já existentes (AQUIM, 2004). A aplicação do balanço de massa depende do contexto do problema que irá ser analisado, contudo é sempre baseado no fato de que matéria não pode desaparecer nem ser criada (JUNIOR; CRUZ, 2010).

O balanço de massa está diretamente ligado a todos os processos industriais, que possuem entradas de matérias primas e saídas de um produto que por muitas vezes apresenta um valor agregado maior do que no começo do processo (PERANDIM, 2018). O cálculo com mais de um componente presente no fluxo mássico, por vezes, pode se tornar um processo árduo, almejando tornar o processo de cálculo mais eficaz, amplo e robusto, inicia-

se a busca por uma ferramenta que possa determinar ou aproximar a solução para as variáveis de valores desconhecidos em um complexo arranjo de sistemas de equações não lineares.

Neste trabalho implementou-se uma nova ferramenta de fácil interação, visando resolver de maneira simples e objetiva o balanço de massa de processos envolvendo uma mistura binária em regime estacionário, sem reação química, com o conjunto de equações não linear, com a possibilidade de escolher se irá ou não possuir uma corrente de reciclo. "Um software mais simples, ou mais barato, desde que adaptado às necessidades e bem utilizado, pode ser tão efetivo quanto as soluções mais caras e complexas" (VIEIRA, 2018).

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A equação do balanço de massa é dada por:

$$Acúmulo\ no\ sistema = Entradas - Saídas + Geração - Consumo \quad (1)$$

Considerando-se a ausência de reação química e regime permanente:

$$Entradas - Saídas = 0 \quad (2)$$

Para o balanço de massa em um separador, a análise do somatório de massas é feita em um sistema estacionário e sem reação química. Na Figura 1, a corrente F é a corrente de entrada, W é a corrente de rejeito e, P é a corrente do produto. Os índices x_{F1} e x_{F2} são referentes às frações mássicas, respectivamente dos componentes 1 e 2, na corrente de entrada, x_{P1} e x_{P2} as frações mássicas (respectivamente, dos componentes 1 e 2) na corrente de produto, x_{W1} e x_{W2} as frações mássicas na corrente de rejeito. Sendo que, a soma das frações mássicas em cada uma das correntes de fluxo deve ser igual à unidade.

Figura 1 – Exemplificação de separador

Fonte: Autoria própria (2023)

Para este caso, o balanço de massa global é:

$$F - W - P = 0 \tag{3}$$

O balanço de massa por componentes é realizado com base na participação dos componentes presentes no processo ilustrado na Figura 1.

Analisando o primeiro componente tem-se:

$$x_{F1}\, F \; - \; x_{P1} P \; - x_{W1}\, W \; = 0 \tag{4}$$

Analisando as demais correntes e seus respectivos índices obtêm-se:

$$x_{F2}\, F \; - \; x_{P2} P \; - x_{W2}\, W \; = 0 \tag{5}$$

Realizando o somatório das frações mássicas nas correntes de entrada, produto e rejeito, obtém-se:

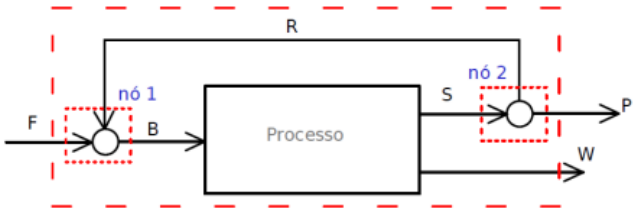
$$x_{F1} + x_{F2} = 1 \tag{6}$$

$$x_{P1} + x_{P2} = 1 \tag{7}$$

$$x_{W1} + x_{W2} = 1 \tag{8}$$

Para o balanço em um separador com reciclo, faz-se o uso de novas correntes, a corrente de reciclo (R), corrente que mistura o reciclo com a corrente de entrada (B) e a corrente de saída total do separador (S), dividida em corrente de produto e corrente de reciclo.

