

PYTHON - MATERIAL DIDÁTICO INTERATIVO PARA ENSINO DE TERMODINÂMICA APLICADA UTILIZANDO PROGRAMAÇÃO EM PYTHON CIENTÍFICO

Iuri S. V. Segtovich¹, Fernando de A. Medeiros¹ e Frederico W. Tavares^{1,2,*}

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Pós Graduação em Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos – Escola de Química

² Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Engenharia Química – COPPE

* e-mail para contato: tavares@eq.ufrj.br ou ftavares@peq.coppe.ufrj.br



INTRODUÇÃO

1. Para que ensinar programação na engenharia?

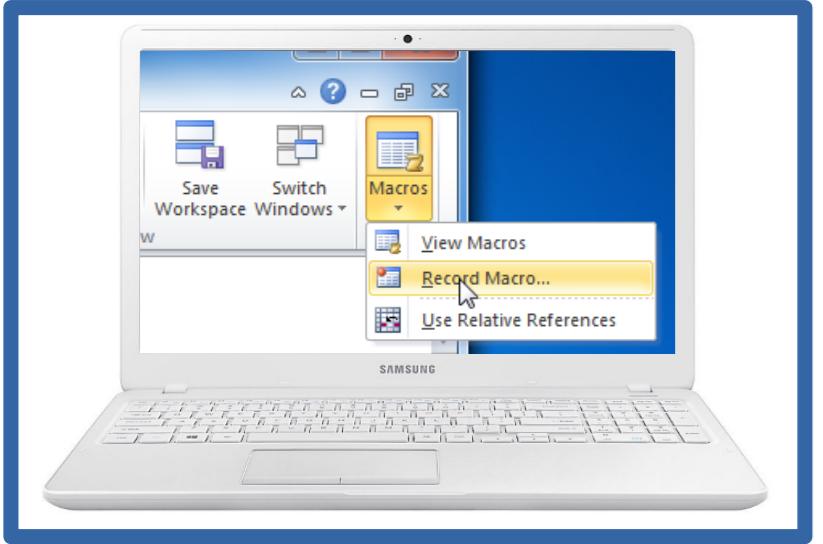


Figura 1-a) Automação de tarefas repetitivas.



Figura 1-b) Aprimoramento de cálculos em cluster de processamento paralelo.



Figura 1-c) Comunicação efetiva com equipe de programadores.

2. O contexto atual:

Concluintes de graduação e ingressantes nos programas de pós-graduação na área de Engenharia Química apresentam dificuldades mesmo nas aplicações mais simples.

