

João Pedro Baza Garcia Rodrigues

**DCOU — Dimensionamento Computacional de
Operações Unitárias: uma ferramenta didática
para Engenharia Química**

Campo Grande – MS

2026

João Pedro Baza Garcia Rodrigues

**DCOU — Dimensionamento Computacional de Operações
Unitárias: uma ferramenta didática para Engenharia
Química**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
no Instituto de Química como requisito básico
para a conclusão do Curso de Engenharia
Química.

Universidade Federal de Mato Grosso do Sul – UFMS
Instituto de Química – INQUI
Engenharia Química

Orientador: Celso Murilo dos Santos

Campo Grande – MS
2026

João Pedro Baza Garcia Rodrigues

DCOU — Dimensionamento Computacional de Operações Unitárias: uma ferramenta didática para Engenharia Química

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
no Instituto de Química como requisito básico
para a conclusão do Curso de Engenharia
Química.

Trabalho aprovado. Campo Grande – MS, 13 de julho de 2026:

Celso Murilo dos Santos
Docente Orientador

Danieli Cristine Anversa
Docente Doutora

Vinícius Basso de Godoy
Mestre

Campo Grande – MS
2026

Agradecimentos

Agradeço a Deus, por me conceder forças nos momentos difíceis e iluminar meu caminho ao longo desta jornada acadêmica.

Aos meus pais, Cassiano e Jacquecislene, por me darem não apenas a vida, mas também o dom do estudo e do senso crítico.

À minha namorada, Carolyne, que, com sua paciência, carinho e incentivo, foi essencial para que eu visse propósito no que eu fazia, como a luz que guia a direção da folha.

*“Não deseje que seja mais fácil, deseje ser melhor.
Não deseje menos problemas, deseje mais habilidades.
Não deseje menos desafios, deseje mais sabedoria.”*
(Jim Rohn)

Resumo

Este trabalho apresenta o desenvolvimento do DCOU (*Dimensionamento Computacional de Operações Unitárias*), um *software web* de código aberto concebido como ferramenta didática para o ensino de Engenharia Química. O sistema automatiza cálculos de operações unitárias a partir de equações consolidadas, contemplando módulos de tubulações, escoamento, bombas, propriedades termodinâmicas, reatores ideais e balanços de massa. Além dos resultados numéricos, a aplicação integra recursos voltados ao aprendizado conceitual, como glossário técnico com equações renderizadas, explicações teóricas embutidas em cada calculadora, cenários de exemplo fornecidos pelo *backend* e visualizações interativas dos fenômenos físicos. A arquitetura cliente-servidor expõe os cálculos e os modelos de visualização por meio de uma *API* (*Application Programming Interface*) aberta, enquanto o *frontend* moderno em *React* organiza esses recursos em uma experiência navegável e responsiva, com adaptação consistente a diferentes tamanhos de tela, incluindo dispositivos móveis, desktops e monitores *ultrawide*. O código permanece publicamente disponível, promovendo flexibilidade, colaboração e aprimoramento contínuo por parte da comunidade acadêmica.

Palavras-chave: Ferramenta didática. Operações unitárias. *Software educacional*. Código aberto. Engenharia Química.

Abstract

This work presents the development of DCOU (*Computational Sizing of Unit Operations*), an open-source web-based software application designed as a didactic tool for Chemical Engineering education. The system automates calculations for unit operations based on consolidated equations, covering modules for piping, fluid flow, pumps, thermodynamic properties, ideal reactors, and mass balances. In addition to numerical results, the application integrates learning-oriented resources, such as a technical glossary with rendered equations, theoretical explanations embedded in each calculator, example scenarios provided by the *backend*, and interactive visualizations of physical phenomena. The client-server architecture exposes calculations and visualization models through an open *API* (*Application Programming Interface*), while the modern *React* frontend organizes these resources into a navigable and responsive experience, with consistent adaptation to different screen sizes, including mobile devices, desktops, and ultrawide monitors. The code remains publicly available, promoting flexibility, collaboration, and continuous improvement by the academic community.

Keywords: Didactic tool. Unit operations. Educational software. Open source. Chemical Engineering.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Interface de cálculo do fator de atrito	34
Figura 2 – Tipos de dutos de escoamento	36
Figura 3 – Interface de cálculo para as propriedades de uma mistura	39
Figura 4 – Resultados do balanço de massa com reciclo e reação	47
Figura 5 – Interface gráfica do módulo de cálculos de tubulação	51
Figura 6 – Inicialização da biblioteca de componentes via <i>Python</i>	56
Figura 7 – Inicialização da biblioteca de componentes via <i>frontend</i>	57
Figura 8 – Listagem parcial de componentes disponíveis na biblioteca termodinâmica	57
Figura 9 – Propriedades termofísicas da água calculadas a 300K e 101,3kPa. . .	58
Figura 10 – Mapeamento de chaves de propriedades e suas unidades padronizadas.	59
Figura 11 – Propriedades críticas e do ponto triplo calculadas para a água.	60
Figura 12 – Propriedades termodinâmicas disponíveis para cálculo em misturas. .	61
Figura 13 – Propriedades termodinâmicas disponíveis para cálculo em misturas. .	62
Figura 14 – Código de validação do Balanço de Massa (Misturador)	68
Figura 15 – Glossário técnico com busca e equações renderizadas	75
Figura 16 – Exemplo de explicação teórica embutida em uma calculadora	76
Figura 17 – Card do perfil de velocidade em duto circular	77
Figura 18 – Card da curva da bomba e do sistema	78
Figura 19 – Card da margem de <i>NPSH</i>	79
Figura 20 – Card do mapa de eficiência da bomba com destaque do <i>BEP</i>	79
Figura 21 – Card do diagrama de <i>Levenspiel</i> comparando reatores <i>CSTR</i> e <i>PFR</i> .	80
Figura 22 – Card do gráfico de <i>Arrhenius</i>	81
Figura 23 – Card dos perfis espaciais de concentração e temperatura no <i>PFR</i> . .	82
Figura 24 – Card da conversão do <i>PFR</i> em função da razão de reciclo	83
Figura 25 – Card do diagrama <i>T-x-y</i> binário	84
Figura 26 – Card do diagrama de <i>McCabe-Thiele</i> gerado a partir do equilíbrio binário	85
Figura 27 – Card da curva de pressão de vapor	86
Figura 28 – Card do diagrama ternário para uma corrente de três componentes .	87
Figura 29 – Card do mapa de reciclo e purga no balanço de massa	88
Figura 30 – Card da superfície <i>T-P</i> de propriedades	89
Figura 31 – Trilhas de aprendizagem apresentadas na página inicial	90
Figura 32 – Tela inicial com trilhas de aprendizagem e cartões de acesso rápido .	96
Figura 33 – Aba Composições do módulo de tubulações com exemplo carregado .	97
Figura 34 – Aba Schedules e Diâmetros com diâmetro comercial do exemplo . . .	98
Figura 35 – Aba Conexões com acessório carregado pelo exemplo	99
Figura 36 – Aba Diâmetro Calculado com exemplo executado	100

Figura 37 – Aba Diâmetro Real com seleção de diâmetro comercial	101
Figura 38 – Aba Número de Reynolds com resultado e régua de regime	102
Figura 39 – Aba Fator de Atrito com diagrama de Moody	103
Figura 40 – Aba Diâmetro Hidráulico com pré-visualização geométrica	104
Figura 41 – Aba Perda de Carga com exemplo e curva do sistema	105
Figura 42 – Aba NPSH Disponível com indicador de margem	106
Figura 43 – Aba Altura Manométrica com decomposição dos termos de energia .	107
Figura 44 – Aba Propriedades Críticas com fluido do exemplo	108
Figura 45 – Aba Fluido Puro com propriedades e superfície T-P	109
Figura 46 – Aba Misturas com exemplo e diagrama ternário	110
Figura 47 – Aba Equilíbrio Binário com diagrama T-x-y	111
Figura 48 – Bloco McCabe-Thiele gerado a partir do exemplo binário	112
Figura 49 – Aba Envelope de Fase com curva gerada pelo exemplo	113
Figura 50 – Aba CSTR com exemplo calculado	114
Figura 51 – Aba PFR com exemplo calculado	115
Figura 52 – Aba Levenspiel comparando CSTR e PFR	116
Figura 53 – Aba Arrhenius com curva semilogarítmica do exemplo	117
Figura 54 – Aba Componentes do balanço de massa com exemplo carregado . . .	118
Figura 55 – Aba Correntes com alimentação, produto e reciclo do exemplo	119
Figura 56 – Aba Reações com estequiometria do exemplo	120
Figura 57 – Aba Splits / Reciclo com configuração do exemplo	121
Figura 58 – Aba Resultados do balanço de massa após cálculo do exemplo	122
Figura 59 – Glossário com busca por Reynolds	123

Lista de tabelas

Tabela 2 – Contratos de dados usados no cadastro de tubulações	31
Tabela 3 – Fluxo de cálculo da perda de carga com acessórios	32
Tabela 4 – Unidades e natureza dos grupos de Reynolds e fator de atrito	33
Tabela 5 – Etapas do cálculo da altura manométrica	37
Tabela 6 – Etapas do cálculo do <i>NPSH</i> disponível	38
Tabela 7 – Fluxo de obtenção de propriedades termofísicas	39
Tabela 8 – Fluxo de obtenção de propriedades de misturas	40
Tabela 9 – Unidades e natureza dos símbolos nas relações estequiométricas e cinéticas de reatores	41
Tabela 10 – Unidades e natureza dos símbolos na sequência de cálculo do <i>CSTR</i> .	43
Tabela 11 – Etapas computacionais do modelo <i>CSTR</i>	45
Tabela 12 – Unidades e natureza dos símbolos no dimensionamento do <i>PFR</i> . . .	45
Tabela 13 – Unidades e natureza dos termos no balanço de massa com reciclo . .	46
Tabela 14 – Bibliotecas e <i>frameworks</i> utilizados no <i>backend</i>	48
Tabela 15 – Bibliotecas e <i>frameworks</i> utilizados no <i>frontend</i>	52
Tabela 16 – Validação Balanço de Massa (Misturador)	69
Tabela 17 – Representação didática do balanço de massa validado	70
Tabela 18 – Resumo dos contratos validados no módulo de tubulações	71
Tabela 19 – Validação <i>CSTR</i> ($X = 0,85$)	72
Tabela 20 – Validação <i>PFR</i> ($X = 0,90$)	73
Tabela 21 – Validação <i>PFR</i> com Reciclo ($R = 2,0$; $X = 0,90$)	74
Tabela 22 – Síntese das evidências de validação dos módulos implementados . . .	92

Lista de abreviaturas e siglas

<i>API</i>	<i>Application Programming Interface</i>
<i>ASGI</i>	<i>Asynchronous Server Gateway Interface</i>
<i>BEP</i>	<i>Best Efficiency Point</i>
<i>CD</i>	<i>Continuous Deployment</i>
<i>CI</i>	<i>Continuous Integration</i>
<i>CSS</i>	<i>Cascading Style Sheets</i>
<i>CSTR</i>	<i>Continuous Stirred Tank Reactor</i>
DCOU	Dimensionamento Computacional de Operações Unitárias
EDO	Equação diferencial ordinária
<i>HTML</i>	<i>HyperText Markup Language</i>
<i>LHS</i>	<i>Left-Hand Side</i>
<i>PFR</i>	<i>Plug Flow Reactor</i>
<i>NPSH</i>	<i>Net Positive Suction Head</i>
<i>NPSH_d</i>	<i>Net Positive Suction Head</i> disponível
<i>NPSH_r</i>	<i>Net Positive Suction Head</i> requerido
<i>REST</i>	<i>Representational State Transfer</i>
<i>RHS</i>	<i>Right-Hand Side</i>
<i>SI</i>	<i>Sistema Internacional de Unidades</i>
<i>SVG</i>	<i>Scalable Vector Graphics</i>
<i>UI</i>	<i>User Interface</i>
<i>UX</i>	<i>User Experience</i>

Lista de símbolos

Símbolo	Descrição	Unidade	Localização
A	Área da seção transversal ou área molhada	m^2	Eq. 4.10
a	Lado da seção retangular	m	Eq. 4.12
b	Outro lado da seção retangular	m	Eq. 4.12
C	Coeficiente empírico de Hazen-Williams	adimensional na forma empírica adotada	Eq. 4.9
C_i	Concentração do componente i	mol/m^3	Eq. 4.17; Eq. 4.18; Eq. 4.23
C_A	Concentração do componente A	mol/m^3	Eq. 4.45; Eq. 4.46; Eq. 4.49
D	Diâmetro interno ou diâmetro característico	m	Eq. 4.1; Eq. 4.3; Eq. 4.4; Eq. 4.6; Eq. 4.7; Eq. 4.8; Eq. 4.9; Eq. 4.11
D_h	Diâmetro hidráulico	m	Eq. 4.5; Eq. 4.10; Eq. 4.11; Eq. 4.12; Eq. 4.13
D_i	Diâmetro interno do ânulo	m	Eq. 4.13
D_o	Diâmetro externo do ânulo	m	Eq. 4.13
dX	Diferencial da conversão	adimensional	Eq. 4.28; Eq. 4.49; Eq. 4.55
ε	Fator de variação volumétrica da reação	adimensional	Eq. 4.19; Eq. 4.20
ε	Rugosidade absoluta da tubulação	m	Eq. 4.5; Eq. 4.6; Eq. 4.7
F_{A0}	Vazão molar inicial do componente A	mol/s	Eq. 4.24; Eq. 4.26; Eq. 4.28; Eq. 4.49; Eq. 4.55
$F_{A,in}$	Vazão molar de entrada do componente A	mol/s	Eq. 4.40; Eq. 4.41
$F_{A,out}$	Vazão molar de saída do componente A	mol/s	Eq. 4.40
$F_{B,out}$	Vazão molar de saída do componente B	mol/s	Eq. 4.41

F_G	Vazão bruta antes da retirada do reciclo	mesma unidade de F_P	Eq. 4.33
F_P	Vazão de produto na base de cálculo adotada	unidade de vazão da base adotada	Eq. 4.32; Eq. 4.33
F_R	Vazão de reciclo na base de cálculo adotada	unidade de vazão da base adotada	Eq. 4.32
$F_{Produto}$	Vazão mássica de produto no exemplo de validação	kg/h	Eq. 4.44
$F_{Reciclo}$	Vazão mássica de reciclo no exemplo de validação	kg/h	Eq. 4.43
F_S	Vazão mássica de um corrente material do exemplo de mistura	kg/h	Eq. 4.37; Eq. 4.38
f	Fator de atrito de Darcy	adimensional	Eq. 4.2; Eq. 4.5; Eq. 4.6; Eq. 4.7; Eq. 4.8
f	Fração de reciclo em relação ao produto	adimensional	Eq. 4.32; Eq. 4.33
g	Aceleração da gravidade	m/s^2	Eq. 4.8; Eq. 4.14; Eq. 4.15
H	Altura manométrica	m	Eq. 4.14
h_f	Perda de carga	m	Eq. 4.8; Eq. 4.9; Eq. 4.14; Eq. 4.35; Eq. 4.36
h_{suc}	Perda de carga na sucção	m	Eq. 4.15
k	Constante cinética da lei de velocidade	depende da ordem global da reação	Eq. 4.17; Eq. 4.45; Eq. 4.46; Eq. 4.49; Eq. 4.50; Eq. 4.56
L	Comprimento real da tubulação	m	Eq. 4.8; Eq. 4.9; Eq. 4.34
L_{eq}	Comprimento equivalente de acessórios	múltiplo de diâmetro ou m , conforme definição do trecho	Eq. 4.8; Eq. 4.34
L_{total}	Comprimento total equivalente	m	Eq. 4.34
$\dot{m}$	Vazão mássica	kg/s ou kg/h , conforme base do exemplo	Eq. 4.30; Eq. 4.31