Figura 2 – Exemplificação de separador com reciclo



Fonte: Autoria própria (2023)

Para o primeiro nó das correntes (F, B, R) têm-se:

$$x_{F1}\, F + \; x_{R1}\, R \; - x_{B1}\, B \; = 0 \tag{9}$$

$$x_{F2}\,F + x_{R2}\,R - x_{B2}\,B = 0 \tag{10}$$

As equações de somatório das frações mássicas nas correntes do primeiro nó são:

$$x_{R1} + x_{R2} - 1 = 0 \tag{11}$$

$$x_{B1} + x_{B2} - 1 = 0 \tag{12}$$

Os balanços de massa no segundo nó, para os componentes 1 e 2, são:

$$x_{S1}\,S - x_{R1}\,R - x_{P1}\,P = 0 \tag{13}$$

$$x_{S2}\,S - x_{R2}\,R - x_{P2}\,P = 0 \tag{14}$$

Considerando que no segundo nó ocorre a divisão da corrente S em R e P, as equações que representam as somatórias das frações mássicas nestas correntes são:

$$x_{S1} + x_{S2} - 1 = 0 \tag{15}$$

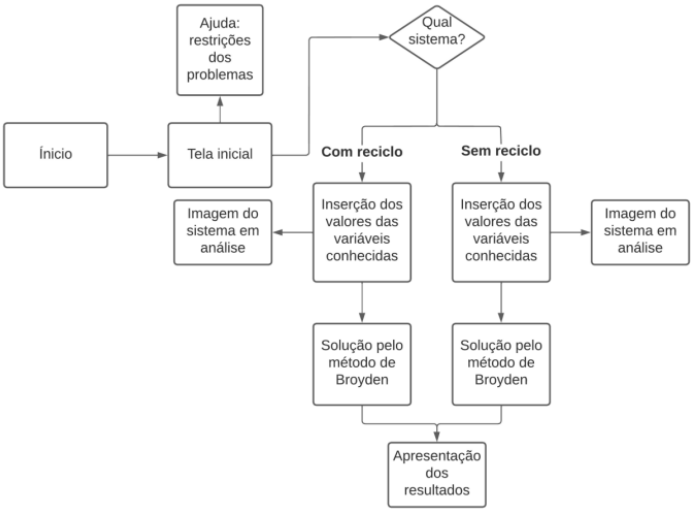
$$x_{s1} - x_{p1} = 0 \tag{16}$$

Para a resolução de sistemas não-lineares, normalmente, utiliza-se o método de Newton. Contudo, este método pode facilmente divergir em sua forma original devido à qualidade das estimativas iniciais, portanto, para evitar este problema, utiliza-se uma modificação no método de Newton, a partir de um fator de relaxação utilizado para aumentar o desempenho em um processo de convergência, denominada relaxação no método de Newton (RUGGIERO; LOPES, 1997). Neste trabalho, utilizou-se o método de Broyden, que aplica a relaxação no método de Newton apenas nas iterações em que o método de Newton tende a convergir (BROYDEN, 1965).

METODOLOGIA

Para o desenvolvimento da parte numérica, utilizou-se a metodologia de cascata, implementada de maneira estrutural. A programação orientada ao objeto foi utilizada para desenvolver a interface gráfica. A linguagem utilizada é o Python e suas bibliotecas, como Numpy e KivyMd. Com a interface gráfica, o usuário pode escolher entre o balanço de massa sem corrente de reciclo ou com corrente de reciclo, a partir desta escolha, ele é destinado para uma nova tela em que irá adicionar os dados necessários para determinar os resultados.