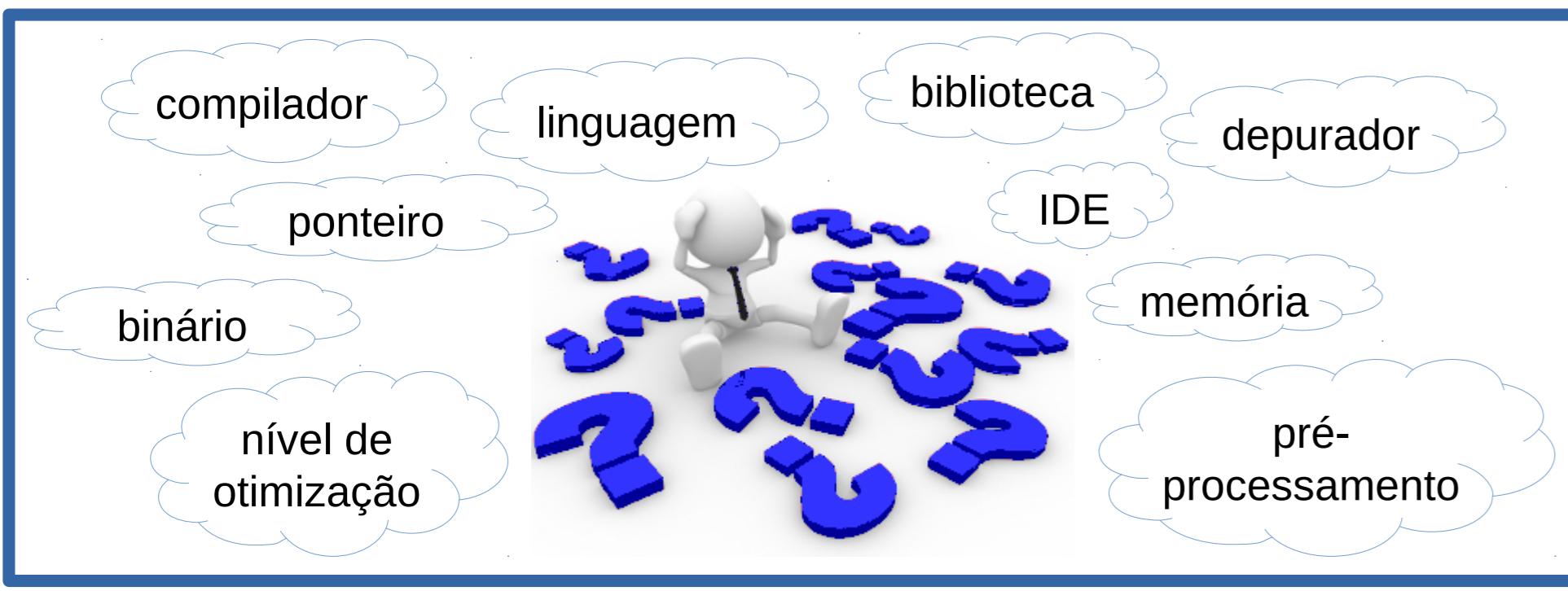


Figura 2) Conceitos relevantes no desenvolvimento de programação.

3. A Termodinâmica: Dentre os assuntos relevantes à formação de um profissional na área de engenharia química, este trabalho se concentra na área de Termodinâmica, com enfoque especial em cálculos de equilíbrio de fases. A modelagem termodinâmica é útil na descrição de cenários como petróleo, sais inorgânicos, biodiesel, fármacos, água e tecidos biológicos.

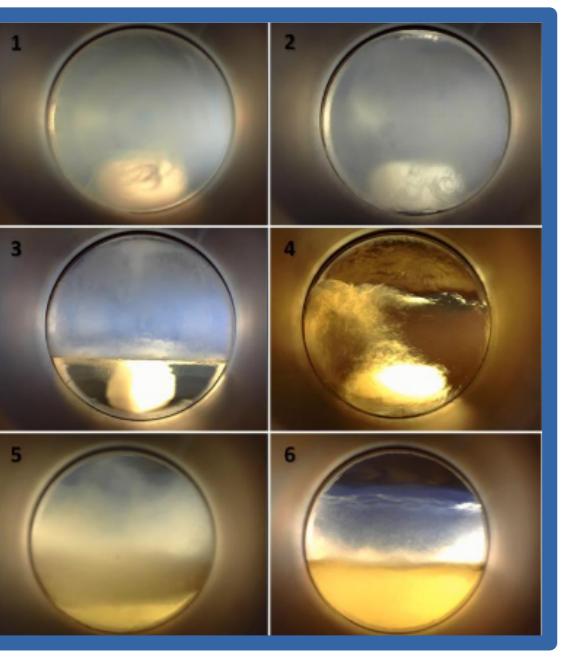


Figura 3-a) Equilíbrio de fases de componentes do petróleo.



Figura 3-b) Precipitação de sais inorgânicos.



Figura 3-c) Equilíbrio de fases na produção de biodiesel.

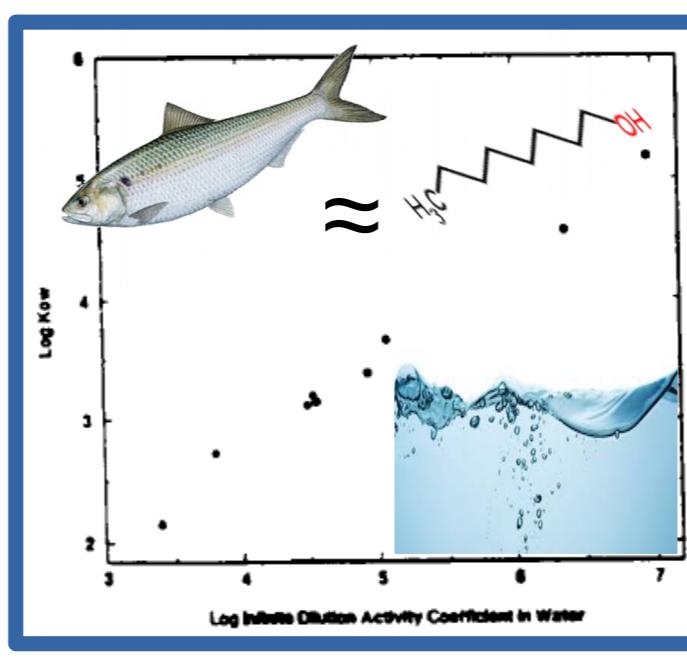


Figura 3-d) Distribuição de fármacos entre água e tecidos vivos.