μ	Viscosidade dinâmica	$Pa \cdot s$	Eq. 4.3
N_{i0}	Vazão molar inicial do componente i	mol/s	Eq. 4.16; Eq. 4.21; Eq. 4.23
n_i	Ordem parcial da reação em relação ao componente i	adimensional	Eq. 4.17
$NPSH_{disp}$	NPSH disponível	m	Eq. 4.15
ν	Viscosidade cinemática	m^2/s	Eq. 4.4
ν_i	Coefficiente estequiométrico do componente i	adimensional	Eq. 4.16; Eq. 4.18; Eq. 4.19
ν_A	Coefficiente estequiométrico do componente A	adimensional	Eq. 4.18; Eq. 4.19
P	Pressão absoluta do sistema	Pa	Eq. 4.20
P	Perímetro molhado	m	Eq. 4.10
P_0	Pressão inicial ou de referência	Pa	Eq. 4.20
P_1	Pressão no ponto 1	Pa	Eq. 4.14
P_2	Pressão no ponto 2	Pa	Eq. 4.14
P_{atm}	Pressão atmosférica	Pa	Eq. 4.15
P_{suc}	Pressão na sucção	Pa	Eq. 4.15
p_{vap}	Pressão de vapor do fluido	Pa	Eq. 4.15
ψ	Fator de diluição	adimensional	Eq. 4.18; Eq. 4.20
Q	Vazão volumétrica	m^3/s	Eq. 4.1; Eq. 4.9
Q_i	Vazão volumétrica da corrente ou componente i	m^3/s	Eq. 4.21; Eq. 4.22
Q_T	Vazão volumétrica total	m^3/s	Eq. 4.22; Eq. 4.23; Eq. 4.25; Eq. 4.27
R	Razão de reciclo	adimensional	Eq. 4.28; Eq. 4.54; Eq. 4.55; Eq. 4.56
$razao_i$	Razão para escolha do reagente limitante	mol/s	Eq. 4.16
Re	Número de Reynolds	adimensional	Eq. 4.2; Eq. 4.3; Eq. 4.4; Eq. 4.5; Eq. 4.6; Eq. 4.7
ρ	Massa específica do fluido	kg/m^3	Eq. 4.3; Eq. 4.14; Eq. 4.15
r	Taxa de reação genérica	$mol/(m^3 \cdot s)$	Eq. 4.17
r_A	Taxa de reação do componente A	$mol/(m^3 \cdot s)$	Eq. 4.24; Eq. 4.26; Eq. 4.28; Eq. 4.45; Eq. 4.55

T	Temperatura absoluta do sistema	K	Eq. 4.20
T_0	Temperatura inicial ou de referência	K	Eq. 4.20
τ	Tempo de residência	s	Eq. 4.25; Eq. 4.27
V	Volume do reator ou volume calculado	m^3	Eq. 4.24; Eq. 4.25; Eq. 4.26; Eq. 4.27; Eq. 4.28; Eq. 4.49; Eq. 4.50; Eq. 4.55; Eq. 4.56
V	Velocidade média de escoamento	m/s	Eq. 4.1; Eq. 4.3; Eq. 4.4; Eq. 4.8; Eq. 4.14
V_{CSTR}	Volume calculado para o CSTR	m^3	Eq. 4.46
V_{manual}	Volume calculado manualmente na validação	m^3	Eq. 4.47; Eq. 4.48; Eq. 4.51; Eq. 4.52; Eq. 4.53; Eq. 4.58; Eq. 4.59; Eq. 4.60
V_{suc}	Velocidade na sucção	m/s	Eq. 4.15
v_0	Vazão volumétrica inicial	m^3/s	Eq. 4.46; Eq. 4.50; Eq. 4.56
v_A	Coefficiente estequiométrico de A na função objetivo	adimensional	Eq. 4.26
X	Conversão	adimensional	Eq. 4.18; Eq. 4.20; Eq. 4.24; Eq. 4.26; Eq. 4.28; Eq. 4.45; Eq. 4.46; Eq. 4.49; Eq. 4.50
X_A	Conversão do componente A	adimensional	Eq. 4.40; Eq. 4.41
X_{in}	Conversão na entrada do reator com reciclo	adimensional	Eq. 4.54; Eq. 4.55; Eq. 4.56; Eq. 4.57
X_{out}	Conversão na saída do reator com reciclo	adimensional	Eq. 4.54; Eq. 4.55; Eq. 4.56
y_A	Fração molar do componente A	adimensional	Eq. 4.19; Eq. 4.42
y_B	Fração molar do componente B	adimensional	Eq. 4.42
z	Cota geométrica	m	Eq. 4.14; Eq. 4.15
$z_{S,agua}$	Fração mássica de água em uma corrente do exemplo de mistura	adimensional	Eq. 4.38; Eq. 4.39

Sumário

1	INTRODUÇÃO	25
2	JUSTIFICATIVA	26
3	OBJETIVOS	27
3.1	Geral	27
3.2	Específico	27
4	METODOLOGIA	29
4.1	Funções de Engenharia	29
4.1.1	Transporte de Fluidos	29
4.1.1.1	Dimensionamento de Tubulações	29
4.1.1.2	Diâmetro Calculado	29
4.1.1.3	Diâmetro Real	30
4.1.1.4	Tubulações	30
4.1.1.5	Escoamento, Perdas de Carga e Diâmetros Hidráulicos	32
4.1.1.6	Número de Reynolds	33
4.1.1.7	Fator de Atrito	33
4.1.1.8	Perda de Carga – Darcy–Weisbach e Hazen–Williams	35
4.1.1.9	Diâmetro Hidráulico para Geometrias Diversas	35
4.1.2	Bombas	37
4.1.2.1	Altura Manométrica entre Dois Pontos	37
4.1.2.2	<i>NPSH</i> Disponível	37
4.1.3	Propriedades Termofísicas	38
4.1.4	Reatores	40
4.1.4.1	Reator do Tipo <i>CSTR</i>	42
4.1.4.1.1	Conversão e Cinética (Cálculo do Volume)	43
4.1.4.1.2	Volume e Cinética (Cálculo da Conversão)	44
4.1.4.1.3	Tempo de Residência e Cinética	44
4.1.4.2	Reator do Tipo <i>PFR</i>	45
4.1.5	Balanco de Massa	46
4.2	Desenvolvimento do Software	48
4.2.1	<i>Backend</i>	48
4.2.2	<i>Frontend</i>	50
4.2.3	<i>Deploy</i>	52
4.2.4	Integração Contínua e Entrega Contínua	53

4.2.5	Distribuição Desktop Multiplataforma	54
4.2.6	Versionamento	54
4.3	API	54
4.4	Validação de Cálculos e Especificação de Retornos	56
4.4.1	Componentes	56
4.4.1.1	Listar Componentes	57
4.4.1.2	Valor de Propriedade	58
4.4.1.3	Nome de Propriedades	58
4.4.1.4	Propriedades Críticas	59
4.4.1.5	Opções de Propriedades de Misturas	60
4.4.1.6	Valor de Propriedades de Misturas	61
4.4.2	Hidráulicos	62
4.4.2.1	Perda de Carga	62
4.4.2.2	Reynolds	63
4.4.2.3	Fator de Atrito	63
4.4.2.4	Diâmetro Real	64
4.4.2.5	Diâmetro Calculado	64
4.4.2.6	<i>NPSH</i> Disponível	65
4.4.2.7	Altura manométrica	65
4.4.2.8	Diâmetro Hidráulico	65
4.4.3	Balanços de Massa	66
4.4.3.1	Misturador Ideal	66
4.4.3.2	Reator de Conversão	69
4.4.3.3	Divisor de Corrente (<i>Splitter</i>)	69
4.4.4	Tubulações	70
4.4.4.1	Acessórios	70
4.4.4.2	Especificação de Acessórios	70
4.4.4.3	Composição	70
4.4.4.4	Especificação da Composição	71
4.4.4.5	<i>Schedules</i>	71
4.4.4.6	Diâmetros	71
4.4.4.7	Especificação de Diâmetros	71
4.4.5	Reatores	72
4.4.5.1	<i>CSTR</i> : Reator Tanque Agitado Continuamente	72
4.4.5.2	<i>PFR</i> : Reator Tubular	73
4.4.5.3	<i>PFR</i> com Reciclo	73
4.5	Recursos Didáticos	74
4.5.1	Glossário	75
4.5.2	Explicações Teóricas Embutidas	75

4.5.3	Visualizações Interativas	76
4.5.3.1	Diagrama de Moody	77
4.5.3.2	Curva da Bomba, Margem de <i>NPSH</i> e Mapa de Eficiência	77
4.5.3.3	Diagrama de Levenspiel	80
4.5.3.4	Gráfico de Arrhenius	80
4.5.3.5	Perfis Espaciais no <i>PFR</i>	81
4.5.3.6	Diagrama <i>T-x-y</i> Binário	83
4.5.3.7	Diagrama de McCabe-Thiele	84
4.5.3.8	Envelope de Fase e Curva de Pressão de Vapor	85
4.5.3.9	Diagrama Ternário	86
4.5.3.10	Mapa de Reciclo e Purga	87
4.5.3.11	Superfície <i>T-P</i> de Propriedades	88
4.5.4	Cenários de Exemplo	89
4.5.5	Trilhas de Aprendizagem	90
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	91
6	GUIA DE USO DA FERRAMENTA	95
6.1	Acesso e Tela Inicial	95
6.2	Tubulações e Acessórios	96
6.3	Dimensionamento	99
6.4	Escoamento Interno	101
6.5	Perda de Carga e Bombas	104
6.6	Propriedades de Componentes	107
6.7	Reatores Ideais	113
6.8	Balanço de Massa	117
6.9	Glossário e Validações	122
7	CONCLUSÕES	125
	REFERÊNCIAS	126

1 Introdução

O dimensionamento de equipamentos em processos químicos é uma etapa crítica no projeto de plantas industriais, envolvendo princípios fundamentais da engenharia química, como balanços de massa e energia, termodinâmica, transferência de calor e de massa e cinética química. Esses conceitos são aplicados para definir características operacionais e tamanhos de equipamentos, como trocadores de calor, colunas de destilação, reatores, bombas e compressores. O domínio das operações unitárias é essencial para garantir desempenho seguro, eficiente e otimizado em termos de custos nos processos industriais (FELDER; ROUSSEAU, 2005).

Apesar de *softwares* consagrados como *Aspen Plus*®, *HYSYS*® e *ChemCAD*® serem amplamente utilizados na indústria, seu uso é limitado por custos elevados de licenciamento e pela falta de acesso em ambientes acadêmicos (ASPEN TECHNOLOGY, 2026b; ASPEN TECHNOLOGY, 2026a; DATACOR, 2026; ALVES et al., 2022).

Essas ferramentas, embora poderosas, nem sempre priorizam o aprendizado conceitual, o que pode dificultar a compreensão dos cálculos pelos estudantes e engenheiros em formação. Há, portanto, espaço para soluções acessíveis, flexíveis e didáticas. Este trabalho propõe o desenvolvimento do DCOU (*Dimensionamento Computacional de Operações Unitárias*), um *software web* próprio e gratuito que vai além da execução de cálculos isolados: o sistema foi concebido como uma ferramenta didática, articulando rotinas de engenharia com recursos que apoiam diretamente o aprendizado — explicações teóricas, visualizações dos fenômenos físicos, um glossário técnico e cenários de exemplo reutilizáveis —, integrando, assim, conhecimento teórico e programação moderna.

2 Justificativa

O desenvolvimento de um *software* gratuito e de código aberto para dimensionamento de operações unitárias integra a teoria da engenharia química com ferramentas de programação e automação, democratizando o acesso a simulações para instituições de ensino, profissionais autônomos e pequenas empresas desprovidas de licenças comerciais. Essa abertura reduz a dependência de ambientes fechados de alto custo e permite que o código seja comparado diretamente com as equações e referências utilizadas no trabalho.

Isso favorece o aprendizado ativo, permitindo visualizações em tempo real de como parâmetros operacionais afetam o desempenho dos equipamentos. No DCOU, esse propósito didático é materializado por recursos como explicações teóricas embutidas em cada calculadora, visualizações interativas dos fenômenos (regimes de escoamento, diagrama de *Moody*, curvas de *Levenspiel*, diagrama de *McCabe-Thiele*, envelope de fase e outros), um glossário técnico de apoio e cenários de exemplo fornecidos pelo *backend*, aproximando o estudante de fluxos de trabalho reais da engenharia.

No contexto da Indústria 4.0, o domínio de linguagens de programação e bancos de dados é um diferencial para engenheiros químicos, dada a crescente digitalização de processos e a necessidade de análise de dados em tempo real.

Softwares proprietários como *Aspen Plus*® e *HYSYS*® apresentam custo elevado e acesso restrito ([ASPEN TECHNOLOGY, 2026b](#); [ASPEN TECHNOLOGY, 2026a](#); [ALVES et al., 2022](#)), enquanto alternativas *open-source* como o nacional *DWSIM* ([DWSIM, 2026](#)) ainda apresentam limitações quando o objetivo é combinar cálculo, leitura didática dos fenômenos e acoplamento entre módulos em uma experiência customizável. Planilhas em *Excel*® ou rotinas em *MATLAB*®, por sua vez, oferecem baixa modularização e carecem de interfaces amigáveis para simulação de processos complexos. Identifica-se, assim, uma lacuna em soluções abertas, escaláveis e focadas no aprendizado, que combinem rigor técnico com facilidade de uso. Este trabalho busca preencher essa lacuna com um sistema modular e extensível, no qual bancos de propriedades, catálogos de módulos e rotinas de cálculo possam ser ampliados sem depender de licenças comerciais fechadas, servindo tanto ao ensino quanto à prática profissional.

Sendo de código aberto, espera-se que estudantes com formação interdisciplinar em engenharia química e desenvolvimento de *software* possam contribuir para expandir e aprimorar o repertório da ferramenta, servindo como base acadêmica para trabalhos futuros. A disponibilidade das rotinas, dos testes automatizados e dos cálculos visíveis também cria condições para identificar erros, revisar hipóteses e manter rastreável a correspondência entre implementação, equações e literatura.

3 Objetivos

3.1 Geral

Desenvolver o DCOU, um *software web* modular para cálculo e apoio didático em operações unitárias, integrando rotinas de tubulações, escoamento, bombas, propriedades termodinâmicas, reatores ideais e balanços de massa, simultaneamente oferecendo recursos que apoiem a compreensão dos conceitos envolvidos. O sistema deve adotar arquitetura cliente-servidor com interface *web* acessível por meio de *API* aberta, mantendo o código disponível publicamente.

3.2 Específico

- Implementar rotinas de cálculo baseadas em equações clássicas para operações unitárias como reatores, tubulações e demais correlatos, com perda de carga, *NPSH* etc.;
- Desenvolver uma interface *web* interativa e responsiva para inserção e interpretação de dados em diversos dispositivos, favorecendo a experiência do usuário;
- Integrar um banco de dados local inicial com propriedades físico-químicas de substâncias comuns (coeficientes de difusão, calor específico, entalpia de vaporização etc.);
- Disponibilizar recursos didáticos integrados — glossário técnico, explicações teóricas embutidas e visualizações interativas dos fenômenos físicos — que conectem cada cálculo ao seu fundamento conceitual;
- Disponibilizar cenários de exemplo e entradas de referência que encadeiem múltiplos módulos, reproduzindo fluxos de trabalho reais de engenharia;
- Estruturar trilhas de aprendizagem que organizem o uso dos módulos em sequência didática;
- Validar os resultados comparando-os com dados da literatura, assegurando precisão e confiabilidade dos cálculos.

4 Metodologia

4.1 Funções de Engenharia

Para cada função existente no projeto, as entradas, saídas e definições de retorno são descritas a seguir. Algumas rotinas recuperam informações do banco de dados local ou das bibliotecas utilizadas, enquanto outras calculam diretamente parâmetros de projeto.

A organização da engenharia segue a sequência de transporte de fluidos, bombas, propriedades termofísicas, reatores e balanço de massa. Essa ordem explicita a progressão dos fundamentos físicos até os modelos de cálculo utilizados pelo *software*.

4.1.1 Transporte de Fluidos

4.1.1.1 Dimensionamento de Tubulações

Tubulações são componentes por onde o fluido escoa, permitindo a transferência de matéria entre equipamentos, desde a entrada de matéria-prima até a saída de produtos. Seu correto dimensionamento é imprescindível para a segurança e a eficiência do processo.

O dimensionamento consiste em definir o diâmetro nominal e o *schedule* capazes de conduzir as vazões dentro de faixas de velocidade e perda de carga economicamente ótimas. As grandezas envolvidas incluem vazão (mássica ou volumétrica), velocidade admissível, propriedades do fluido (massa específica, viscosidade), comprimento equivalente (devido a acessórios) e características do material (rugosidade, pressão de projeto).

Na prática, calcula-se um diâmetro a partir da vazão e velocidade alvo e seleciona-se o diâmetro comercial imediatamente superior disponível, verificando em seguida a perda de carga pelo método de Darcy–Weisbach e a integridade mecânica conforme normas aplicáveis. Temperatura e pressão afetam propriedades físicas do fluido e critérios de espessura da tubulação; adicionalmente, a topografia da planta e o número de acessórios elevam o comprimento equivalente total.

