



Insper Engenharia Computação

Raphael Azevedo
Gabriel Francato
Samuel Granato

Química Tecnológica e Ambiental Laboratório:
Projeto 2 – Seleção de Baterias
Link para o Software:
francato.com.br

São Paulo - SP
23/04/2019

Sumário

1. Introdução.....	3
2. Descrição dos Procedimentos Realizados.....	4
1. Montagem da Bateria	4
2. Seleção da Bateria	7
3. Considerações Finais	9
4. Bibliografia.....	9

1. Introdução

O projeto visa criar um software que seja capaz de montar e/ou selecionar baterias dado uma certa aplicação, ou componentes específicos. Para realizar isso, o software recebe algumas informações do usuário, variando de acordo com a opção escolhida (montar ou selecionar bateria).

Caso o usuário queira montar uma bateria, serão necessários fornecer os materiais do catodo e anion, a concentração das soluções, massa dos eletrodos e a temperatura. Dado essas informações o programa calculará e retornará a ddp da bateria, a capacidade de carga, a densidade de carga, a densidade de energia, e o custo, como será descrito posteriormente.

Se o usuário desejar selecionar uma bateria, ele deverá fornecer os dados necessários para sua aplicação, sendo esses a ddp, a potência, e o tempo de operação (serão descritos esses dados nos procedimentos). O programa então consideraria essas informações e retornaria uma lista de possíveis baterias (ou associações de baterias) que serviriam para essa aplicação.

2. Descrição dos Procedimentos Realizados

1. Montagem da Bateria

Na parte de montagem da bateria no software, pedem-se alguns parâmetros para o usuário. Estes são:

Material do Cátodo e Material do Ânodo → O usuário pode selecionar um material de uma lista contendo lítio, potássio, magnésio, alumínio, zinco, cromo, ferro, níquel, chumbo, cobre, prata, mercúrio e iodo.

Solução do Cátodo e Solução do Ânodo → Com os materiais selecionados, o usuário deve escolher qual solução ele deseja utilizar para cada eletrodo.

Concentração da Solução do Cátodo e do Ânodo (mol/L) → O usuário deve escolher as concentrações desejadas das soluções em ambos os eletrodos.

Massa dos Eletrodos (kg) → O usuário deve fornecer as massas do cátodo e do ânodo em quilos, que serão usadas para montar a bateria.

Recebido os dados do usuário, o programa começa sua execução. Para realizar operações com os diferentes materiais, o programa contém um arquivo que guarda as informações essenciais das substâncias. O lítio por exemplo, tem uma entrada que define seu potencial de redução (obtido por meio de uma tabela de potenciais de redução), sua abreviatura ("Li"), seu preço por quilo (obtido por uma pesquisa online em diferentes vendedores), sua massa molar (em g/mol) e o número de elétrons associados a semi reação do lítio.



Como na semi reação do lítio só é liberado um elétron, então o parâmetro número de elétrons salvo nas informações do lítio é um.

Com os dois materiais definidos, é necessário descobrir o número de elétrons que são transferidos na reação global da bateria. Uma forma de obter esse dado é fazendo o mínimo múltiplo comum entre os números de elétrons transferidos nas semi-reações.

Usando essa informação é possível calcular as DDPs teórica e real:

DDPs (teórica e real) → No programa, foram-se calculadas duas DDPs, uma é a DDP teórica, que é obtida a partir da tabela de potenciais de redução, usando a seguinte fórmula:

$$\Delta E^0 = E_{\text{red}(\text{maior})}^0 - E_{\text{red}(\text{menor})}^0$$

Sabendo qual elemento possui o potencial de redução maior ou menor, basta subtraí-los que se obtém a DDP teórica. O programa compara os valores de potencial de redução dos dois materiais selecionados e ver qual é maior, subtraindo então o menor potencial do maior. É definida como teórica pois não reflete a DDP real que pilha ou bateria terá. Para conseguir esse valor, é preciso aplicar a equação de Nernst. Ela permite calcular a DDP real a partir da DDP teórica, as concentrações das soluções, a temperatura (convertida de celsius para kelvin), a constante dos gases ($R = 0,082$), a constante de Faraday (96485 C), e o número de mols de

elétrons transferidos na reação global:

$$E = E^0 - \frac{R \cdot T}{n \cdot F} \cdot \ln \frac{[S_1]}{[S_2]}$$

Resolvendo a equação, chega-se na DDP que a pilha realmente irá fornecer.