OBJETIVOS

1. Material didático interativo: Integrando o ensino da Termodinâmica ao exercício da programação, oferecendo problemas vinculados a aulas de relações e modelos teóricos ou de análise estatística de dados experimentais com variados níveis de exigência em programação.

```
1 main_R = 8.314
2 def function_P_sat(dummy_T):
3     dummy_T = dummy_T * 10**-3 # convert to K
4     dummy_P = 10**-13 * 40221 * ( 1838.675 / ( dummy_T - 31.737 ) ) )
5     main_rho_sat = 1000 * g / dummy_P
6     main_rho_weight = 18 * g / mol.
7     def function_V_dummy(dummy_T, dummy_P):
8         if dummy_T <= 0:
9             return dummy_T / dummy_P
10        else:
11            a = 1 # if a volume at pressure higher than saturation pressure
12            b = dummy_T / dummy_P
13            c = dummy_P / dummy_T
14            d = dummy_T * dummy_P
15            e = dummy_T * dummy_P
16            f = dummy_T * dummy_P
17            g = dummy_T * dummy_P
18            h = dummy_T * dummy_P
19            i = dummy_T * dummy_P
20            j = dummy_T * dummy_P
21            k = dummy_T * dummy_P
22            l = dummy_T * dummy_P
23            m = dummy_T * dummy_P
24            n = dummy_T * dummy_P
25            o = dummy_T * dummy_P
26            p = dummy_T * dummy_P
27            q = dummy_T * dummy_P
28            r = dummy_T * dummy_P
29            s = dummy_T * dummy_P
30            t = dummy_T * dummy_P
31            u = dummy_T * dummy_P
32            v = dummy_T * dummy_P
33            w = dummy_T * dummy_P
34            x = dummy_T * dummy_P
35            y = dummy_T * dummy_P
36            z = dummy_T * dummy_P
37            a1 = dummy_T * dummy_P
38            b1 = dummy_T * dummy_P
39            c1 = dummy_T * dummy_P
40            d1 = dummy_T * dummy_P
41            e1 = dummy_T * dummy_P
42            f1 = dummy_T * dummy_P
43            g1 = dummy_T * dummy_P
44            h1 = dummy_T * dummy_P
45            i1 = dummy_T * dummy_P
46            j1 = dummy_T * dummy_P
47            k1 = dummy_T * dummy_P
48            l1 = dummy_T * dummy_P
49            m1 = dummy_T * dummy_P
50            n1 = dummy_T * dummy_P
51            o1 = dummy_T * dummy_P
52            p1 = dummy_T * dummy_P
53            q1 = dummy_T * dummy_P
54            r1 = dummy_T * dummy_P
55            s1 = dummy_T * dummy_P
56            t1 = dummy_T * dummy_P
57            u1 = dummy_T * dummy_P
58            v1 = dummy_T * dummy_P
59            w1 = dummy_T * dummy_P
60            x1 = dummy_T * dummy_P
61            y1 = dummy_T * dummy_P
62            z1 = dummy_T * dummy_P
63            a2 = dummy_T * dummy_P
64            b2 = dummy_T * dummy_P
65            c2 = dummy_T * dummy_P
66            d2 = dummy_T * dummy_P
67            e2 = dummy_T * dummy_P
68            f2 = dummy_T * dummy_P
69            g2 = dummy_T * dummy_P
70            h2 = dummy_T * dummy_P
71            i2 = dummy_T * dummy_P
72            j2 = dummy_T * dummy_P
73            k2 = dummy_T * dummy_P
74            l2 = dummy_T * dummy_P
75            m2 = dummy_T * dummy_P
76            n2 = dummy_T * dummy_P
77            o2 = dummy_T * dummy_P
78            p2 = dummy_T * dummy_P
79            q2 = dummy_T * dummy_P
80            r2 = dummy_T * dummy_P
81            s2 = dummy_T * dummy_P
82            t2 = dummy_T * dummy_P
83            u2 = dummy_T * dummy_P
84            v2 = dummy_T * dummy_P
85            w2 = dummy_T * dummy_P
86            x2 = dummy_T * dummy_P
87            y2 = dummy_T * dummy_P
88            z2 = dummy_T * dummy_P
89            a3 = dummy_T * dummy_P
90            b3 = dummy_T * dummy_P
91            c3 = dummy_T * dummy_P
92            d3 = dummy_T * dummy_P
93            e3 = dummy_T * dummy_P
94            f3 = dummy_T * dummy_P
95            g3 = dummy_T * dummy_P
96            h3 = dummy_T * dummy_P
97            i3 = dummy_T * dummy_P
98            j3 = dummy_T * dummy_P
99            k3 = dummy_T * dummy_P
100           l3 = dummy_T * dummy_P
101          m3 = dummy_T * dummy_P
102          n3 = dummy_T * dummy_P