Subdimensionar uma tubulação implica grandes perdas de carga e custos energéticos; superdimensionar acarreta CAPEX elevado e pode gerar velocidades muito baixas (favorecendo sedimentação em tubulações com sólidos). O embasamento teórico combina a equação de continuidade, correlações de atrito e seleção de materiais, apoiado no uso do diagrama de Moody ([WHITE, 2018](#)).

4.1.1.2 Diâmetro Calculado

O diâmetro calculado é baseado na vazão e na velocidade média do fluido escoando em um duto circular, de acordo com a Equação 4.1:

$$D = \sqrt{\frac{4 \cdot Q}{\pi \cdot V}} \quad (4.1)$$

Em que:

- Q – vazão volumétrica do fluido;
- V – velocidade média do fluido;
- D – diâmetro hidráulico do duto circular.

Essa relação advém diretamente da equação da continuidade para escoamento em regime permanente (WHITE, 2018). Q em m³/s e V em m/s dão D em m na equação; a rotina implementada converte o resultado exibido para mm.

Pseudocódigo do dimensionamento de diâmetro.

```
receber vazão, velocidade de projeto e unidade
converter vazão para m3/s
calcular área = vazão / velocidade
calcular diâmetro teórico = sqrt(4 * área / pi)
comparar diâmetro teórico com tabela de schedules
retornar diâmetro comercial, velocidade real e critérios de seleção
```

4.1.1.3 Diâmetro Real

O diâmetro real corresponde ao diâmetro nominal da tubulação a ser utilizada. Fabricantes produzem tubos em geometrias padronizadas (padrões de espessura como SCH 10, SCH 40, SCH 80 etc.). Deve-se calcular inicialmente o diâmetro necessário pelo método anterior e então escolher, em tabela de catálogo, o tubo comercial com diâmetro interno imediatamente superior, no material e *schedule* desejados. Essa lógica é implementada na função *get_real_diameter*, garantindo que o diâmetro selecionado comportará a vazão com velocidade dentro do admissível. Após a seleção, verifica-se a perda de carga resultante e, se necessário, itera-se para outro diâmetro.

4.1.1.4 Tubulações

Para um correto cálculo de perdas de carga e seleção de bombas, o *software* incorpora dados de catálogo de tubulações, rugosidades de materiais e comprimentos equivalentes de acessórios.

Rugosidade de materiais. A rugosidade absoluta do material interno da tubulação influencia o fator de atrito em regime turbulento por meio da rugosidade relativa ε/D . Materiais metálicos, plásticos ou com incrustações apresentam valores típicos de rugosidade

tabelados (WHITE, 2018). Com o tempo de operação, depósitos e corrosão podem elevar a rugosidade efetiva, devendo-se considerar fatores de segurança.

Catálogo de diâmetros. São armazenadas dimensões padrão de tubulações (diâmetro externo, espessura e diâmetro interno resultante) para diferentes *schedules* (por exemplo, SCH 10, 40 e 80) e materiais. Também podem ser incluídos dados de pressão máxima de trabalho e peso por metro. Isso permite que, dado um diâmetro calculado, o programa selecione o diâmetro nominal comercial mais próximo disponível.

Tabela 2 – Contratos de dados usados no cadastro de tubulações

Contrato	Campos principais	Uso no cálculo
Material	nome, rugosidade, descrição	Define propriedades geométricas e hidráulicas associadas à composição da tubulação.
Schedule	diâmetro nominal, diâmetro externo, espessura, diâmetro interno	Seleciona dimensões comerciais para cálculo de velocidade, área e perda de carga.
Acessório	tipo, diâmetro nominal, comprimento equivalente ou coeficiente local	Converte singularidades em contribuição de perda de carga.

Fonte: Autoria própria.

Coefficientes de perda em acessórios. Curvas, válvulas, expansões, contrações e conexões diversas introduzem perdas de carga locais. No modelo implementado, cada acessório pode ser contabilizado por um comprimento equivalente L_{eq} ou por um fator adimensional de perda K . O comprimento equivalente total da tubulação é obtido pela soma dos acessórios e acrescentado ao comprimento linear. Esses dados, como fatores K ou L_{eq} típicos para cada acessório padrão, foram compilados de literatura de engenharia de escoamento (PERRY; GREEN, 2007).

No cálculo de perdas de carga totais, o comprimento L da tubulação reta é acrescido do comprimento equivalente $\sum L_{eq}$ das singularidades presentes. Uma estimativa inadequada da rugosidade ou do efeito de acessórios pode produzir erros significativos na previsão de perda de carga, resultando em superdimensionamento ou subdimensionamento de bombas. Assim, o uso de dados acurados de catálogo e correlações de atrito é fundamental para a confiabilidade do dimensionamento. A Tabela a seguir resume o fluxo do cálculo de perda de carga por Darcy–Weisbach utilizando acessórios.

Tabela 3 – Fluxo de cálculo da perda de carga com acessórios

Etapa	Operação e verificação
Entradas	Método, fator de atrito, comprimento, diâmetro, velocidade ou vazão e acessórios.
Preparação	Converte as grandezas para unidades coerentes e soma os comprimentos equivalentes das singularidades.
Processamento	Aplica Darcy–Weisbach ou Hazen–Williams conforme o método selecionado.
Saída e validação	Retorna a perda de carga em metros e rejeita entradas ausentes, não numéricas ou resultados não positivos.

Fonte: Autoria própria.

4.1.1.5 Escoamento, Perdas de Carga e Diâmetros Hidráulicos

O comportamento do escoamento interno é governado, principalmente, pelo número de Reynolds, que permite classificar o regime como laminar, de transição ou turbulento. Variáveis-chave incluem o diâmetro hidráulico, a velocidade média, a viscosidade e a massa específica do fluido, bem como a rugosidade relativa da parede. Perfis de velocidade, mecanismos de mistura e dissipação de energia por atrito dependem desse regime de escoamento. Para quantificar a perda de carga (queda de pressão) devida ao atrito no escoamento, emprega-se a equação universal de Darcy–Weisbach ([WHITE, 2018](#)).

No regime turbulento, o fator de atrito f depende de Re e da rugosidade relativa ε/D , não possuindo solução analítica explícita; por isso, utilizam-se relações empíricas ou aproximadas. Já no regime laminar ($Re < 2300$), o perfil de velocidades é parabólico e f admite a expressão simples dada pela Equação 4.2:

$$f = \frac{64}{Re} \quad (4.2)$$

Em serviços de água a escoamento turbulento, a fórmula empírica de Hazen–Williams é comumente empregada como aproximação prática ([PERRY; GREEN, 2007](#)). Temperatura e pressão afetam massa específica e viscosidade do fluido, modificando o valor de Re e, consequentemente, as perdas de carga.

Além disso, o material e condições da tubulação (nova, envelhecida) determinam a rugosidade efetiva. Todos esses efeitos impactam diretamente o balanço de energia no escoamento em tubulações e a potência requerida em bombas ou compressores ([PERRY; GREEN, 2007](#); [WHITE, 2018](#)).

Tabela 4 – Unidades e natureza dos grupos de Reynolds e fator de atrito

Símbolo	Unidade ou natureza
Re	Número de Reynolds adimensional.
f	Fator de atrito de Darcy adimensional.
D	Diâmetro da tubulação em unidade de comprimento, por exemplo m.
ρ	Massa específica, por exemplo kg/m ³ .
V	Velocidade média, por exemplo m/s.
μ	Viscosidade dinâmica, por exemplo Pa s.
ν	Viscosidade cinemática, por exemplo m ² /s.
ε	Rugosidade absoluta na mesma unidade de comprimento usada para D .
ε/D	Rugosidade relativa adimensional.

4.1.1.6 Número de Reynolds

O número de Reynolds (Re) relaciona as forças inerciais com as forças viscosas no escoamento dentro de uma tubulação:

Usando viscosidade dinâmica μ :

$$Re = \frac{D \cdot V \cdot \rho}{\mu} \quad (4.3)$$

Usando viscosidade cinemática ν :

$$Re = \frac{D \cdot V}{\nu} \quad (4.4)$$

Com esses símbolos padronizados, tipicamente $Re < 2300$ indica regime laminar, $2300 < Re < 4000$ indica regime de transição, e $Re > 4000$ indica regime turbulento plenamente desenvolvido (WHITE, 2018).

Fluxo de cálculo do número de Reynolds.

```

receber diâmetro característico e velocidade
selecionar viscosidade dinâmica com massa específica
ou viscosidade cinemática
converter grandezas para unidades coerentes
calcular Re = D * V * rho / mu ou Re = D * V / nu
classificar regime e retornar número de Reynolds positivo

```

4.1.1.7 Fator de Atrito

No regime laminar, o fator de atrito de Darcy pode ser obtido diretamente por $f = 64/Re$. No regime turbulento, f satisfaz implicitamente a equação de Colebrook–White (COLEBROOK, 1939):

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log_{10} \left(\frac{\varepsilon}{3,7D_h} + \frac{2,51}{Re\sqrt{f}} \right) \quad (4.5)$$

A rugosidade relativa captura o efeito da parede no regime turbulento. Para evitar a resolução iterativa, existem correlações explícitas aproximadas amplamente usadas, por exemplo:

Swamee–Jain (SWAMEE; JAIN, 1976):

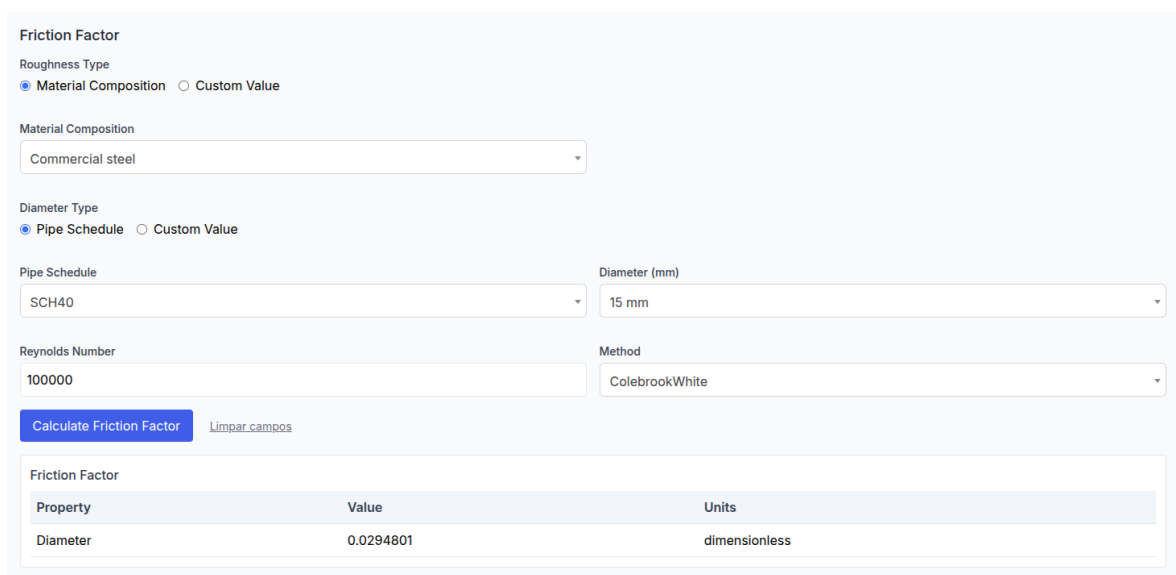
$$f = \frac{0,25}{\left[\log_{10} \left(\frac{\varepsilon}{3,7D} + \frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right]^2} \quad (4.6)$$

Haaland (HAALAND, 1983):

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -1,8 \log_{10} \left[\left(\frac{\varepsilon/D}{3,7} \right)^{1,11} + \frac{6,9}{Re} \right] \quad (4.7)$$

O *software* implementa as equações acima para cálculo de f conforme o regime e dados disponíveis (WHITE, 2018). A interface para a obtenção do fator de atrito e as opções disponibilizadas ao usuário estão exibidas na Figura 1.

Figura 1 – Interface de cálculo do fator de atrito



Friction Factor

Roughness Type
☒ Material Composition ☐ Custom Value

Material Composition
 Commercial steel

Diameter Type
☒ Pipe Schedule ☐ Custom Value

Pipe Schedule
 SCH40

Diameter (mm)
 15 mm

Reynolds Number
 100000

Method
 ColebrookWhite

[Calculate Friction Factor](#) [Limpar campos](#)

Property	Value	Units
Friction Factor	0.0294801	dimensionless

Fonte: Elaboração própria (2026).

Fluxo de cálculo do fator de atrito.

```

receber rugosidade, diâmetro, Reynolds e método
calcular rugosidade relativa
se método = ColebrookWhite, resolver a equação implicitamente
se método = SwameeJain ou Haaland, aplicar a correlação explícita
retornar fator de atrito adimensional ou erro de convergência
  
```

4.1.1.8 Perda de Carga – Darcy–Weisbach e Hazen–Williams

A perda de carga distribuída h_f em uma tubulação de comprimento L é calculada pela equação de Darcy–Weisbach:

$$h_f = f \cdot \frac{(L + \sum L_{eq}) V^2}{D \cdot 2g} \quad (4.8)$$

Na Equação 4.8, h_f , L , $\sum L_{eq}$ e D usam unidades de comprimento coerentes; V é velocidade, por exemplo m/s; g é aceleração, por exemplo m/s²; e f é adimensional. O resultado de h_f é uma altura de perda de carga, usualmente expressa em m. Essa fórmula é universal e independe do fluido, desde que f seja adequadamente determinado (PERRY; GREEN, 2007).

Para escoamento de água em tubulações de diâmetro moderado (tipicamente $D > 50$ mm) e regime turbulento plenamente estabelecido, a fórmula empírica de Hazen–Williams pode ser empregada como simplificação:

$$h_f = \frac{10,646L}{C^{1,852} D^{4,87}} Q^{1,852} \quad (4.9)$$

Na forma exibida, o coeficiente empírico 10,646 corresponde à convenção no SI usual da correlação; portanto, as unidades devem seguir a convenção associada ao coeficiente, com h_f e L em m, Q em m³/s e D em m. C é o coeficiente de Hazen–Williams do material, tratado como adimensional e tabelado para tubulações novas de ferro fundido, aço, PVC etc. Apesar de não possuir fundamentação teórica geral, essa equação fornece boa precisão para água a 20 °C em tubulações de transporte e é consagrada no projeto de redes de água devido à sua simplicidade (PERRY; GREEN, 2007; WHITE, 2018).

Fluxo de cálculo da perda de carga.

```
receber método, geometria, vazão ou velocidade e propriedades da tubulação
resolver a velocidade ou a vazão faltante quando necessário
somar comprimento reto e comprimentos equivalentes
aplicar Darcy-Weisbach ou Hazen-Williams
retornar perda de carga em metros e validar sinal e faixa de aplicação
```

4.1.1.9 Diâmetro Hidráulico para Geometrias Diversas

O conceito de diâmetro hidráulico generaliza o cálculo do número de Reynolds e do fator de atrito para seções transversais não circulares. O diâmetro hidráulico é definido como:

$$D_h = \frac{4A}{P} \quad (4.10)$$

onde A é a área da seção transversal de escoamento e P o perímetro molhado (contorno em contato com o fluido). Assim:

Para dutos circulares, conforme a Equação 4.11:

$$D_h = D \quad (4.11)$$

(recupera o diâmetro interno). Para canais ou abertos, conforme a Equação 4.12:

$$D_h = \frac{4ab}{2(a+b)} \quad (4.12)$$

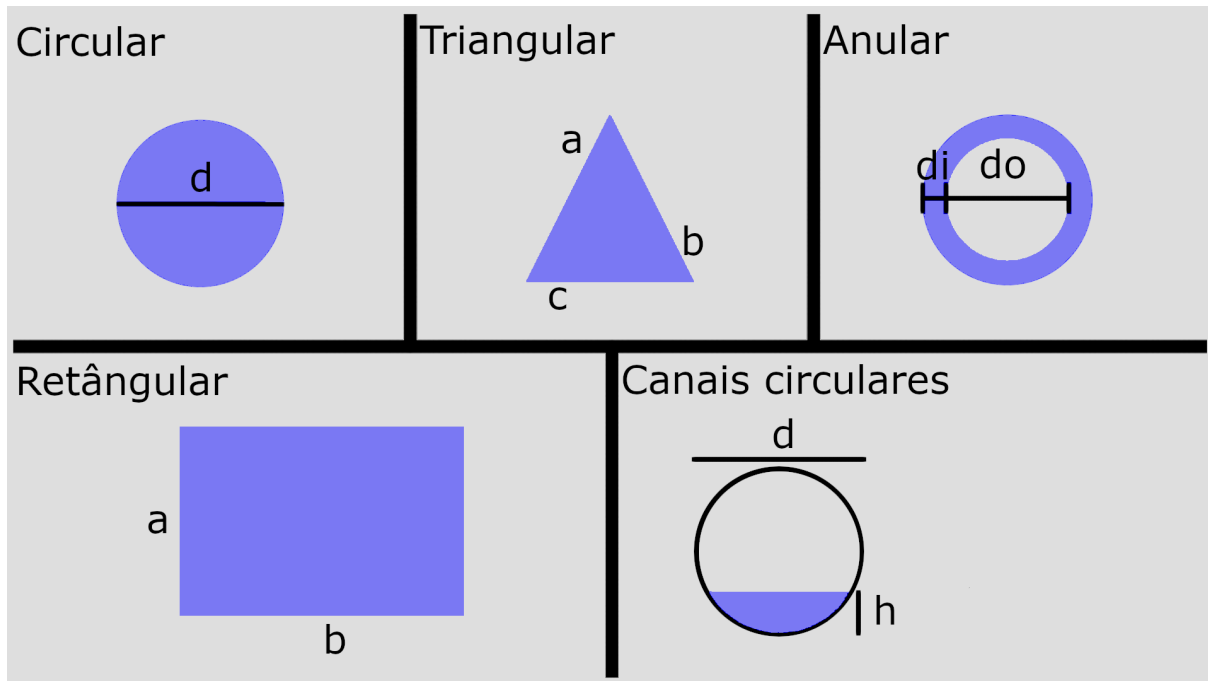
onde a e b são os lados do retângulo. Para anulares (espaço entre dois tubos concêntricos), conforme a Equação 4.13:

$$D_h = D_o - D_i \quad (4.13)$$

(diferença entre diâmetro externo interno e diâmetro externo do interno). Para seções triangulares (por ex., condutos abertos triangulares), calcula-se A e P conforme a geometria e aplica-se $4A/P$. Para geometrias mais complexas (ex.: calhas semicirculares), também se aplica $4A/P$ considerando o perímetro molhado adequadamente.