A próxima etapa do software é definir os mols do ânodo e do cátodo, e qual é o limitante da reação, para poder determinar a capacidade de carga. A capacidade de carga depende dos mols de elétrons reagidos, que por sua vez dependem de quem é o limitante. Para calcular os mols de cada eletrodo, pega-se a massa fornecida pelo usuário para cada eletrodo e divide ela pela massa molar do mesmo:

$$Mols = \frac{massa\ do\ eletrodo(g)}{massa\ molar\ do\ eletrodo(\frac{g}{mol})}$$

Para definir quem é o limitante da reação, primeiro determinamos uma proporção. Esta proporção é a divisão entre o parâmetro número de elétrons de um eletrodo por outro. O dividendo da operação será sempre o maior número, e o divisor o menor. Isso define uma variável proporção que é usada para equilibrar os mols do eletrodo que possui o número de elétrons menor:

$$\text{Se número de elétrons do ânodo for maior} \rightarrow \text{Proporção} = \frac{n^{\circ} \text{ elétrons ânodo}}{n^{\circ} \text{ elétrons cátodo}}$$

$$\text{e portanto} \rightarrow \text{Mols Cátodo Equilibrado} = \frac{\text{Mols Cátodo}}{\text{Proporção}}$$

$$\text{Se número de elétrons do cátodo for maior} \rightarrow \text{Proporção} = \frac{n^{\circ} \text{ elétrons cátodo}}{n^{\circ} \text{ elétrons ânodo}}$$

$$\text{e portanto} \rightarrow \text{Mols Ânodo Equilibrado} = \frac{\text{Mols Ânodo}}{\text{Proporção}}$$

Após isso é necessário comparar o número de mols de eletrodo com o número de mols do outro eletrodo (esse agora equilibrado), e ver quem é o menor entre eles. Este será o limitante.

Assim que se determina o limitante da reação, o número de mols de elétrons que realmente reagem podem ser calculados multiplicando o número de mols do limitante pelo número de elétrons do mesmo.

Agora que obteve-se o número de mols de elétrons reagidos, é possível calcular a capacidade de carga.

Capacidade de carga (Q) → A capacidade de carga de uma pilha é uma informação normalmente fornecida por vendedores. Para calcular a capacidade carga, é necessário conhecer a constante de Faraday ($F = 96485 \text{ C}$). A constante de Faraday diz quantos Coulombs temos em um mol de elétrons. Com o número de mols de elétrons conhecido, podemos calcular a capacidade de carga a partir do número total de Coulombs:

$$\mathbb{C}_{total} = mols\ de\ elétrons\ reagidos \cdot F$$

Sabe-se por definição que um ampér-hora (Ah) é equivalente a três mil e seiscentos Coulombs, como pode ser visto a seguir:

$$A = \frac{\mathbb{C}}{s}$$

$$Ah = A \cdot (3600s) = \frac{\mathbb{C}}{s} \cdot (3600s) = 3600 \mathbb{C}$$

Portanto, para obter a capacidade de carga em ampère-hora de uma bateria ou pilha, divide-se a quantidade total de Coulombs por 3600.

Para calcular os dados finais que devem ser retornados ao usuário, é preciso determinar a massa total da pilha ou bateria.