103          o3 = dummy_T * dummy_P
104          p3 = dummy_T * dummy_P
105          q3 = dummy_T * dummy_P
106          r3 = dummy_T * dummy_P
107          s3 = dummy_T * dummy_P
108          t3 = dummy_T * dummy_P
109          u3 = dummy_T * dummy_P
110          v3 = dummy_T * dummy_P
111          w3 = dummy_T * dummy_P
112          x3 = dummy_T * dummy_P
113          y3 = dummy_T * dummy_P
114          z3 = dummy_T * dummy_P
115          a4 = dummy_T * dummy_P
116          b4 = dummy_T * dummy_P
117          c4 = dummy_T * dummy_P
118          d4 = dummy_T * dummy_P
119          e4 = dummy_T * dummy_P
120          f4 = dummy_T * dummy_P
121          g4 = dummy_T * dummy_P
122          h4 = dummy_T * dummy_P
123          i4 = dummy_T * dummy_P
124          j4 = dummy_T * dummy_P
125          k4 = dummy_T * dummy_P
126          l4 = dummy_T * dummy_P
127          m4 = dummy_T * dummy_P
128          n4 = dummy_T * dummy_P
129          o4 = dummy_T * dummy_P
130          p4 = dummy_T * dummy_P
131          q4 = dummy_T * dummy_P
132          r4 = dummy_T * dummy_P
133          s4 = dummy_T * dummy_P
134          t4 = dummy_T * dummy_P
135          u4 = dummy_T * dummy_P
136          v4 = dummy_T * dummy_P
137          w4 = dummy_T * dummy_P
138          x4 = dummy_T * dummy_P
139          y4 = dummy_T * dummy_P
140          z4 = dummy_T * dummy_P
141          a5 = dummy_T * dummy_P
142          b5 = dummy_T * dummy_P
143          c5 = dummy_T * dummy_P
144          d5 = dummy_T * dummy_P
145          e5 = dummy_T * dummy_P
146          f5 = dummy_T * dummy_P
147          g5 = dummy_T * dummy_P
148          h5 = dummy_T * dummy_P
149          i5 = dummy_T * dummy_P
150          j5 = dummy_T * dummy_P
151          k5 = dummy_T * dummy_P
152          l5 = dummy_T * dummy_P
153          m5 = dummy_T * dummy_P
154          n5 = dummy_T * dummy_P
155          o5 = dummy_T * dummy_P
156          p5 = dummy_T * dummy_P
157          q5 = dummy_T * dummy_P
158          r5 = dummy_T * dummy_P
159          s5 = dummy_T * dummy_P
160          t5 = dummy_T * dummy_P
161          u5 = dummy_T * dummy_P
162          v5 = dummy_T * dummy_P
163          w5 = dummy_T * dummy_P
164          x5 = dummy_T * dummy_P
165          y5 = dummy_T * dummy_P
166          z5 = dummy_T * dummy_P
167          a6 = dummy_T * dummy_P
168          b6 = dummy_T * dummy_P
169          c6 = dummy_T * dummy_P
170          d6 = dummy_T * dummy_P
171          e6 = dummy_T * dummy_P
172          f6 = dummy_T * dummy_P
173          g6 = dummy_T * dummy_P
174          h6 = dummy_T * dummy_P
175          i6 = dummy_T * dummy_P
176          j6 = dummy_T * dummy_P
177          k6 = dummy_T * dummy_P
178          l6 = dummy_T * dummy_P
179          m6 = dummy_T * dummy_P
180          n6 = dummy_T * dummy_P
181          o6 = dummy_T * dummy_P
182          p6 = dummy_T * dummy_P
183          q6 = dummy_T * dummy_P
184          r6 = dummy_T * dummy_P
185          s6 = dummy_T * dummy_P
186          t6 = dummy_T * dummy_P
187          u6 = dummy_T * dummy_P
188          v6 = dummy_T * dummy_P
189          w6 = dummy_T * dummy_P
190          x6 = dummy_T * dummy_P
191          y6 = dummy_T * dummy_P
192          z6 = dummy_T * dummy_P
193          a7 = dummy_T * dummy_P
194          b7 = dummy_T * dummy_P
195          c7 = dummy_T * dummy_P
196          d7 = dummy_T * dummy_P
197          e7 = dummy_T * dummy_P
198          f7 = dummy_T * dummy_P
199          g7 = dummy_T * dummy_P
200          h7 = dummy_T * dummy_P
201          i7 = dummy_T * dummy_P
202          j7 = dummy_T * dummy_P
203          k7 = dummy_T * dummy_P
204          l7 = dummy_T * dummy_P
205          m7 = dummy_T * dummy_P
206          n7 = dummy_T * dummy_P
207          o7 = dummy_T * dummy_P
208          p7 = dummy_T * dummy_P
209          q7 = dummy_T * dummy_P
210          r7 = dummy_T * dummy_P
211          s7 = dummy_T * dummy_P
212          t7 = dummy_T * dummy_P
213          u7 = dummy_T * dummy_P
214          v7 = dummy_T * dummy_P
215          w7 = dummy_T * dummy_P