Nas Equações 4.10 a 4.13, D_h , D , D_o , D_i , a , b e o perímetro molhado P (ou P_m) usam a mesma unidade de comprimento; A usa a unidade de área correspondente; e cada fórmula retorna D_h nessa unidade de comprimento.

Figura 2 – Tipos de dutos de escoamento



Fonte: Elaboração própria (2026).

O programa permite ao usuário informar A e P para cálculo de D_h em situações especiais, garantindo flexibilidade para tratar geometrias arbitrárias (WHITE, 2018).

Fluxo de cálculo do diâmetro hidráulico.

receber geometria e dimensões específicas da seção
 calcular área e perímetro molhado conforme a geometria
 aplicar $D_h = 4 * \text{área} / \text{perímetro}$
 validar dimensões, desigualdade triangular ou altura do segmento
 retornar diâmetro hidráulico na unidade de entrada

4.1.2 Bombas

4.1.2.1 Altura Manométrica entre Dois Pontos

A forma estendida da equação de Bernoulli é utilizada para avaliar as variações de carga (energia por unidade de peso do fluido) entre dois pontos de uma tubulação, incluindo perdas:

$$H = \frac{P_2 - P_1}{\rho g} + \frac{V_2^2 - V_1^2}{2g} + z_2 - z_1 + h_f \quad (4.14)$$

Em que H é a altura manométrica adicionada (se positiva) ou removida (se negativa) entre os pontos 1 e 2. Todos os termos da Equação 4.14 são expressos como carga hidráulica em metros: as pressões P_1 e P_2 usam unidades coerentes com ρ e g no termo $\frac{P_2 - P_1}{\rho g}$; as velocidades V_1 e V_2 entram em m/s; as cotas z_1 e z_2 são dadas em m; e h_f reúne as perdas distribuídas e localizadas em m. Com essa convenção, perdas positivas aumentam a altura requerida pela bomba (WHITE, 2018).

Essa equação é fundamental para avaliar a necessidade de bombeamento: uma bomba deve fornecer uma H suficiente para superar as perdas e elevar o fluido da condição 1 até 2; inversamente, uma turbomáquina geradora extrairá essa energia do fluido.

Tabela 5 – Etapas do cálculo da altura manométrica

Etapa	Descrição
Entradas	Pressões, cotas, velocidades, massa específica e perda de carga entre os pontos 1 e 2.
Processamento	Converte os termos em carga hidráulica e soma as parcelas de pressão, velocidade, cota e perdas.
Saída	Altura manométrica H em metros.
Validação	Exige os campos numéricos necessários e mantém unidades coerentes entre os termos.

Fonte: Autoria própria.

4.1.2.2 NPSH Disponível

Para evitar cavitação em bombas, calcula-se o $NPSH$ disponível na sucção, que deve exceder o $NPSH$ requerido pelo fabricante. A expressão para o $NPSH$ disponível, em termos de altura de líquido, é:

$$NPSH_{disp} = \frac{P_{suc} + P_{atm} - p_{vap}}{\rho g} + \frac{V_{suc}^2}{2g} + (z_{suc} - z_0) - h_{suc} \quad (4.15)$$

O resultado da Equação 4.15 é expresso em metros de coluna do líquido bombeado. As pressões P_{suc} , P_{atm} e p_{vap} devem ser coerentes entre si e com ρg ; ρ é massa específica, por exemplo kg/m^3 ; V_{suc} é velocidade em m/s ; z_{suc} e z_0 são cotas em m ; e h_{suc} representa as perdas na linha de sucção em m (PERRY; GREEN, 2007).

O cálculo de $NPSH$ disponível permite verificar se há margem de segurança sobre o $NPSH$ requerido da bomba (fornecido pelo fabricante para aquela vazão), garantindo que o líquido não vaporize na entrada da bomba – o que causaria cavitação, danos e redução de desempenho.

Tabela 6 – Etapas do cálculo do $NPSH$ disponível

Etapa	Descrição
Entradas	Pressões manométrica, atmosférica e de vapor, massa específica, velocidade na sucção, cota e perda de carga.
Processamento	Converte pressões para uma base comum e combina os termos de pressão, velocidade, elevação e perdas da sucção.
Saída	$NPSH$ disponível em metros de coluna do líquido.
Validação	Requer entradas numéricas e permite comparar o resultado com o $NPSH$ requerido pelo fabricante.

Fonte: Autoria própria.

4.1.3 Propriedades Termofísicas

Propriedades termofísicas – como massa específica, viscosidade, calor específico, condutividade térmica, entalpia e entropia – são insumos essenciais em praticamente todos os cálculos de processos. Em misturas, a predição de propriedades requer modelos mais complexos do que simples somas ponderadas, considerando interações moleculares e desvios da idealidade. Tais propriedades alimentam balanços de massa e energia, o dimensionamento térmico de trocadores, o cálculo de Reynolds e de fatores de atrito, o desempenho de separações, entre outros. Temperatura e pressão são variáveis determinantes: utilizam-se correlações empíricas (por exemplo, equação de Antoine para pressão de vapor) ou equações de estado (gás ideal, Peng-Robinson, SRK) conforme o sistema. Erros na estimativa de viscosidade ou massa específica afetam o cálculo de Reynolds, fator de atrito e potência de bombeamento; imprecisões em calores específicos ou entalpias propagam-se em balanços de energia e projeto de utilidades.

Tabela 7 – Fluxo de obtenção de propriedades termofísicas

Etapa	Descrição
Entradas	Fluido, propriedade solicitada, temperatura em K e pressão em Pa; para propriedades críticas, apenas o fluido.
Processamento	Consulta <i>CoolProp</i> , trata propriedades de saturação e associa unidades SI por meio do <i>Pint</i> .
Saída	Propriedade solicitada ou conjunto de propriedades, incluindo propriedades críticas quando aplicável.
Validação	Confere a existência do fluido e comunica falhas de consulta ou propriedades indisponíveis.

Fonte: Autoria própria.

No *software* desenvolvido, um módulo de propriedades utiliza a biblioteca *CoolProp* para recuperar propriedades de fluidos puros (e misturas) a partir de dados de entrada de T e P . São obtidas propriedades como massa específica (ρ), viscosidade, calor específico (c_p e c_v), condutividade térmica, entalpia, entropia, massa molar e tensão superficial, além de propriedades críticas e pontos de saturação (bolha/orvalho) quando aplicável. A visualização desse cálculo de propriedades, com foco no resultado para uma mistura, é apresentada na Figura 3.

Figura 3 – Interface de cálculo para as propriedades de uma mistura

Mixture Properties

Temperature (K): 300 Pressure (Pa): 101325

Fluid Fractions

Fluid	Fraction
Water	0,5
Methanol	0,5

Properties to Calculate

☒ Density ☒ Specific heat

Leave empty to calculate all available properties

Calculate Mixture Properties

Mixture Properties

Fluid Composition: Water: 0.5 Methanol: 0.5

Property	Value	Units
Density	753.601	kilogram / meter ** 3
Specific Heat	3474.14	joule / kelvin / kilogram

Fonte: Elaboração própria (2026).

Para misturas, a *API* do *CoolProp* permite montar *strings* com o padrão abaixo, usando as frações especificadas para cada componente (BELL et al., 2014):

```
HEOS::Comp1[x1]&Comp2[x2]&...
```

Todas as grandezas retornam já associadas a unidades do SI (via integração com a biblioteca *Pint*), garantindo consistência nos cálculos.

Tabela 8 – Fluxo de obtenção de propriedades de misturas

Etapa	Descrição
Entradas	Frações dos componentes, temperatura, pressão e, opcionalmente, a lista de propriedades.
Preparação	Verifica os componentes, confere se as frações somam aproximadamente uma unidade e monta a representação da mistura.
Processamento	Consulta as propriedades selecionadas na <i>API</i> do <i>CoolProp</i> usando a composição informada.
Saída e validação	Retorna um conjunto de propriedades com unidades SI e rejeita componentes desconhecidos ou frações incompatíveis.

Fonte: Autoria própria.

O uso de uma biblioteca de propriedades de qualidade referência como o *CoolProp* assegura que o *software* tenha um *backend* termodinâmico rigoroso e abrangente, reforçando o caráter didático ao permitir explorar diferentes cenários com fidelidade física.

4.1.4 Reatores

Reatores são equipamentos projetados para promover reações químicas, convertendo reagentes em produtos sob condições controladas de operação.

Modelos ideais como *CSTR*, *PFR* e batelada fornecem limites úteis para projeto e análise de desempenho. As variáveis centrais envolvidas no projeto de reatores incluem conversão dos reagentes, seletividade e rendimento (em caso de múltiplas reações), velocidade de reação, tempo de residência, volume do reator e condições de operação (temperatura, pressão). Industrialmente, o correto dimensionamento de reatores afeta diretamente a capacidade produtiva, a qualidade do produto e a segurança, especialmente no controle de remoção de calor em reações exotérmicas. A cinética química depende fortemente da temperatura (lei de Arrhenius) e da forma funcional da taxa de reação (ordem de reação, efeitos de inibição, presença de inertes, variação volumétrica em fase gasosa etc.). Erros na previsão de conversão ou no cálculo do volume reacional podem levar a baixa seletividade, formação de pontos quentes (*hot spots*) e riscos operacionais. A base teórica conjuga balanços de massa por componente com leis cinéticas apropriadas, integradas no espaço (*PFR*) ou no tempo de residência (*CSTR*), podendo incluir balanço de energia quando o regime térmico é relevante (FOGLER, 2009; LEVENSPIEL, 2000).

No escopo deste projeto, são considerados reatores isotérmicos e monofásicos (todos os reagentes e produtos em uma única fase, líquida ou gasosa). O código rejeita misturas de componentes em estados físicos diferentes, a fim de garantir a validade dos balanços e do coeficiente de variação volumétrica utilizado para o estado atual dos módulos de cálculo para reatores.

A Tabela 9 padroniza a leitura dimensional das Equações 4.16 a 4.20. Assim, os parágrafos seguintes se concentram no papel físico de cada relação.

Tabela 9 – Unidades e natureza dos símbolos nas relações estequiométricas e cinéticas de reatores

Símbolo	Unidade ou natureza
N_{i0}	Vazão molar, por exemplo mol/s.
$\nu_i, \nu_A, \nu_P, \nu_R$	Coefficientes estequiométricos adimensionais.
C_i, C_{i0}, C_{A0}	Concentração molar, por exemplo mol/m ³ .
X	Conversão adimensional.
y_{A0}	Fração molar adimensional do reagente limitante na alimentação.
ε	Coefficiente de variação volumétrica adimensional.
ψ	Fator de diluição adimensional.
P, P_0	Pressões em unidades coerentes entre si, usadas apenas na razão P_0/P .
T, T_0	Temperaturas absolutas em K, usadas apenas na razão T/T_0 .
r ou $-r_A$	Taxa molar de reação por volume de reator, por exemplo mol/(m ³ s).
k	Constante cinética com unidades definidas pela ordem global da reação.

Algumas lógicas gerais se aplicam a todos os tipos de reatores implementados. Por exemplo, a determinação do reagente limitante identifica o reagente cuja disponibilidade inicial por unidade estequiométrica é a menor entre os reagentes presentes. Em termos de cálculo, percorrem-se apenas os reagentes (coeficientes estequiométricos negativos), calculando conforme a Equação 4.16:

$$\text{razao}_i = \frac{N_{i0}}{|\nu_i|} \quad (4.16)$$

O quociente compara a disponibilidade molar de cada reagente por unidade estequiométrica. O valor absoluto $|\nu_i|$ evita a inversão de sinal causada pela convenção negativa dos reagentes; o reagente com menor valor de razao_i é o limitante (FELDER; ROUSSEAU, 2005).

Pseudocódigo da preparação estequiométrica do reator.

```

identificar reagentes com coeficiente estequiometrico negativo
calcular disponibilidade molar normalizada de cada reagente
selecionar o menor valor normalizado como reagente limitante
calcular fator de diluicao a partir de conversao, pressao e temperatura
atualizar concentracoes de saida por estequiometria
calcular velocidade de reacao pela lei cinetica informada

```

A velocidade de reação é modelada, em geral, por uma lei de potência do tipo:

$$r = k \cdot \prod C_i^{m_i} \quad (4.17)$$

A Equação 4.17 representa uma lei de potência: cada concentração entra elevada à sua ordem de velocidade, e k assume a unidade necessária para que o produto resulte em taxa volumétrica de reação.

A integração da cinética com a estequiometria é feita via conversão X do reagente limitante. Os balanços estequiométricos relacionam as concentrações de saída de cada componente à conversão X . Para cada componente i na reação, tem-se a seguinte relação geral: o termo estequiométrico é positivo para formação (produtos), negativo para consumo (reagentes) e nulo para inertes.

$$C_i = \frac{C_{i0} + \left(\frac{\nu_i}{|\nu_A|} \cdot C_{A0} \cdot X \right)}{\psi} \quad (4.18)$$

A Equação 4.18 ajusta a concentração de cada componente pela conversão do reagente limitante. O numerador representa consumo ou formação estequiométrica, enquanto o denominador aplica a diluição total do meio.

Para determinação do coeficiente de variação volumétrica para reações gasosas, a Equação 4.19 deve ser utilizada.

$$\varepsilon = y_{A0} \cdot \frac{\sum_{\nu_i > 0} \nu_i - \sum_{\nu_i < 0} |\nu_i|}{|\nu_A|} \quad (4.19)$$

O numerador compara a quantidade estequiométrica formada e consumida na fase gasosa, normalizada pelo reagente limitante. O sinal de ε indica expansão ou contração molar associada à reação.

$$\psi = (1 + \varepsilon X) \frac{P_0}{P} \frac{T}{T_0} \quad (4.20)$$

Onde ε representa a variação volumétrica ou molar por mol de A reagido, podendo indicar expansão ou contração conforme a estequiometria e a fase gasosa. O fator ψ agrega a variação volumétrica estequiométrica (via εX) e as correções de pressão e temperatura em relação às condições iniciais (LEVENSPIEL, 2000). Essas relações estequiométricas permitem calcular as concentrações de saída de todos os componentes a partir da conversão X do reagente limitante, sendo a base para os balanços nos diferentes modelos de reatores.

4.1.4.1 Reator do Tipo *CSTR*

O reator do tipo *CSTR* é um tanque agitado operando em regime contínuo. Assume-se mistura completa no interior do tanque (composição uniforme em todo o volume). A conversão é desenvolvida integralmente dentro do volume do reator, dependendo do balanço entre a cinética de reação e o tempo de residência dos reagentes no tanque.