Massa total → Pega-se o input do usuário das massas do ânodo e do cátodo, e soma-se com a massa das soluções. Para simplificar, assumiu-se que as soluções tinham sempre volume de cem ml, e a densidade era sempre igual a densidade da água. De tal forma a conta da massa total em quilos fica:

$$m_t = massa\ do\ ânodo + massa\ do\ cátodo + 0,1kg + 0,1kg$$

Com esse dado definido é possível calcular as Densidades de carga e de energia:

Densidade de Carga (Dq) → A densidade de carga nada mais é do que a quantidade de carga de uma pilha, por quilograma dela. Para calcular a densidade de carga, basta dividir a capacidade de carga total de uma bateria por sua massa total.

$$Dq = \frac{Q}{m_t}$$

A unidade dessa conta expõe exatamente seu significado:

$$Dq = \frac{C}{Kg}$$

Densidade de Energia (De) → A densidade de energia, semelhante à densidade de carga, é a relação entre a quantidade de carga de uma pilha ou bateria, e a massa total da mesma. Ela pode ser expressa pelas seguintes unidades:

$$De = \frac{C \cdot V}{m_t} = \frac{Wh}{m_t}$$

Sabendo isso, se tivermos a densidade de carga (Dq), podemos facilmente calcular a densidade de energia da seguinte forma:

$$De = Dq \cdot V$$

A última informação que deve ser fornecida para o usuário é o custo total da bateria. Este

é determinado por meio de duas informações essenciais, a massa dos eletrodos, e o preço por quilo da substância. Com essas duas informações, pode-se afirmar que o custo final da bateria seria:

$$\text{Custo} = \text{massa do ânodo} \cdot \text{preço do material} + \text{massa do cátodo} \cdot \text{preço do material}$$

2. Seleção da Bateria

Essa área do site tem o intuito de ajudar o usuário a selecionar a melhor bateria comercial para os fins desejados. Para isso o usuário deve preencher três campos de informações, são eles: DDP Desejada (V), Potencia Desejada (W) e Tempo Total Ligada (H). Com todos os inputs preenchidos abre-se caminho para a próxima etapa.

Sugerindo Uma Pilha Para Sua Aplicação

DDP DESEJADA (V)

POTENCIA DESEJADA (W)

TEMPO TOTAL LIGADA (H)

CALCULAR

RESETAR

Figura 1 Mostra aonde colocar os inputs para o usuário

Com tudo isso preenchido a primeira etapa é calcular a corrente, para isso utiliza-se a formula:

$$i(A) = \frac{P(w)}{U(v)}$$

Como já dito a potência (P) e a ddp (U) foram colocadas pelo usuário e com isso foi possível calcular a corrente (i(A)). Então deve-se calcular a quantidade de carga (coulomb) que o usuário está desejando no total da sua bateria, para isso deve-se pegar o tempo total ligada, que o usuário indicou como input, transformar para segundos, e multiplicar pela corrente calculada anteriormente isso gerará um valor com a unidade $A \cdot s$ que é a mesma coisa que a unidade coulomb, ou seja a quantidade de carga da bateria desejada.

Além disso, foi-se criado um banco de dados com dez baterias comerciais, são elas:

Bateria	Corrente (A)	Voltagem (V)	Preço (R\$)
Chumbo Acida	28	12	650,75
Níquel Cadmio	0,6	7,2	65

Bateria Polímero de Lítio	1,8	3,7	69
Bateria Hidreto Metálico de Níquel	2	1,2	8,43
Lítio Íon	1,4	3,7	45
Chumbo Ácido 2	1,3	6	38,30
Lítio Íon 2	2,5	3,6	19,38
Bateria Recarregável de Níquel Metal Hidreto	3	1,2	29
Pilha Duracell Alcalina AA	2,1	1,5	2,875
Pilha Zinco Carbono	13	1,5	3,5

Tabela 1 Baterias comerciais disponíveis no software

Com os cálculos feitos anteriormente sabe-se, portanto, a carga e a ddp da bateria desejada pelo usuário. Já com a tabela acima tem-se a voltagem das baterias comerciais, e para calcular a carga desta deve-se multiplicar por três mil e seiscentos sua corrente e assim obter sua carga, que é $A \cdot s$ (Coulomb).