216          x7 = dummy_T * dummy_P
217          y7 = dummy_T * dummy_P
218          z7 = dummy_T * dummy_P
219          a8 = dummy_T * dummy_P
220          b8 = dummy_T * dummy_P
221          c8 = dummy_T * dummy_P
222          d8 = dummy_T * dummy_P
223          e8 = dummy_T * dummy_P
224          f8 = dummy_T * dummy_P
225          g8 = dummy_T * dummy_P
226          h8 = dummy_T * dummy_P
227          i8 = dummy_T * dummy_P
228          j8 = dummy_T * dummy_P
229          k8 = dummy_T * dummy_P
230          l8 = dummy_T * dummy_P
231          m8 = dummy_T * dummy_P
232          n8 = dummy_T * dummy_P
233          o8 = dummy_T * dummy_P
234          p8 = dummy_T * dummy_P
235          q8 = dummy_T * dummy_P
236          r8 = dummy_T * dummy_P
237          s8 = dummy_T * dummy_P
238          t8 = dummy_T * dummy_P
239          u8 = dummy_T * dummy_P
240          v8 = dummy_T * dummy_P
241          w8 = dummy_T * dummy_P
242          x8 = dummy_T * dummy_P
243          y8 = dummy_T * dummy_P
244          z8 = dummy_T * dummy_P
245          a9 = dummy_T * dummy_P
246          b9 = dummy_T * dummy_P
247          c9 = dummy_T * dummy_P
248          d9 = dummy_T * dummy_P
249          e9 = dummy_T * dummy_P
250          f9 = dummy_T * dummy_P
251          g9 = dummy_T * dummy_P
252          h9 = dummy_T * dummy_P
253          i9 = dummy_T * dummy_P
254          j9 = dummy_T * dummy_P
255          k9 = dummy_T * dummy_P
256          l9 = dummy_T * dummy_P
257          m9 = dummy_T * dummy_P
258          n9 = dummy_T * dummy_P
259          o9 = dummy_T * dummy_P
260          p9 = dummy_T * dummy_P
261          q9 = dummy_T * dummy_P
262          r9 = dummy_T * dummy_P
263          s9 = dummy_T * dummy_P
264          t9 = dummy_T * dummy_P
265          u9 = dummy_T * dummy_P
266          v9 = dummy_T * dummy_P
267          w9 = dummy_T * dummy_P
268          x9 = dummy_T * dummy_P
269          y9 = dummy_T * dummy_P
270          z9 = dummy_T * dummy_P
271          a10 = dummy_T * dummy_P
272          b10 = dummy_T * dummy_P
273          c10 = dummy_T * dummy_P
274          d10 = dummy_T * dummy_P
275          e10 = dummy_T * dummy_P
276          f10 = dummy_T * dummy_P
277          g10 = dummy_T * dummy_P
278          h10 = dummy_T * dummy_P
279          i10 = dummy_T * dummy_P
280          j10 = dummy_T * dummy_P
281          k10 = dummy_T * dummy_P
282          l10 = dummy_T * dummy_P
283          m10 = dummy_T * dummy_P
284          n10 = dummy_T * dummy_P
285          o10 = dummy_T * dummy_P
286          p10 = dummy_T * dummy_P
287          q10 = dummy_T * dummy_P
288          r10 = dummy_T * dummy_P
289          s10 = dummy_T * dummy_P
290          t10 = dummy_T * dummy_P
291          u10 = dummy_T * dummy_P
292          v10 = dummy_T * dummy_P
293          w10 = dummy_T * dummy_P
294          x10 = dummy_T * dummy_P
295          y10 = dummy_T * dummy_P
296          z10 = dummy_T * dummy_P
297          a11 = dummy_T * dummy_P
298          b11 = dummy_T * dummy_P
299          c11 = dummy_T * dummy_P
300          d11 = dummy_T * dummy_P
301          e11 = dummy_T * dummy_P
302          f11 = dummy_T * dummy_P
303          g11 = dummy_T * dummy_P
304          h11 = dummy_T * dummy_P
305          i11 = dummy_T * dummy_P
306          j11 = dummy_T * dummy_P
307          k11 = dummy_T * dummy_P
308          l11 = dummy_T * dummy_P
309          m11 = dummy_T * dummy_P
310          n11 = dummy_T * dummy_P
311          o11 = dummy_T * dummy_P
312          p11 = dummy_T * dummy_P
313          q11 = dummy_T * dummy_P
314          r11 = dummy_T * dummy_P
315          s11 = dummy_T * dummy_P
316          t11 = dummy_T * dummy_P
317          u11 = dummy_T * dummy_P
318          v11 = dummy_T * dummy_P
319          w11 = dummy_T * dummy_P
320          x11 = dummy_T * dummy_P
321          y11 = dummy_T * dummy_P
322          z11 = dummy_T * dummy_P
323          a12 = dummy_T * dummy_P
324          b12 = dummy_T * dummy_P
325          c12 = dummy_T * dummy_P
326          d12 = dummy_T * dummy_P