Figura 3 – Fluxograma das etapas para a utilização da ferramenta computacional



Fonte: Autoria própria (2023)

Para o primeiro caso que será analisado, balanço de massa em um separador de mistura binária sem reciclo (Figura 1), quando realiza-se a subtração do número de incógnitas que são nove, a saber, F, W, P, x_{F1}, x_{F2}, x_{W1}, x_{W2}, x_{P1}, x_{P2}, com o número de equações, que são cinco, obtém-se grau de liberdade igual a quatro. Com isso, o usuário deverá informar ao programa o valor de quatro variáveis, entretanto não poderá ser qualquer conjunto de quatro variáveis do problema devido à algumas particularidades do problema. A fim de obter a solução aproximada das incógnitas do problema citado anteriormente, o usuário deverá fornecer o conjunto de valores das variáveis respeitando as seguintes regras:

- No máximo um valor de fração molar por corrente, pois quando o primeiro valor da fração molar fornecido o outro já é determinado pela equação de soma das frações mássicas;
- Não mais que dois valores entre as correntes presentes, no caso (F, W e P), pois a determinação do terceiro valor é feito pela solução do balanço de massa;
- Para o caso de valores que foram inseridos de maneira equivocada, podendo resultar em valores de correntes negativas ou frações fora do intervalo de 0 a 1, a ferramenta computacional apresenta uma mensagem de erro, informando ao usuário que insira os dados novamente.

Para o segundo caso analisado, balanço de massa em um separador de mistura binária com corrente de reciclo (Figura 2), há 18 incógnitas a saber (F, R, B, S, P, W, x_{F1}, x_{F2}, x_{R1}, x_{R2}, x_{B1}, x_{B2}, x_{S1}, x_{S2}, x_{P1}, x_{P2}, x_{W1}, x_{W2}) e 12 equações linearmente dependentes, subtraindo-se o número de incógnitas do número de equações linearmente independentes, obtém-se grau de liberdade seis, sendo necessário, por consequência, informar o valor de seis variáveis. Da mesma forma, o usuário deve informar os dados necessários, respeitando as seguintes regras:

- No máximo um valor de fração molar por corrente;
- No máximo dois valores entre as três correntes: entrada (F), rejeito (W), produto (P);
- Informar no máximo dois valores entre as três correntes: reciclo (R), produto (P) e saída do separador (S). Pois novamente o valor do componente que não foi informado será calculado pela solução do balanço de massa no nó 2;
- Não informar mais que dois valores entre as três correntes: entrada (F), reciclo (R) e, corrente de mistura na entrada (B). Visto que o valor que não foi informado será calculado pela solução do balanço de massa no nó 1;
- Apenas informar uma das frações mássicas, entre todas as possíveis das correntes presentes no balanço do segundo nó (S, R e P). Como todas as três correntes possuem frações iguais, quando determinado um valor, todos os outros serão determinados automaticamente;

O algoritmo foi implementado de tal forma a detectar combinações impossíveis informadas que possam retornar valores de correntes negativas ou frações fora do intervalo de 0 a 1, sendo capaz de perceber e informar o usuário para que insira os dados novamente. As restrições apresentadas estão disponíveis na janela de ajuda do software.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