Para alcançar a ddp desejada pelo usuário com as baterias comerciais disponíveis deve-se então pegar a ddp desta e associá-las em série até alcançar a ddp desejada, pois ao fazer isso as ddps das baterias serão somadas, a ddp da bateria sempre deve ultrapassar ou ser igual a ddp desejada.

Já para alcançar a carga desejada pelo usuário deve-se associar as baterias comerciais em paralelo, pois assim a carga dessas será somada, até a carga ser igual ou superior a carga da bateria desejada.

Por fim deve-se verificar quantas baterias foram colocadas em série e quantas foram colocadas em paralelo e assim sabe-se quantas baterias foram utilizadas ao todo para criar a bateria que o usuário desejou. Feito isso multiplica-se o número total de baterias pelo preço e obtém-se, portanto, o preço final da bateria sugerida.

A última etapa do processo implica em efetivamente sugerir ao usuário as três melhores baterias para aquela situação, para isso foi-se levado em conta principalmente o preço final da bateria construída, sendo a mais barata recomendada como melhor opção e assim por diante, até um total de três baterias sugeridas.

Além do preço total daquela bateria, o software explicita valores como: o nome da bateria, quantas baterias foram associadas em série e em paralelo, o total de baterias utilizadas e por fim o valor total dela.

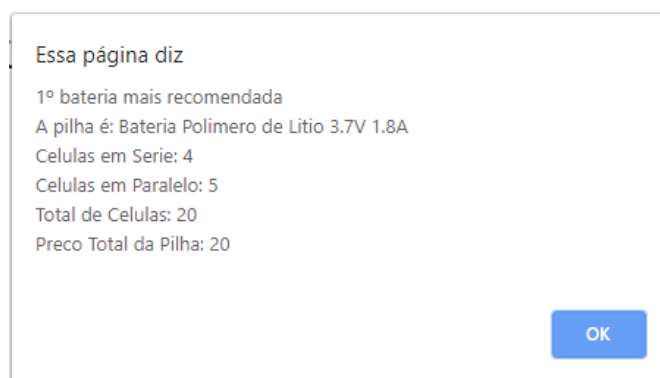


Figura 2 Resultado de uma resposta do software

3. Considerações Finais

O software desenvolvido se mostrou capaz de montar pilhas ou baterias dado o input de um usuário, realizando as contas de acordo com os conceitos abordados em eletroquímica. O programa também analisa e seleciona pilhas e baterias comerciais ideais para uma aplicação, utilizando seu banco de dados, utiliza de associações de pilhas ou baterias que atendem aos requisitos impostos por um usuário. Porém, existem algumas oportunidades notáveis de melhoria que poderiam ser implementadas futuramente, sendo elas:

Aprimorar a seleção de pilhas → Especificamente no que diz respeito a associação de pilhas. Da forma em que está, só é possível associar pilhas iguais para atingir os objetivos usuário. Seria ideal existir a possibilidade de associar todas as pilhas entre si, algo que possibilitaria a sugestão de inúmeras outras associações de pilhas para uma certa aplicação.

Mais especificações para a seleção de pilhas → O programa não é capaz de estabelecer certas prioridades. Na hora de sugerir pilhas ou baterias, ele considera a melhor opção aquela que oferece os parâmetros necessários e tem o menor custo. Como uma melhoria, poderia ser feito um adendo ao software que possibilitasse o usuário a definir a característica que mais deseja na pilha, para que assim possa haver uma filtragem de pilha que seja mais personalizada baseada nas prioridades do usuário.