327          e12 = dummy_T * dummy_P
328          f12 = dummy_T * dummy_P
329          g12 = dummy_T * dummy_P
330          h12 = dummy_T * dummy_P
331          i12 = dummy_T * dummy_P
332          j12 = dummy_T * dummy_P
333          k12 = dummy_T * dummy_P
334          l12 = dummy_T * dummy_P
335          m12 = dummy_T * dummy_P
336          n12 = dummy_T * dummy_P
337          o12 = dummy_T * dummy_P
338          p12 = dummy_T * dummy_P
339          q12 = dummy_T * dummy_P
340          r12 = dummy_T * dummy_P
341          s12 = dummy_T * dummy_P
342          t12 = dummy_T * dummy_P
343          u12 = dummy_T * dummy_P
344          v12 = dummy_T * dummy_P
345          w12 = dummy_T * dummy_P
346          x12 = dummy_T * dummy_P
347          y12 = dummy_T * dummy_P
348          z12 = dummy_T * dummy_P
349          a13 = dummy_T * dummy_P
350          b13 = dummy_T * dummy_P
351          c13 = dummy_T * dummy_P
352          d13 = dummy_T * dummy_P
353          e13 = dummy_T * dummy_P
354          f13 = dummy_T * dummy_P
355          g13 = dummy_T * dummy_P
356          h13 = dummy_T * dummy_P
357          i13 = dummy_T * dummy_P
358          j13 = dummy_T * dummy_P
359          k13 = dummy_T * dummy_P
360          l13 = dummy_T * dummy_P
361          m13 = dummy_T * dummy_P
362          n13 = dummy_T * dummy_P
363          o13 = dummy_T * dummy_P
364          p13 = dummy_T * dummy_P
365          q13 = dummy_T * dummy_P
366          r13 = dummy_T * dummy_P
367          s13 = dummy_T * dummy_P
368          t13 = dummy_T * dummy_P
369          u13 = dummy_T * dummy_P
370          v13 = dummy_T * dummy_P
371          w13 = dummy_T * dummy_P
372          x13 = dummy_T * dummy_P
373          y13 = dummy_T * dummy_P
374          z13 = dummy_T * dummy_P
375          a14 = dummy_T * dummy_P
376          b14 = dummy_T * dummy_P
377          c14 = dummy_T * dummy_P
378          d14 = dummy_T * dummy_P
379          e14 = dummy_T * dummy_P
380          f14 = dummy_T * dummy_P
381          g14 = dummy_T * dummy_P
382          h14 = dummy_T * dummy_P
383          i14 = dummy_T * dummy_P
384          j14 = dummy_T * dummy_P
385          k14 = dummy_T * dummy_P
386          l14 = dummy_T * dummy_P
387          m14 = dummy_T * dummy_P
388          n14 = dummy_T * dummy_P
389          o14 = dummy_T * dummy_P
390          p14 = dummy_T * dummy_P
391          q14 = dummy_T * dummy_P
392          r14 = dummy_T * dummy_P
393          s14 = dummy_T * dummy_P
394          t14 = dummy_T * dummy_P
395          u14 = dummy_T * dummy_P
396          v14 = dummy_T * dummy_P
397          w14 = dummy_T * dummy_P
398          x14 = dummy_T * dummy_P
399          y14 = dummy_T * dummy_P
400          z14 = dummy_T * dummy_P
401          a15 = dummy_T * dummy_P
402          b15 = dummy_T * dummy_P
403          c15 = dummy_T * dummy_P
404          d15 = dummy_T * dummy_P
405          e15 = dummy_T * dummy_P
406          f15 = dummy_T * dummy_P
407          g15 = dummy_T * dummy_P
408          h15 = dummy_T * dummy_P
409          i15 = dummy_T * dummy_P
410          j15 = dummy_T * dummy_P
411          k15 = dummy_T * dummy_P
412          l15 = dummy_T * dummy_P
413          m15 = dummy_T * dummy_P
414          n15 = dummy_T * dummy_P
415          o15 = dummy_T * dummy_P
416          p15 = dummy_T * dummy_P
417          q15 = dummy_T * dummy_P
418          r15 = dummy_T * dummy_P
419          s15 = dummy_T * dummy_P
420          t15 = dummy_T * dummy_P
421          u15 = dummy_T * dummy_P
422          v15 = dummy_T * dummy_P
423          w15 = dummy_T * dummy_P
424          x15 = dummy_T * dummy_P
425          y15 = dummy_T * dummy_P
426          z15 = dummy_T * dummy_P
427          a16 = dummy_T * dummy_P
428          b16 = dummy_T * dummy_P
429          c16 = dummy_T * dummy_P
430          d16 = dummy_T * dummy_P
431          e16 = dummy_T * dummy_P
432          f16 = dummy_T * dummy_P
433          g16 = dummy_T * dummy_P
434          h16 = dummy_T * dummy_P
435          i16 = dummy_T * dummy_P
436          j16 = dummy_T * dummy_P
43
```