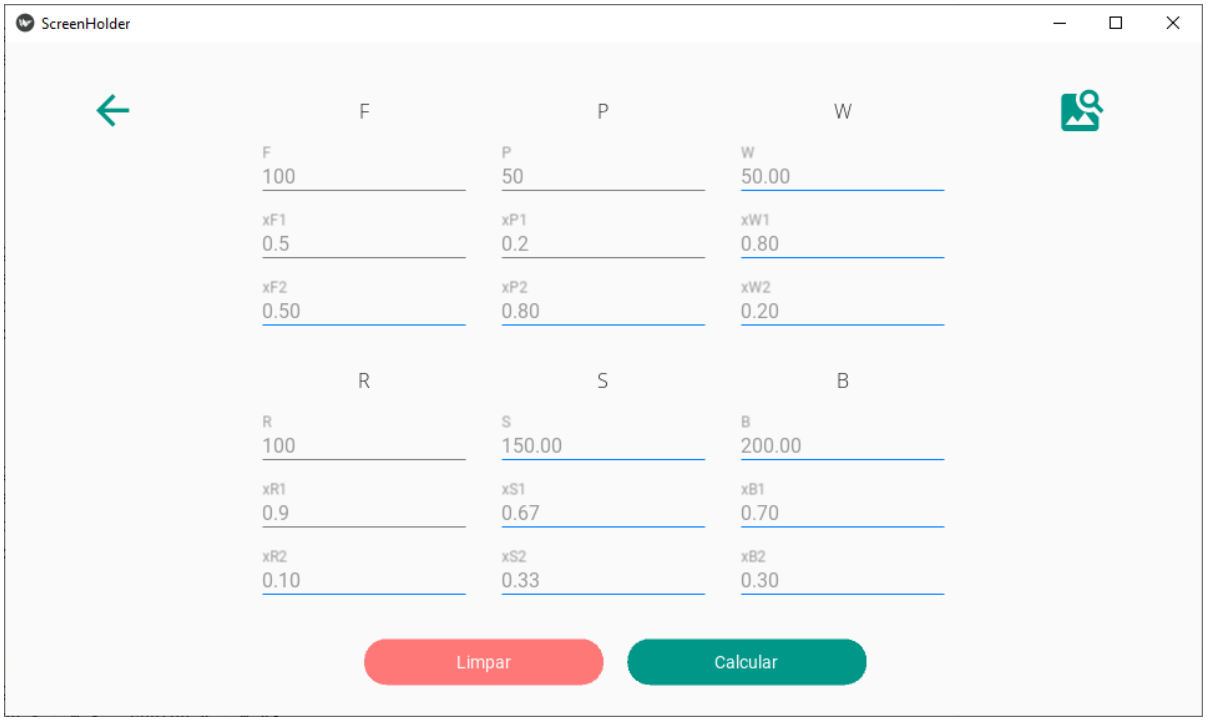
A ferramenta foi desenvolvida para desktop possuindo uma tela de apresentação com as opções de escolha entre os sistemas sem reciclo e com reciclo, além de um botão que, ao clicar neste, é apresentada uma tela com a descrição das restrições para a seleção de incógnitas em ambos os sistemas. Para voltar à tela inicial, deve-se pressionar a tecla “esc”.

Para demonstrar funcionamento da ferramenta, utilizou-se um exemplo de sistema com reciclo. Para que o usuário saiba a célula correta para inserção de cada valor, quando a célula está vazia é possível ver a representação de cada uma das variáveis (em cinza) dentro

de cada uma das respectivas células. Quando o valor é inserido, a célula e o valor preenchido no campo são representados, novamente, pelo tom de cinza.

Para o estudo do caso com reciclo, utilizou-se o seguinte exemplo: Sabe-se que o valor de F (corrente de alimentação) é 100 kg/h, sendo que a fração mássica do componente 1 é 0,5, o valor de P (corrente de produto) também é conhecido P = 50 kg/h, com a fração mássica do componente 1 igual a 0,2, também é conhecido o valor de R (corrente de reciclo) = 100 kg/h, e a fração mássica do componente 1 nesta corrente é 0,9, com os dados conhecidos obteve-se os valores das correntes desconhecidas e suas respectivas composições.

Figura 4 – Resultado do estudo de caso com reciclo



Fonte: Autoria própria (2023)