No sistema implementado, são suportados três casos de uso: (i) conversão desejada e cinética conhecidas (calcula-se o volume do reator necessário), (ii) volume disponível e cinética conhecidas (calcula-se a conversão atingida) e (iii) tempo de residência e cinética

conhecidos (calcula-se a conversão atingida). As saídas calculadas pelo algoritmo incluem, entre outros: conversão do reagente limitante X , vazão molar do reagente limitante na entrada F_{A0} , vazão volumétrica total na saída Q_T , volume do reator V , taxa de reação r no interior, concentrações de saída $C_{i,\text{saída}}$, fator de diluição ψ , coeficiente de variação volumétrica ε e tempo de residência τ .

A Tabela 10 resume as unidades locais da sequência de cálculo do *CSTR*; essas definições valem para as Equações 4.21 a 4.27.

Tabela 10 – Unidades e natureza dos símbolos na sequência de cálculo do *CSTR*

Símbolo	Unidade ou natureza
N_{i0}, F_{A0}	Vazão molar, por exemplo mol/s.
Q_i, Q_T	Vazão volumétrica, por exemplo m ³ /s.
C_{i0}, C_{i0e}	Concentração molar, por exemplo mol/m ³ .
V	Volume do reator, por exemplo m ³ .
X	Conversão adimensional.
$-r_A$	Taxa molar de reação por volume de reator, por exemplo mol/(m ³ s).
τ	Tempo de residência, por exemplo s.
$f(X)$ em 4.26	Resíduo objetivo: diferença numérica entre conversões adimensionais.

4.1.4.1.1 Conversão e Cinética (Cálculo do Volume)

Passos principais do cálculo:

- Identificação do reagente limitante (conforme descrito anteriormente);
- Cálculo das vazões molares de entrada pela Equação 4.21:

$$N_{i0} = Q_i \cdot C_{i0e} \quad (4.21)$$

para cada componente, bem como da vazão volumétrica total pela Equação 4.22:

$$Q_T = \sum Q_i \quad (4.22)$$

As concentrações iniciais (após mistura das correntes de alimentação) são dadas pela Equação 4.23:

$$C_{i0} = \frac{N_{i0}}{Q_T} \quad (4.23)$$

- Cálculo do fator de diluição total ψ com a conversão alvo X (Equação 4.20);
- Cálculo da taxa de reação r a partir da constante cinética k e das concentrações na saída (considerando X), supondo regime isotérmico (FOGLER, 2009);
- Aplicação do balanço no *CSTR* para o reagente limitante.

Para conversão X conhecida, a equação de *design* é dada por:

$$V = \frac{F_{A0} \cdot X}{-r_A} \quad (4.24)$$

Nessa expressão, o produto $F_{A0}X$ representa a vazão molar convertida do reagente limitante, e a divisão pela taxa de consumo volumétrica fornece o volume requerido do tanque.

Cálculo do tempo de residência:

$$\tau = \frac{V}{Q_T} \quad (4.25)$$

A fim de simplificar as rotinas, utiliza-se a função `_initialize_reactor()`, que calcula as concentrações e vazões de cada componente na entrada, bem como o coeficiente de variação volumétrica ou molar, o fator de diluição, as temperaturas e pressões iniciais e finais e o reagente limitante.

4.1.4.1.2 Volume e Cinética (Cálculo da Conversão)

Nesse caso, são conhecidos o volume do reator V e a cinética (expressão da taxa $r(C_i)$, incluindo k). Deseja-se determinar a conversão X atingida no *CSTR*. Isolando X na equação de *design* do *CSTR* obtém-se uma equação implícita. Define-se então uma função objetivo:

$$f(x) = \frac{|v_A| \cdot r_A \cdot V}{F_{A0}} - X \quad (4.26)$$

Então encontra-se sua raiz na faixa $0 < X < 1$, tipicamente utilizando o método de Brent, dada a monotonicidade esperada de $f(x)$. A raiz X que satisfaz $f(x) = 0$ corresponde à conversão no reator.

4.1.4.1.3 Tempo de Residência e Cinética

Conhecido o tempo de residência τ , calcula-se inicialmente pela Equação 4.27:

$$V = Q_T \cdot \tau \quad (4.27)$$

Em seguida, o problema se reduz ao caso anterior: aplica-se a mesma função objetivo $f(X)$ da Equação 4.26 e resolve-se numericamente para X , obtendo a conversão atingida no *CSTR* com tempo de residência τ especificado.

Tabela 11 – Etapas computacionais do modelo *CSTR*

Etapa	Responsabilidade
Inicialização	Normaliza unidades, identifica o reagente limitante e prepara as variáveis de entrada.
Cálculo por conversão	Usa a conversão especificada para obter concentrações, velocidade de reação e volume requerido.
Cálculo por volume	Resolve a conversão compatível com o volume informado.
Cálculo por tempo de residência	Relaciona vazão, volume, tempo de residência e cinética para fechar o estado do reator.

Fonte: Autoria própria.

4.1.4.2 Reator do Tipo *PFR*

Um reator tubular é caracterizado por escoamento pistonado, sem mistura axial significativa: cada elemento de fluido que entra percorre o reator, evoluindo em conversão conforme o comprimento.

Para uma conversão alvo X , o volume requerido de um *PFR* ideal é dado pela integração da equação de *design* diferencial ao longo da conversão (LEVENSPIEL, 2000). Matematicamente:

$$V = (R + 1) \cdot F_{A0} \cdot \int_{\frac{R}{R+1}X}^X \frac{dX}{-r_A} \quad (4.28)$$

A Tabela 12 padroniza a leitura dimensional da Equação 4.28; o texto seguinte interpreta os termos sem repetir a lista de unidades.

Tabela 12 – Unidades e natureza dos símbolos no dimensionamento do *PFR*

Símbolo	Unidade ou natureza
V	Volume do reator, por exemplo m^3 .
F_{A0}	Vazão molar do reagente limitante na alimentação fresca, por exemplo mol/s .
X, R	Conversão e razão de reciclo adimensionais.
$-r_A$	Taxa molar de reação por volume de reator, por exemplo $\text{mol}/(\text{m}^3 \text{s})$, quando a equação é escrita em base molar.

O termo R representa a razão de reciclo ou recirculação, definida como vazão reciclada dividida pela vazão fresca de alimentação. Assim, $(R + 1)$ acomoda o aumento da vazão que atravessa o reator na integração. No código, essa integral é avaliada numericamente (por exemplo, via `scipy.integrate.quad`). Para o caso inverso, em que V é conhecido e se busca X , utiliza-se novamente um procedimento iterativo (método de Brent) aplicando a equação de *design* diferencial até encontrar a conversão cujo volume calculado corresponda ao especificado (FOGLER, 2009).

A representação gráfica dessa relação é apresentada pelos perfis de *Levenspiel* do *software*, que permitem interpretar a área associada ao volume requerido e comparar *CSTR* e *PFR*.

Considerando a similaridade estrutural e semântica com as rotinas de cálculo do *CSTR*, destaca-se a diferença na função objetivo usada para o cálculo de volume, apresentada no pseudocódigo a seguir.

Pseudocódigo da integração do *PFR*.

```
definir conversao inicial e conversao alvo
para cada ponto de integracao:
    calcular concentracoes pela estequiometria
    calcular velocidade de reacao no ponto
    integrar  $dV/dX = F_{AO} / (-r_A)$ 
retornar volume acumulado, perfil de conversao e estados intermediarios
```

4.1.5 Balanço de Massa

O balanço de massa aplica o princípio da conservação da massa a sistemas de processo: em regime estacionário, a massa que entra em um sistema deve ser igual à massa que sai, ajustada pela geração ou consumo devido a reações químicas (FELDER; ROUSSEAU, 2005). Para cada componente, a quantidade produzida ou consumida deve ser contabilizada segundo a estequiometria.

A Tabela 13 resume a base dimensional comum das Equações 4.29 a 4.33. A mesma base deve ser mantida dentro de cada balanço.

Tabela 13 – Unidades e natureza dos termos no balanço de massa com reciclo

Símbolo ou termo	Unidade ou natureza
Acúmulo, entradas, saídas, geração e consumo	Mesma base escolhida para o balanço por tempo, como kg/s ou mol/s.
$\dot{m}$	Vazão mássica, por exemplo kg/s.
F_R, F_G, F_P	Vazões na mesma base selecionada para o balanço: molar, mássica ou volumétrica.
f	Fração de reciclo ou purga adimensional.

$$\text{Acúmulo} = \text{Entradas} - \text{Saídas} + \text{Geração} - \text{Consumo} \quad (4.29)$$

No estado estacionário sem reação, o acúmulo é zero, de modo que:

$$\sum \dot{m}_{\text{entrada}} = \sum \dot{m}_{\text{saída}} \quad (4.30)$$

Por componente i , incluindo reação química:

$$\sum (\dot{m}_{\text{entrada},i} + \dot{m}_{\text{geracao},i}) = \sum (\dot{m}_{\text{saida},i} + \dot{m}_{\text{consumo},i}) \quad (4.31)$$

Em problemas industriais, frequentemente há reciclo e purgas envolvidos nos balanços. Nesses casos, para divisores de fluxo (*splitters*), define-se por exemplo:

$$F_R = f \cdot F_P \quad (4.32)$$

$$F_G = (1 - f) \cdot F_P \quad (4.33)$$

Esses parâmetros permitem fechar balanços em sistemas com recirculação e calcular a acumulação de inertes ou subprodutos. Na Figura 4, é apresentado o resultado gerado pelo *software* para um balanço de massa contendo reciclo e reação.

Figura 4 – Resultados do balanço de massa com reciclo e reação

Mass Balance Results				
Flow rates are in consistent units throughout. Compositions are mass fractions (when using mass flow units) or molar fractions (when using molar flow units).				
Process Metrics - Fresh Feed: 100.00 (mass or mol)/time - Product Flow: 50.00 (mass or mol)/time - Recycle Ratio: 0.75				
Fresh_Feed Flow Rate: 100.00 (mass or mol)/time Compositions (mass or molar fractions): A: 0.8000 B: 0.2000 C: 0.0000 D: 0.0000				
Reactor_Out Flow Rate: 125.00 (mass or mol)/time Compositions (mass or molar fractions): A: 0.1574 B: 0.0183 C: 0.6426 D: 0.1817				
Recycle Flow Rate: 75.00 (mass or mol)/time Compositions (mass or molar fractions): A: 0.1574 B: 0.0183 C: 0.6426 D: 0.1817				
Product Flow Rate: 50.00 (mass or mol)/time Compositions (mass or molar fractions): A: 0.1574 B: 0.0183 C: 0.6426 D: 0.1817				

Fonte: Elaboração própria (2026).

O balanço de massa fundamenta o dimensionamento de equipamentos como misturadores, separadores, reatores e redes de processo, além de embasar análises econômicas (minimizando perdas de matérias-primas) e de segurança (evitando acúmulo indesejado de compostos). Vale notar que temperatura e pressão influenciam o balanço apenas através de propriedades físicas (massa específica, volumes específicos), ou mudanças de fase que afetem as vazões mássicas e molares de cada corrente (FELDER; ROUSSEAU, 2005).

4.2 Desenvolvimento do *Software*

A metodologia adotada combina fundamentos da engenharia química com técnicas modernas de desenvolvimento de *software*, visando garantir precisão nos cálculos e acessibilidade por meio de uma interface *web* intuitiva. O projeto foi estruturado em etapas que abrangem desde o levantamento bibliográfico das equações de dimensionamento até a implementação e validação do sistema completo.

Em termos práticos, o *backend* funciona como a camada de cálculo: ele recebe entradas validadas, executa as rotinas de engenharia e devolve resultados e modelos de visualização. O *frontend*, por sua vez, corresponde à camada de interação com o usuário, responsável por organizar formulários, gráficos, mensagens e navegação. Para fins de organização, o desenvolvimento é descrito a seguir em seus principais eixos técnicos: *backend*, *frontend*, *deploy*, automação de integração e entrega, distribuição *desktop* e versionamento.

4.2.1 *Backend*

O *backend* foi desenvolvido em *Python*, utilizando o *framework* *FastAPI*, escolhido por sua alta *performance*, suporte a tipagem forte e facilidade na criação de *APIs RESTful*. Uma *API* pode ser entendida, neste contexto, como a interface de comunicação entre as calculadoras e outros consumidores: cada *endpoint* é um endereço específico que recebe dados de entrada, executa uma operação definida e devolve uma resposta estruturada. Essa camada é responsável por processar os cálculos, gerenciar essas rotas de comunicação e servir os resultados ao *frontend*. Além disso, por se tratar de uma linguagem de alto nível, sua sintaxe é simples e intuitiva para iniciantes.

A Tabela 14 resume as principais bibliotecas e *frameworks* utilizados, sua funcionalidade e a correspondência com aplicações típicas da engenharia química.

Tabela 14 – Bibliotecas e *frameworks* utilizados no *backend*

Nome	Funcionalidade	Como se enquadra no uso da Engenharia Química
<i>FastAPI</i>	<i>Framework web</i> moderno para criação de <i>APIs RESTful</i> em <i>Python</i> , com validação automática de dados e documentação interativa.	<i>Backend</i> para expor os cálculos de engenharia química através de <i>endpoints</i> HTTP, permitindo que a interface <i>web</i> ou outros sistemas acessem as funções de dimensionamento, balanço de massa, cálculos de reatores etc.

(Continua na próxima página)

Tabela 14 – Bibliotecas e *frameworks* utilizados no *backend* (continuação)

Nome	Funcionalidade	Como se enquadra no uso da Engenharia Química
<i>Uvicorn</i>	Servidor <i>ASGI</i> para executar aplicações <i>web</i> assíncronas em <i>Python</i> .	Executa o servidor da <i>API FastAPI</i> , processando as requisições dos cálculos.
<i>Pydantic</i>	Biblioteca para validação de dados e gerenciamento de configurações usando <i>Python type hints</i> .	Valida os dados de entrada dos cálculos (vazões, temperaturas, pressões, propriedades físicas etc.), garantindo que os parâmetros fornecidos estejam no formato e tipo corretos antes de executar os cálculos.
<i>CoolProp</i>	Biblioteca especializada em propriedades termodinâmicas de fluidos, com banco de dados extenso de substâncias.	Cálculo de propriedades termodinâmicas (massa específica, viscosidade, entalpia, entropia, calor específico etc.) de compostos e misturas.
<i>Pint</i>	Gerenciamento de unidades físicas, conversões e cálculos dimensionais	Permite trabalhar com diferentes sistemas de unidades, garantindo consistência dimensional nos cálculos.
<i>Matplotlib</i>	Biblioteca de visualização de dados e criação de gráficos 2D/3D.	Gera gráficos de processos químicos como curvas associadas a modelos de reação, perfis de temperatura, diagramas de fases, curvas de bomba, e visualizações de resultados de simulações.
<i>NumPy</i>	Biblioteca fundamental para computação científica com <i>arrays</i> multidimensionais e operações matemáticas vetorizadas	Realiza cálculos matriciais, interpolações, operações vetoriais para balanços de massa e energia, resoluções de sistemas de equações lineares em processos químicos

(Continua na próxima página)

Tabela 14 – Bibliotecas e *frameworks* utilizados no *backend* (continuação)

Nome	Funcionalidade	Como se enquadra no uso da Engenharia Química
<i>SciPy</i>	Conjunto de algoritmos científicos para otimização, integração numérica, álgebra linear, estatística	Resolução de EDOs, otimiza processos químicos, realiza integrações numéricas para cálculos de conversão, ajuste de curvas experimentais
<i>Pytest</i>	<i>Framework</i> de testes, com suporte a testes unitários, testes de integração, <i>fixtures</i> , parametrização e relatórios detalhados.	Permite validar automaticamente a confiabilidade dos cálculos de engenharia química, garantindo que equações, modelos matemáticos e rotinas numéricas estejam corretos e continuem funcionando após alterações no código.

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.2.2 Frontend

O *frontend* corresponde à interface gráfica do usuário, sendo a parte visual e interativa do sistema, acessada diretamente pelo navegador. Ele é responsável por exibir os resultados dos cálculos, receber dados de entrada e enviar as informações ao servidor (*backend*).