Fig 1-b) De < www.coppe.ufrj.br/pt-br/planeta-coppe-noticias/noticias/coppe-inaugura-o-supercomputador-lobo-carneiro > em
< http://www.coppe.ufrj.br/sites/default/files/foto_principal_400.jpg >

- Fig 1-c) De < www.knowledgecity.com/ > em
< <https://cdn0.knowledgecity.com/opencontent/courses/previews/BUS1200.jpg> >
- Fig 3-a) De "Braga A. J. O., 2016, EQUILÍBRIO DE FASES A ALTA PRESSÃO DE SISTEMAS CONSTITUÍDOS POR CO₂, FENANTRENO, TOLUENO E METANOL: ESTUDO EXPERIMENTAL, Dissertação de mestrado", em
< <http://tpqb.eq.ufrj.br/download/equilibrio-de-fases-a-alta-pressao-de-sistemas-constituidos-por-co2-fenantreno.pdf> >
- Fig 3-b) De < www.acpaegypt.com/scale-inhibitors--paraffin-dispersant.html > em <
http://www.acpaegypt.com/uploads/1/0/6/7/10673668/3129251_orig.jpg >
- Fig 3-c) De < www.utahbiodieselsupply.com/biodieselarticles.php > em <
<https://www.utahbiodieselsupply.com/images/biodieselarticles/differentstagesofbiodiesel.jpg> >
- Fig 3-d) Montagem baseada em “Sandler, 1996, INFINITE DILUTION ACTIVITY COEFFICIENTS IN CHEMICAL, ENVIRONMENTAL AND BIOCHEMICAL ENGINEERING, Fluid Phase Equilibria 116 (1996) 343-353”