Após a inserção dos dados conhecidos, executa-se o botão “Calcular”, os resultados são obtidos e representados pelos campos sublinhados em azul. Neste estudo de caso, dados das correntes de entrada, produto e reciclo foram fornecidos, com isso, é esperado que a ferramenta retorne os valores das correntes W, S e B e suas respectivas composições.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, desenvolveu-se uma ferramenta computacional dinâmica capaz de solucionar problemas envolvendo balanços de massa bicomponentes para sistemas com ou sem corrente de reciclo. Essa versatilidade proporciona solução dos problemas de balanço de massa em sistemas que respeitem as restrições impostas, facilitando, também, a análise da influência de algumas variáveis envolvidas em problemas de balanço de massa. A ferramenta apresenta bastante acessibilidade devido à tela de comandos interativa que foi desenvolvida, sendo possível compreender o que se está calculando e quais são os resultados obtidos através das variáveis informadas. A praticidade e agilidade para resolver sistemas manualmente trabalhosos também foi alcançada, pois apenas com a inserção dos dados conhecidos e um clique obtém-se os dados em poucos segundos. Assim, os objetivos propostos concluídos, obteve-se uma ferramenta capaz de auxiliar no desenvolvimento de cálculos de balanços de massa com diferentes arranjos de combinações de incógnitas.

REFERÊNCIAS

AQUIM, Patrice. *Balanço de Massa: uma ferramenta para otimizar os processos de ribeira e curtimento*. 2004. p 32. Dissertação (Mestrado em Materiais da Indústria Química: Polímeros e Couro) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.

BORGES, Luiz Eduardo. *Python para desenvolvedores*. Novatec, p.22, 2014.

BROYDEN, C. G. *A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations. Math. Comput.*, v. 19, n. 92, p. 577–593, 1965.

FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W. *Princípios elementares dos processos químicos*. 3. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2005. cap. 4, p. 81-110.

HIMMELBLAU, D. M.; RIGGS, J. L. *Engenharia química: princípios e cálculos*. 8. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2014. cap. 3 e 4, p. 99-153.

JUNIOR, A. C. B.; CRUZ, A. J. G. *Fundamentos de Balanço de Massa e Energia*. Editora EdUFSCar. 2010.

KOMULAINEN, T.M.; ENEMARK-RASMUSSEN, R.; SIN, G.; FLETCHER, J.P.; CAMERON, D. *Experiences on dynamic simulation software in chemical engineering education. Education for Chemical Engineers*, v.7, p. 153-162,2012.

LIM, Eldin *A design software to facilitate learning via repeated practice by Chemical Engineering students. Education for Chemical Engineers*, v.21, p. 72-79,2017.

MALDANER, Leonardo. *Desenvolvimento de software acadêmico para engenharia química utilizando linguagem python: separador de mistura binária*. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Engenharia Química) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Francisco Beltrão,2019.

MENEZES, Nilo. *Introdução à Programação com Python*. Novatec, São Paulo. cap 1, p. 21-22, 2010.

MOLINA, R.; ORCAJO, G.; MARTINEZ, F. KBR *(Kinects in Batch Reactors): a MATLAB-based application with a friendly Graphical User Interface for Chemical kinetic model simulation and parameter estimation. Education for Chemical Engineers*, v.28, p. 80-89,2019.

OLIPHANT, T. E. *Python for Scientific Computing. Computing in Science & Engineering*, v. 9, p. 14–20, 2007.

PERANDIM, Leandro. *Associação do balanço de massa e de ferramentas da gestão da produção para otimização da produção de uma indústria cervejeira*. 2018. p.13. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em engenharia de produção) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Medianeira, 2018.

RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. da R. *Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais*. 2. ed. São Paulo, SP: Makron Books, 1997. cap. 4, 406 p. 192-200.

SPERANDIO, D.; MENDES, J. T.; SILVA, L. H. M. e. *Cálculo numérico.* 2.ed. São Paulo,SP: Pearson, 2014. cap 4, pag. 124-128.

TORMEM, Bruno Henrique Manfrin. *Implementação de ferramenta computacional para solução de balanços de massa bicomponentes em sistemas homogêneos*. 2022. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Francisco Beltrão, 2022.

VIEIRA, Gilberto. *Qual a importância dos Softwares de Automação para Engenheiros? Blog* dos Engenheiros, 2018. Disponível em:https://blogdosengenheiros.com.br/importancia-dos-softwares-de-automacao-para-engenheiros/. Acesso em: 27 outubro. 2021.