4. Bibliografia

<https://blogdoenem.com.br/pilhas-principais-tipos-quimica-enem/>

<https://produto.mercadolivre.com.br/MLB-925130798-bateria-72v-23a-600mah-ni-cd-com-conector-de-bateria-9v- JM?quantity=1>

<https://www.casadapilha.com.br/bateria-lipo-103450-recarregavel>

<https://pt.aliexpress.com/item/12pcs-sub-c-2000mah-4-5-sc-1-2v-ni-mh-nimh-rechargeable-battery-pack-bateria/32705160299.html>

<https://www.americanas.com.br/produto/51926077/bateria-18490-3-7v-1400mah-li-ion->

[recarregavel-](#)

[oferta?WT.srch=1&acc=e789ea56094489dff798f86ff51c7a9&epar=bp_pl_00_go_inf-aces_acessorios_geral_gmv_b&gclid=CjwKCAjw7_rlBRBaEiwAc23rh9QGu73tfZEipOIBkZ7kvqLkAiJnzDMZk36touJTUscjp3F3INiaRoCDesQAvD_BwE&i=5c34141249f937f6255d4830&o=5c59e1ca6c28a3cb50626c32&opn=YSMESP&sellerId=25961156000160](#)

[https://www.americanas.com.br/produto/51985356/bateria-selada-ep-6v-1-](#)

[3ah?WT.srch=1&acc=e789ea56094489dff798f86ff51c7a9&epar=bp_pl_00_go_inf-](#)

[aces_acessorios_geral_gmv_a&gclid=CjwKCAjw7_rlBRBaEiwAc23rhuB_V2MnOcdEs-](#)

[zyGXkmCjgl9DJME6SwTp2KcrZ5tzCNF-](#)

[V13hjnUxoCgSUQAvD_BwE&i=5bdd11aeec3dfb1f89a257c&o=5c5b2cfd6c28a3cb50631013&](#)

[opn=YSMESP&sellerId=26164580000146](#)

[https://pt.aliexpress.com/item/100-New-Brand-18650-2500mAh-Rechargeable-battery-3-6V-](#)

[INR18650-25R-M-20A-discharge-Nickel-](#)

[sheet/32819544891.html?src=google&albslr=221236860&src=google&albch=shopping&acnt=4](#)

[94-037-](#)

[6276&isdl=y&slnk=&plac=&mtctp=&albbt=Google_7_shopping&aff_platform=google&aff_short](#)

[key=UneMJZvf&&albagn=888888&albcpr=1626568036&albag=65942329430&trgt=2969049140](#)

[40&crea=pt32819544891&netw=u&device=c&gclid=CjwKCAjw7_rlBRBaEiwAc23rhl6GGUQfH-](#)

[FQk9gG8LQbM3wbVp9or-lyeeJt4zEZEP_nb2JkpllwMBoCB34QAvD_BwE&gclsrc=aw.ds](#)

[https://produto.mercadolivre.com.br/MLB-710581185-bateria-sc-3000mah-12v-ni-mh-](#)

[_JM?matt_tool=17545778&matt_word&gclid=CjwKCAjw7_rlBRBaEiwAc23rhmqRSBlsw_guTY](#)

[MBuJ1dXhfvs05OBAZVclRre8lQHIghXr0QIRqnvBoCTPcQAvD_BwE&quantity=1](#)

[https://www.kabum.com.br/produto/78055/pilha-zinco-carbono-d-sony-pack-2-ultra-heavy-duty-](#)

[sum1-](#)

[nub2a?origem=52&gclid=CjwKCAjw7_rlBRBaEiwAc23rhmeW4Eodyi7L3NI2ueNfi9jVXkInPs36](#)

[5yCAAnY6SYM1VwST_NojqfBoCEEMQAvD_BwE](#)

[https://produto.mercadolivre.com.br/MLB-1049750203-24-pilhas-duracell-alcalina-aa-15v-](#)

[originais-cartela-c8-un-_JM?quantity=1](#)