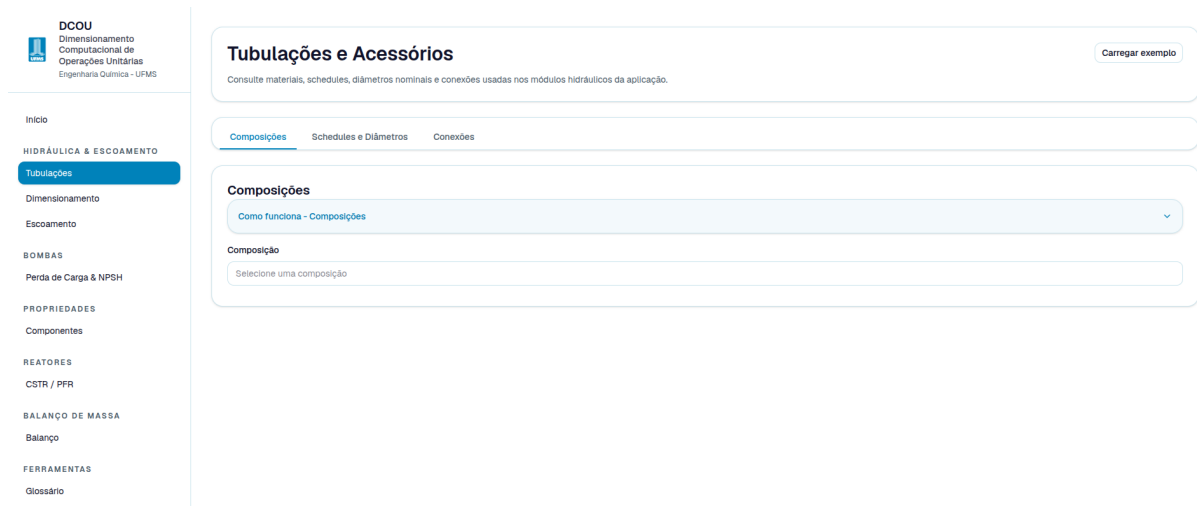
O *frontend* foi desenvolvido com *React*, *TypeScript* e *Vite*, combinação que favorece a composição da interface em componentes reutilizáveis, a tipagem dos contratos entre formulários e serviços e um ciclo de desenvolvimento ágil para compilação e distribuição da aplicação. A camada de navegação é estruturada com *React Router*, o que permite organizar os módulos de tubulações, escoamento, bombas, componentes, reatores, balanço de massa e glossário em rotas aninhadas e previsíveis, sob uma mesma estrutura de aplicação.

Na camada visual, a aplicação utiliza *Tailwind CSS* para estilização utilitária, em conjunto com primitivas acessíveis de *@base-ui/react* e componentes compostos no padrão da biblioteca *shadcn*. Os ícones são fornecidos por *Lucide React*, as notificações rápidas utilizam *Sonner* e a renderização matemática é realizada com *KaTeX*, o que permite exibir expressões em $\text{\LaTeX}$ diretamente no navegador. Para as visualizações, a interface adota predominantemente componentes vetoriais em *SVG* especializados para o contexto de engenharia química, apoiados por uma camada compartilhada de grades, eixos, marcadores, rótulos numéricos e legendas coloridas. Com isso, diagramas como *Moody*, *Levenspiel*,

McCabe-Thiele, envelope de fase, curva de pressão de vapor e mapas de processo podem compartilhar contratos de dados e convenções visuais sem replicar a lógica de apresentação em cada página.

Na organização da experiência, a interface foi concebida como um painel educacional único, com navegação lateral persistente, página inicial orientada por trilhas de aprendizagem e áreas de acesso rápido aos principais módulos. A disposição dos elementos busca explicitar o propósito pedagógico de cada seção, reduzindo a fricção de uso e favorecendo a leitura imediata dos resultados, dos gráficos e dos indicadores de processo. A Figura 5 ilustra a interface de usuário desenvolvida para o módulo de tubulações, evidenciando as escolhas de *design* descritas.

Figura 5 – Interface gráfica do módulo de cálculos de tubulação



Fonte: Elaboração própria (2026).

Tabela 15 – Bibliotecas e *frameworks* utilizados no *frontend*

Nome	Funcionalidade
<i>Vite</i>	Ferramenta de <i>build</i> e ambiente de desenvolvimento utilizada para empacotar a aplicação <i>React</i> , com inicialização rápida e geração otimizada dos arquivos estáticos.
<i>React</i>	Biblioteca declarativa para composição de interfaces em componentes reutilizáveis e encapsulados.
<i>TypeScript</i>	Superset tipado de <i>JavaScript</i> utilizado para formalizar contratos de dados, reduzir erros de integração e melhorar a manutenção.
<i>React Router</i>	Biblioteca de roteamento usada para organizar os módulos do sistema em rotas navegáveis dentro da aplicação <i>web</i> .
<i>Tailwind CSS</i>	<i>Framework</i> utilitário que facilita a criação de interfaces responsivas e personalizadas por meio de classes pré-definidas de estilo.
<i>@base-ui/react</i>	Conjunto de primitivas acessíveis para construção de botões, diálogos, menus e outros controles de interface, sobre as quais são compostos os componentes visuais do sistema.
<i>shadcn</i>	Camada de componentes reaproveitáveis, estilizados com utilitários e composta sobre primitivas acessíveis, empregada para estruturar cartões, botões, painéis e áreas de navegação.
<i>Lucide React</i>	Biblioteca de ícones vetoriais modulares para navegação, estados visuais e ações contextuais na interface.
<i>Sonner</i>	Biblioteca para notificações breves e não bloqueantes associadas às ações do usuário na interface.
<i>KaTeX</i>	Biblioteca <i>JavaScript</i> para renderização rápida de equações em $\text{\LaTeX}$ diretamente no navegador.
<i>Geist Variable</i>	Família tipográfica variável utilizada para padronizar a leitura visual e reforçar a identidade da interface.

Fonte: Elaboração própria (2026).

Além do conjunto principal de tecnologias, a interface utiliza uma camada de componentes visuais próprios para o contexto da Engenharia Química, incluindo cartões de módulo, painéis didáticos, blocos de métricas, indicadores de contexto e visualizações auxiliares para apoiar a interpretação dos fenômenos representados. Essa camada complementa a comunicação com a *API* sem modificar os contratos de dados, ao mesmo tempo em que preserva a consistência visual e a legibilidade dos módulos. O mesmo *frontend* também consome *endpoints* de exemplo, o que permite pré-preencher entradas realistas para módulos como escoamento, dimensionamento, bombas e componentes antes da execução normal dos cálculos no *backend*.

4.2.3 Deploy

O *deploy*, ou publicação da aplicação em um ambiente executável por usuários, foi realizado por meio de *Docker*, tecnologia que permite empacotar a aplicação e suas

dependências em contêineres portáteis e reproduíveis. Essa abordagem elimina problemas de compatibilidade entre ambientes e facilita o uso do *software* em diferentes sistemas operacionais.

Foram criadas imagens separadas para o *backend* e o *frontend*, que podem ser executadas em conjunto ou individualmente. No caso da interface, o processo de empacotamento compila a aplicação com *Vite* e distribui os arquivos gerados por meio de um servidor *Nginx*, preservando a possibilidade de distribuição independente da *API*. O uso do *Docker* também simplifica futuras implementações em servidores remotos e integração com orquestradores, garantindo escalabilidade e isolamento dos serviços. A aplicação encontra-se disponível para acesso público em <<https://tcc.joao.baza.dev.br>> em 13 de julho de 2026.

4.2.4 Integração Contínua e Entrega Contínua

As práticas de *Continuous Integration* (*CI*) e *Continuous Delivery/Continuous Deployment* (*CD*) foram incorporadas ao projeto como mecanismos de apoio à confiabilidade e à rastreabilidade do desenvolvimento. Em termos conceituais, a integração contínua consiste na validação automatizada de alterações submetidas ao repositório, mediante execução recorrente de rotinas como compilação, testes e verificações de empacotamento. Já a entrega contínua corresponde à preparação sistemática de artefatos distribuíveis, de modo que o código validado possa ser convertido em versões aptas para publicação com menor variabilidade operacional.

No repositório do DCOU, essa automação foi estruturada por meio de fluxos em *GitHub Actions*. O fluxo principal de *CI* executa testes do *backend* em *Python*, testes e geração de *build* do *frontend*, verificações *end-to-end* com *Playwright* e uma validação de fumaça da distribuição *desktop*. Complementarmente, há fluxos dedicados à publicação de imagens *Docker* do *backend* e do *frontend* no *GitHub Container Registry*, bem como um fluxo específico para geração e disponibilização de instaladores *desktop* em diferentes sistemas operacionais a partir de versões etiquetadas do projeto.

Sob a perspectiva metodológica, a adoção de *CI/CD* mostra-se particularmente pertinente em um projeto acadêmico de código aberto. Como o DCOU combina um *backend* científico, uma interface reativa em *React/TypeScript*, rotinas de *deploy* e uma frente de empacotamento *desktop*, a automação das verificações reduz o risco de regressões entre camadas distintas e amplia a reproduzibilidade das entregas. Além disso, a existência desses fluxos fortalece a transparência do desenvolvimento colaborativo, pois estabelece critérios objetivos para validação do código e para correspondência entre o estado do repositório e os artefatos efetivamente distribuídos.

4.2.5 Distribuição Desktop Multiplataforma

Além da disponibilização da aplicação em ambiente *web*, foi iniciada uma frente de desenvolvimento orientada à distribuição do DCOU como aplicação *desktop* multiplataforma, isto é, como um programa instalável no computador do usuário, por meio de *Electron*. Essa iniciativa busca ampliar o alcance do sistema sem introduzir uma segunda interface independente, preservando como base a mesma aplicação principal já desenvolvida para o navegador. Nessa abordagem, a camada de apresentação, a navegação e os componentes visuais permanecem centralizados na base do *frontend*, enquanto a adaptação para o ambiente *desktop* concentra-se no empacotamento e na orquestração local dos serviços necessários.

Do ponto de vista técnico, essa estratégia apresenta duas vantagens principais. A primeira é a redução de duplicação estrutural, uma vez que não se torna necessário manter implementações paralelas para *web* e *desktop*. A segunda é o controle da complexidade arquitetural, pois a evolução funcional dos módulos de cálculo, das visualizações e dos fluxos da interface continua concentrada em uma única base de código. No estado atual do projeto, a pasta dedicada ao ambiente *desktop* já contempla configuração de empacotamento com *electron-builder*, scripts de construção do *frontend* e do *backend*, além de testes específicos para o hospedeiro local e para a validação dos artefatos gerados.

Em termos de distribuição, a estrutura adotada permite preparar instaladores para Linux, Windows e macOS, reutilizando o *bundle* compilado do *frontend* e uma versão empacotada do *backend*. Tal direção é coerente com os objetivos gerais do projeto, pois amplia a portabilidade da ferramenta e preserva consistência entre plataformas sem elevar proporcionalmente o custo de manutenção. Desse modo, a frente *desktop* representa uma extensão arquitetural do DCOU, e não uma bifurcação independente de seu desenvolvimento.

4.2.6 Versionamento

O controle de versão foi implementado com o *Git* para rastrear alterações no código-fonte, permitir colaboração e garantir segurança no desenvolvimento. O repositório foi criado no *GitHub* como público, permitindo a colaboração entre diferentes contribuidores. O uso de versionamento também favorece a rastreabilidade científica do projeto, assegurando transparência e reprodutibilidade dos resultados obtidos. O repositório original pode ser acessado em <<https://github.com/joao-baza/TCC>> em 13 de julho de 2026.

4.3 API

Com o objetivo de ampliar os casos de uso da ferramenta desenvolvida, a integração entre as camadas de *frontend* e *backend* é realizada por meio de uma *API* pública. Em termos práticos, a *API* atua como um contrato de comunicação: ela define quais dados

devem ser enviados, qual rotina será executada e como a resposta é devolvida para a interface ou para sistemas externos. Essa abordagem permite que outros programas também consumam as funcionalidades disponibilizadas, favorece a interoperabilidade do *software* e possibilita sua aplicação em diferentes contextos computacionais, como simulações, automações de processos e integração com outras plataformas utilizadas na engenharia química.

Para o consumo da *API*, a documentação encontra-se disponível no *endpoint* `/docs` do *backend*; nesse contexto, um *endpoint* é uma rota específica de acesso a uma funcionalidade, como consultar propriedades, calcular perda de carga ou carregar exemplos. Essa documentação foi desenvolvida utilizando o *framework* *FastAPI*, que possibilita a geração automática e padronizada da interface de documentação por meio da especificação *OpenAPI*, facilitando a compreensão, o teste e a integração dos *endpoints* disponibilizados.

No *frontend*, o consumo dessa mesma *API* é feito por um cliente tipado em *TypeScript*, centralizado em uma camada única de serviços e exposto à interface por meio de chamadas ao caminho `/api`, preservando a mesma origem no ambiente de desenvolvimento e no ambiente publicado. Dessa forma, a interface desenvolvida com *React* e *Vite* mantém a separação entre apresentação e dados, enquanto os módulos de tubulações, escoamento, dimensionamento, bombas, propriedades, reatores e balanço de massa acessam os mesmos *endpoints* sem duplicar regras de negócio.

Um aspecto importante do estado atual do sistema é que a *API* não entrega apenas resultados escalares. Em vários módulos, o *backend* também monta estruturas de dados prontas para visualização, como modelos de gráfico com eixos, séries, marcadores e metadados de unidades. Esse padrão é empregado, por exemplo, no diagrama de *Moody*, nas curvas de perda de carga e altura manométrica, no indicador de margem de *NPSH*, no diagrama de *Levenspiel*, no gráfico de *Arrhenius*, nos perfis espaciais e de reciclo em *PFR*, no diagrama ternário, no diagrama de *McCabe-Thiele*, no envelope de fase, na curva de pressão de vapor e no gráfico nativo do balanço de massa.

Esse desenho arquitetural desloca para o *backend* a responsabilidade por cálculos, amostragem numérica, construção de séries e definição dos pontos operacionais que precisam ser destacados. Ao *frontend* cabe interpretar tais contratos tipados e renderizá-los em componentes *SVG* reutilizáveis, preservando coerência visual entre páginas distintas. O mesmo princípio é adotado nos *endpoints* de exemplo: a *API* fornece entradas de referência coerentes com os catálogos disponíveis, e a interface apenas pré-preenche os formulários e dispara o fluxo normal de cálculo, sem manter resultados estáticos desacoplados das rotinas de cálculo.

4.4 Validação de Cálculos e Especificação de Retornos

Dentre as etapas fundamentais no desenvolvimento de *softwares*, a fase de testagem apresenta papel de grande relevância, uma vez que possibilita a verificação sistemática da conformidade dos resultados obtidos com aqueles previstos teoricamente. No contexto deste trabalho, essa etapa é essencial para garantir a confiabilidade dos cálculos e das rotinas computacionais empregadas em aplicações de Engenharia Química.

Uma abordagem eficiente para a realização desses testes consiste na utilização da biblioteca *pytest*, que permite a implementação de testes automatizados desenvolvidos para assegurar o correto funcionamento dos módulos do sistema. Por meio dessa ferramenta, é possível validar, de forma reprodutível e padronizada, os retornos das funções responsáveis pelos cálculos de propriedades, balanços e demais operações recorrentes da área.

Com o objetivo de detalhar o funcionamento do *software* desenvolvido, as funcionalidades de cada módulo são descritas a seguir, acompanhadas de evidências da interface *frontend* e de instruções para o consumo direto das rotinas por meio da linguagem *Python*, permitindo tanto a utilização via interface gráfica quanto a integração do sistema com outros projetos e aplicações computacionais.

4.4.1 Componentes

Para iniciar a biblioteca local com o módulo de componentes, o código da figura abaixo deve ser inserido, assegurando que o *Python* consiga identificar as funções dentro da classe *Components* contida no arquivo `./models/componentes.py`.

Tendo que o passo a passo para consumir via *API* ou *Python* o projeto seja demasiado técnico, será apenas brevemente comentado abaixo o modo de se fazer, depois havendo maior realce apenas aos retornos e comentários correlatos.

Figura 6 – Inicialização da biblioteca de componentes via *Python*



Fonte: Elaboração própria (2026).

No *frontend*, basta acessar a aba *Components* e rolar a página para visualizar as funcionalidades.

Figura 7 – Inicialização da biblioteca de componentes via *frontend*

DCOU
Dimensionamento
Computacional de
Operações Unitárias
Engenharia Química - UFMS

Início
HIDRÁULICA & ESCOAMENTO
Tubulações
Dimensionamento
E escoamento
BOMBAS
Perda de Carga & NPSH
PROPRIEDADES
Componentes
REATORRES
CSTR / PFR
BALANÇO DE MASSA
Balanço
FERRAMENTAS
Glossário

Propriedades de Componentes
Consulte propriedades críticas, fluidos puros, misturas e equilíbrio binário usando os serviços já expostos pela API.

Sucesso
Exemplo carregado com sucesso.

Propriedades Críticas Fluido Puro Misturas Equilíbrio Binário Envelope de Fase

Propriedades Críticas
Como funciona - Propriedades Críticas
Fluido crítico
Air
Obter propriedades críticas

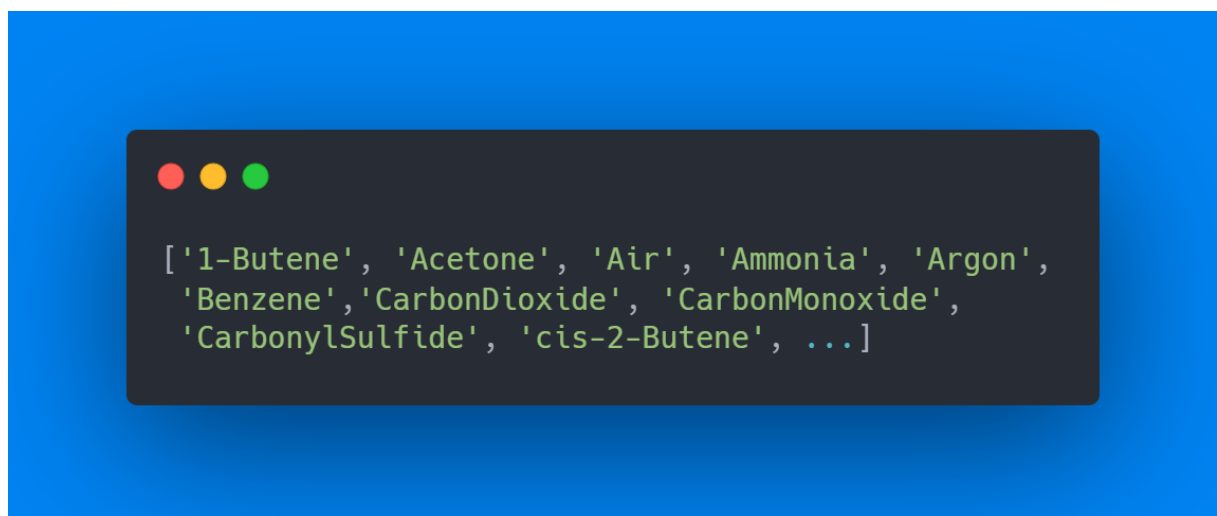
RESULTADO	Valor	Unidade
Propriedade		
Temperatura crítica	132,5306	K
Pressão crítica	$3,786 \times 10^6$	Pa
Massa específica crítica	342,68456	kg/m ³
Temperatura do ponto triplo	59,75	K
Pressão do ponto triplo	5264,18107	Pa

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.1.1 Listar Componentes

A função `list_all_components()` interage diretamente com a biblioteca termodinâmica *CoolProp* para listar todas as substâncias puras e pseudo-puras disponíveis para cálculo. O teste retornou um total de 124 fluidos cadastrados, abrangendo desde hidrocarbonetos simples e refrigerantes até fluidos inorgânicos como água e amônia. Esta listagem valida a capacidade do sistema em operar com uma vasta gama de componentes químicos industriais.

Figura 8 – Listagem parcial de componentes disponíveis na biblioteca termodinâmica



Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.1.2 Valor de Propriedade

Ao solicitar as propriedades termodinâmicas para o componente *Water* (água) nas condições de 300 K e 101325 Pa (1 atm), o sistema retornou valores consistentes com a literatura. A massa específica calculada foi de 996,56 kg/m³ e a viscosidade de $8,54 \cdot 10^{-4}$ Pa · s. Nota-se que o retorno inclui explicitamente as unidades físicas, utilizando a biblioteca *Pint*, garantindo a consistência dimensional dos cálculos subsequentes.

Figura 9 – Propriedades termodinâmicas da água calculadas a 300K e 101,3kPa.

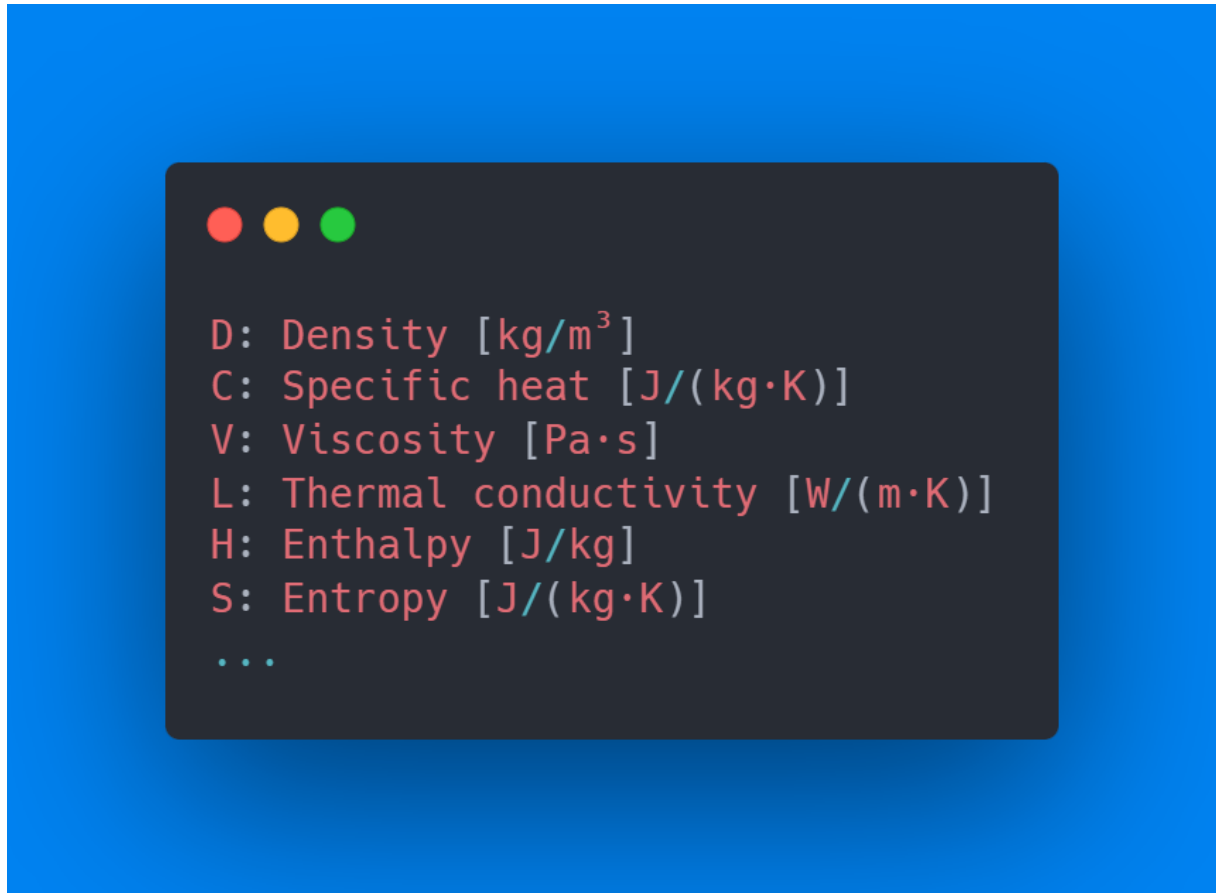


Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.1.3 Nome de Propriedades

A função *get_property_names()* expõe o mapeamento interno entre as chaves de solicitação da *API* (como 'D', 'H', 'V') e suas respectivas descrições físicas e unidades no SI. Esta estrutura organizacional permite que o usuário identifique rapidamente quais variáveis termodinâmicas podem ser requisitadas ao modelo, facilitando a configuração de simulações de balanço de massa e energia.

Figura 10 – Mapeamento de chaves de propriedades e suas unidades padronizadas.

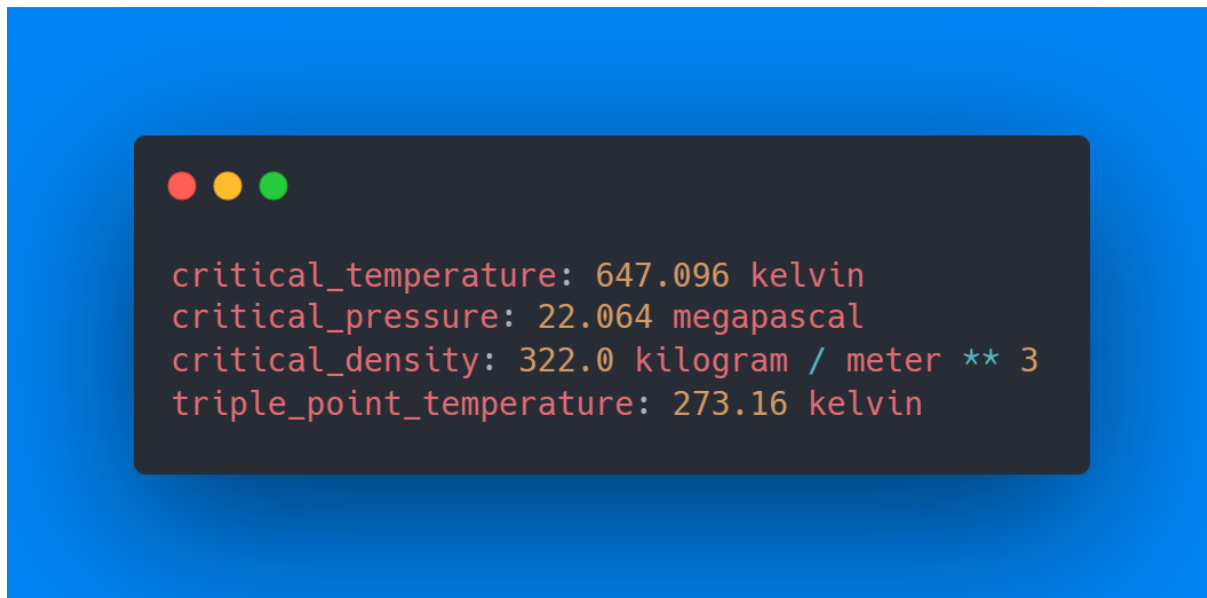


Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.1.4 Propriedades Críticas

A consulta das propriedades críticas para a água retornou uma temperatura crítica (T_c) de 647,1 K e uma pressão crítica (P_c) de 22,06 MPa. Esses parâmetros fixos são fundamentais para o cálculo de propriedades reduzidas e para a verificação dos limites de fase da substância nas equações de estado. O sistema também forneceu os dados do ponto triplo, expandindo a utilidade da ferramenta para análises de equilíbrio de fases.

Figura 11 – Propriedades críticas e do ponto triplo calculadas para a água.

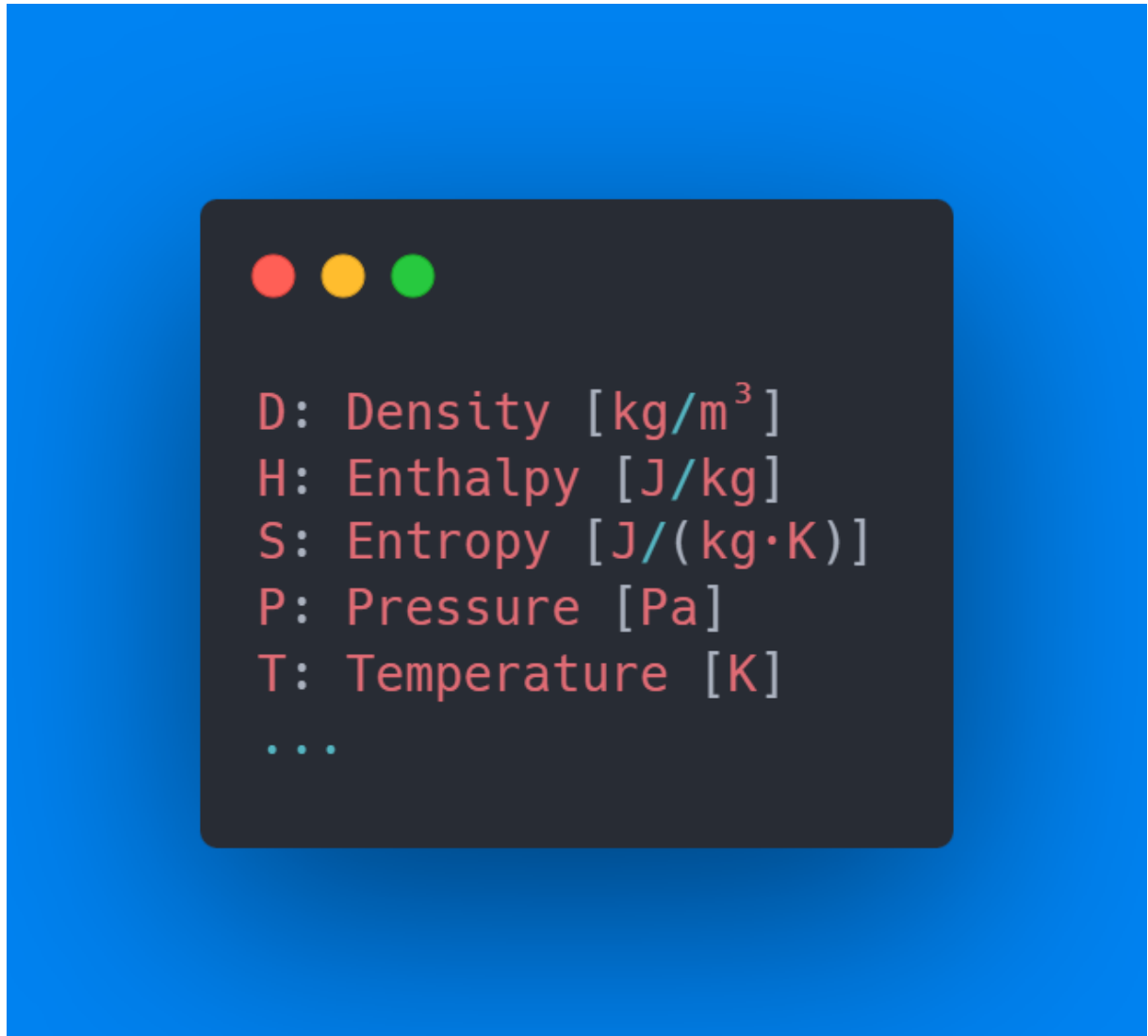


Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.1.5 Opções de Propriedades de Misturas

Para sistemas multicomponentes, a função `get_property_mixture_names()` delimita o subconjunto de propriedades que podem ser calculadas. Diferentemente das substâncias puras, observa-se que certas propriedades de transporte específicas ou tensão superficial podem não estar disponíveis dependendo do modelo de mistura (*HEOS*) empregado. A listagem confirma a disponibilidade das variáveis de estado essenciais (entalpia, entropia, massa específica) necessárias para o dimensionamento de reatores e tubulações.

Figura 12 – Propriedades termodinâmicas disponíveis para cálculo em misturas.

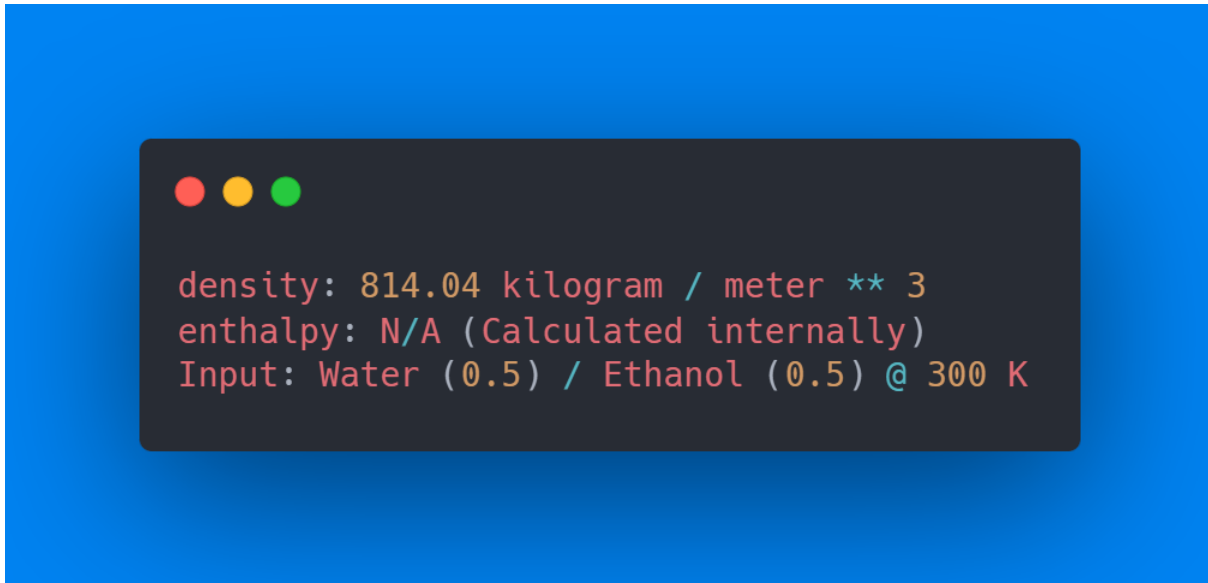


Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.1.6 Valor de Propriedades de Misturas

A simulação de uma mistura binária equimolar de Água (50%) e Etanol (50%) a $300K$ e $1atm$ resultou em uma massa específica de mistura de $814,04 kg/m^3$. O código utiliza internamente a regra de mistura baseada na energia livre de Helmholtz (HEOS) do *CoolProp* para ponderar as interações moleculares entre os componentes. Este valor intermediário entre a massa específica da água pura ($997kg/m^3$) e do etanol puro ($789kg/m^3$) demonstra a eficácia do algoritmo em prever o comportamento não-ideal da solução.

Figura 13 – Propriedades termodinâmicas disponíveis para cálculo em misturas.



Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.2 Hidráulicos

4.4.2.1 Perda de Carga

Para a validação do cálculo de perda de carga, utilizou-se o método de Darcy–Weisbach, aplicável a fluxos incompressíveis em qualquer regime de escoamento. A equação base para o cálculo é a Equação 4.8.

Nesta validação, comprimentos e diâmetros são tratados em metros, a velocidade em m/s , g em m/s^2 e a perda de carga calculada h_f é reportada em metros.

Onde a perda de carga localizada ($\sum h_{local}$) é calculada através do comprimento equivalente (L_{eq}) dos acessórios:

$$L_{total} = L + \sum(L_{eq} \cdot D) \quad (4.34)$$

Teste A: Tubulação Reta (Sem Acessórios)

- **Dados:** $L = 100m$, $D = 50mm(0,05m)$, $V = 2,0m/s$, $f = 0,02$
- **Cálculo Manual:**

$$h_f = 0,02 \cdot \frac{100}{0,05} \cdot \frac{2^2}{2 \cdot 9,80665} = 40 \cdot 0,2039 = 8,1577 \text{ m} \quad (4.35)$$

- **Software:** 8,1577 m
- **Status:** Resultado concordante, com desvio de 0,00%.

Teste B: Com Acessórios (2 Curvas 90º Raio Longo)

- **Dados Adicionais:** 2 Cotovelos ($L_{eq}/D = 16$).
- **Comprimento Equivalente:** $L_{eq} = 2 \cdot (16 \cdot 0,05) = 1,6m$
- **Comprimento Total:** $101,6m$
- **Cálculo Manual:**

$$h_f = 0,02 \cdot \frac{101,6}{0,05} \cdot \frac{2^2}{2 \cdot 9,80665} = 8,2882 \text{ m} \quad (4.36)$$

- **Software:** $8,2882 \text{ m}$
- **Status:** Resultado concordante, com desvio de 0,00%.

4.4.2.2 Reynolds

O Número de Reynolds (Re) foi validado utilizando as duas formas de entrada suportadas pela *API*: viscosidade dinâmica (μ) e cinemática (ν).

Método 1: Viscosidade Dinâmica (Equação 4.3)

- **Dados:** $\rho = 998kg/m^3, V = 2,0m/s, D = 0,05m, \mu = 1,002 \cdot 10^{-3}Pa \cdot s$
- **Cálculo Manual:** $Re = \frac{998 \cdot 2 \cdot 0,05}{0,001002} = 99.600,8$
- **Software:** $99.600,8$
- **Status:** Resultado concordante, com desvio de 0,00%.

Método 2: Viscosidade Cinemática (Equação 4.4)

- **Dados:** $V = 2,0m/s, D = 0,05m, \nu = 1,004 \cdot 10^{-6}m^2/s$
- **Cálculo Manual:** $Re = \frac{2 \cdot 0,05}{1,004 \cdot 10^{-6}} = 99.601,6$
- **Software:** $99.601,6$
- **Status:** Resultado concordante, com desvio de 0,00%.

4.4.2.3 Fator de Atrito

O fator de atrito de Darcy (f) foi validado comparando métodos iterativos e explícitos.

A. Consistência de Colebrook-White (COLEBROOK, 1939) Equação implícita (padrão, definida na Equação 4.5): Verificou-se a convergência da solução numérica da *API* comparando o Lado Esquerdo (*LHS*) e Direito (*RHS*) da equação.

- **Dados:** $\varepsilon = 0,045mm, D = 50mm, Re = 100.000$
- **Software** (f): $0,021614$

- **Check:** $LHS = 6,802$; $RHS = 6,802$
- **Status:** Convergência confirmada.

B. Equação de Swamee-Jain (Explícita) (SWAMEE; JAIN, 1976) (ver Equação 4.6)

- **Cálculo Manual:** $f = 0,02199$
- **Software:** 0,02199
- **Status:** Resultado concordante.

C. Equação de Haaland (Explícita) (HAALAND, 1983) (ver Equação 4.7)

- **Cálculo Manual:** $f = 0,02161$
- **Software:** 0,02161
- **Status:** Resultado concordante.

4.4.2.4 Diâmetro Real

A função de seleção de diâmetro comercial verifica o próximo diâmetro nominal disponível numa tabela de *Schedule*.

- **Entrada:** Diâmetro Calculado = 45,0 mm. *Schedule* = SCH40.
- **Lógica Manual:** Consultar tabela SCH40. Diâmetros disponíveis: ..., 32, 40, 50, 65... O próximo maior que 45 é 50.
- **Software:** 50,0 mm
- **Status:** Resultado concordante.

4.4.2.5 Diâmetro Calculado

O dimensionamento preliminar baseia-se na equação da continuidade para dutos circulares.

(ver Equação 4.1)

- **Dados:** $Q = 0,005 m^3/s$, $V = 1,5 m/s$
- **Cálculo Manual:** $D = \sqrt{\frac{4 \cdot 0,005}{\pi \cdot 1,5}} = \sqrt{0,004244} = 0,06515 m$ (65,15 mm)
- **Software:** 65,15 mm
- **Status:** Resultado concordante, com desvio de 0,00%.

4.4.2.6 NPSH Disponível

O cálculo do *Net Positive Suction Head* disponível ($NPSH_a$) utiliza a equação de Bernoulli aplicada à sucção da bomba:

Utilizando a Equação 4.15

- **Dados:** $P_{man} = 0,5 \text{ kgf/cm}^2$, $P_{atm} = 1 \text{ atm}$, $P_{vap} = 0,02 \text{ kgf/cm}^2$, $\gamma = 9806 \text{ N/m}^3$, $h_f = 1 \text{ m}$, $\Delta Z = 2 \text{ m}$
- **Termos de Pressão (m.c.a):** $H_{press} = \frac{(0,5+1,033) \cdot 98.066,5}{9.806,6} = 15,33 \text{ m}$, $H_{vap} = 0,2 \text{ m}$
- **Cálculo Manual:** $15,33 + 2,0 + 0,11 - 1,0 - 0,2 = 16,24 \text{ m}$
- **Software:** $16,24 \text{ m}$
- **Status:** Resultado concordante, com desvio inferior a 0,01%.

4.4.2.7 Altura manométrica

A carga manométrica total da bomba (H_{man}) é calculada pela diferença de energia entre sucção e descarga:

Utilizando a Equação 4.14

- **Dados:** $\Delta P = 101.325 \text{ Pa}$, $\Delta Z = 10 \text{ m}$, $V_1 = 1 \text{ m/s}$, $V_2 = 2 \text{ m/s}$, $h_f = 5 \text{ m}$
- **Cálculo Manual:** $\frac{101.325}{9806} + 10 + \frac{4-1}{19,6} + 5 = 10,33 + 10 + 0,15 + 5 = 25,48 \text{ m}$
- **Software:** $25,48 \text{ m}$
- **Status:** Resultado concordante, com desvio de 0,00%.

4.4.2.8 Diâmetro Hidráulico

O cálculo do diâmetro hidráulico (D_h) foi validado para diferentes geometrias, fundamental para cálculos de perda de carga em dutos não circulares.

A relação geral é definida na Equação 4.10.

1. Circular

- **Dados:** $D = 50 \text{ mm}$
- **Manual:** $D_h = D = 50 \text{ mm}$
- **Resultado calculado:** 50 mm **Resultado concordante**

2. Retangular

- **Dados:** $L = 40mm, H = 30mm$
- **Manual:** $A = 1200, P = 140 \rightarrow D_h = \frac{4800}{140} = 34,29 \text{ mm}$
- **Resultado calculado:** $34,29mm$ **Resultado concordante**

3. Anular (Tubo Concêntrico)

- **Dados:** $D_{ext} = 100mm, D_{int} = 50mm$
- **Manual:** $D_h = D_{ext} - D_{int} = 50mm$
- **Resultado calculado:** $50mm$ **Resultado concordante**

4. Triangular

- **Dados:** Lados 3, 4, 5 (Triângulo Retângulo). $A = 6, P = 12$.
- **Manual:** $D_h = \frac{4 \cdot 6}{12} = 2,0mm$
- **Resultado calculado:** $2,0mm$ **Resultado concordante**

5. Canal Circular (Meia Seção)

- **Dados:** $D = 100mm$, Nível $H = 50mm$ (Metade).
- **Manual:** Para meia seção cheia, $A = \pi R^2/2, P = \pi R$. Logo $D_h = \frac{4(\pi R^2/2)}{\pi R} = 2R = D = 100mm$.
- **Resultado calculado:** $100,0mm$ **Resultado concordante**

4.4.3 Balanços de Massa

4.4.3.1 Misturador Ideal

A validação do balanço de massa foi realizada considerando um misturador ideal (Mixer) alimentado por duas correntes puras.

Nos exemplos de balanço desta seção, cada soma ou subtração mantém uma única base de vazão: mássica no misturador e no divisor de corrente, molar no reator de conversão.

Definição do Caso Teste:

- **Corrente 1 (S1):** 100 kg/h de Água pura ($z_{\text{agua}} = 1,0$).
- **Corrente 2 (S2):** 100 kg/h de Etanol puro ($z_{\text{etanol}} = 1,0$).
- **Operação:** Mistura adiabática sem reação química ($S1 + S2 \rightarrow S3$).

Cálculo Manual:

1. **Balço Global:**

$$F_{S3} = F_{S1} + F_{S2} = 100 + 100 = 200 \text{ kg/h} \quad (4.37)$$

2. **Balço por Componente (Água):**

$$F_{S3} \cdot z_{S3,agua} = F_{S1} \cdot z_{S1,agua} + F_{S2} \cdot z_{S2,agua} \quad (4.38)$$

$$200 \cdot z_{S3,agua} = 100 \cdot 1,0 + 100 \cdot 0,0 \implies z_{S3,agua} = 0,5 \quad (4.39)$$

Comparação com o *Software*: O código de validação foi executado conforme a Figura 14.

Figura 14 – Código de validação do Balanço de Massa (Misturador)

```
demo_mass_balance.py

import sys
import os

# Add parent directory to path to allow imports
sys.path.append(os.path.abspath(os.path.join(os.path.dirname(__file__), '..')))

from models.mass_balance import MassBalance
from demo.utils import print_header, print_result

def demo_mass_balance():
    print_header("Validação Balanço de Massa - Misturador")

    # Definição do Problema: Mistura de Água e Etanol
    # Corrente 1: 100 kg/h (Água Pura)
    # Corrente 2: 100 kg/h (Etanol Puro)
    # Misturador -> Corrente 3

    mb = MassBalance(components=["Água", "Etanol"])

    # 1. Adicionar Correntes
    # Stream 1: Entrada, 100 kg/h, 100% Água
    mb.add_stream("S1", ["Água", "Etanol"], 1, flow_rate=100.0, compositions={"Água": 1.0, "Etanol": 0.0})

    # Stream 2: Entrada, 100 kg/h, 100% Etanol
    mb.add_stream("S2", ["Água", "Etanol"], 1, flow_rate=100.0, compositions={"Água": 0.0, "Etanol": 1.0})

    # Stream 3: Saída
    mb.add_stream("S3", ["Água", "Etanol"], -1)

    print(">>> Dados de Entrada:")
    print("S1: F=100 kg/h, z=[Água: 1.0, Etanol: 0.0]")
    print("S2: F=100 kg/h, z=[Água: 0.0, Etanol: 1.0]")

    # 2. Solver
    results = mb.get_results()

    # 3. Resultados
    print("\n>>> Resultados Computacionais:")
    s3 = results["S3"]
    print(f"S3 Flow Rate: {s3['flow_rate']} kg/h")
    print(f"S3 Compositions: {s3['compositions']}")

    # Validação
    valid, msg = mb.validate_results(results)
    if valid:
        print("\n[VALIDAÇÃO] O balanço de massa fechou corretamente.")
    else:
        print(f"\n[ERRO] Falha na validação: {msg}")

if __name__ == "__main__":
    demo_mass_balance()
```

Tabela 16 – Validação Balanço de Massa (Misturador)

Parâmetro	Cálculo Manual	Software	Erro (%)
Vazão S3 (<i>kg/h</i>)	200,0	200,0	0,00
Fração Água S3	0,50	0,50	0,00
Fração Etanol S3	0,50	0,50	0,00

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.3.2 Reator de Conversão

Neste caso, avalia-se a geração e consumo de espécies químicas em um sistema reacional simples.

- **Reação:** $A \rightarrow B$ (Estequiometria 1:1).
- **Alimentação:** 100 *mol/s* de A puro.
- **Conversão (X_A):** 40%.

Cálculo Manual: Pela estequiometria, para cada mol de A consumido, gera-se 1 mol de B.

$$F_{A,out} = F_{A,in}(1 - X_A) = 100(1 - 0,40) = 60 \text{ mol/s} \quad (4.40)$$

$$F_{B,out} = F_{A,in}X_A = 100(0,40) = 40 \text{ mol/s} \quad (4.41)$$

A vazão molar total permanece constante ($60 + 40 = 100$), resultando nas frações molares:

$$y_A = \frac{60}{100} = 0,6; \quad y_B = \frac{40}{100} = 0,4 \quad (4.42)$$

Validação: O *software* retornou: $F_{Product} = 100 \text{ mol/s}$, com composição $z_A = 0,6$ e $z_B = 0,4$, confirmando a conservação de massa e estequiometria.

4.4.3.3 Divisor de Corrente (*Splitter*)

Simula-se uma operação de separação física onde uma corrente é dividida em duas (Reciclo e Produto) sem alteração de composição, típica em loops de reciclo.

- **Entrada no Divisor:** 100 *kg/h* (mistura 50% A, 50% B).
- **Razão de Divisão (Reciclo):** 0,2 ou 20%.

Cálculo Manual:

$$F_{Reciclo} = 0,2 \cdot 100 = 20 \text{ kg/h} \quad (4.43)$$

$$F_{Produto} = (1 - 0,2) \cdot 100 = 80 \text{ kg/h} \quad (4.44)$$

A composição deve permanecer inalterada: $z_A = 0,5$; $z_B = 0,5$ em ambas as saídas.

Validação: Conforme sintetizado na representação didática (Tabela 17), os valores de vazão foram exatos (20 e 80 kg/h) e a composição manteve-se constante, validando a lógica do divisor.

Tabela 17 – Representação didática do balanço de massa validado

Etapa	Entradas	Processamento	Saídas verificadas
Misturador	$S1 = S2 = 100$ kg/h; água e etanol puros.	Soma da vazão global e balanço por componente, sem reação.	$F_{S3} = 200$ kg/h; $z_{agua} = z_{etanol} = 0,5$.
Reator	$F_{A,in} = 100$ mol/s; $X_A = 0,40$; $A \rightarrow B$.	Aplicação da estequiometria 1:1: $F_{A,out} = F_{A,in}(1 - X_A)$ e $F_{B,out} = F_{A,in}X_A$.	$F_{A,out} = 60$ mol/s; $F_{B,out} = 40$ mol/s.
Splitter	$F_{in} = 100$ kg/h; $z_A = z_B = 0,5$; fração de reciclo 0,2.	$F_{Reciclo} = 0,2F_{in}$ e $F_{Produto} = (1 - 0,2)F_{in}$, preservando a composição.	$F_{Reciclo} = 20$ kg/h; $F_{Produto} = 80$ kg/h.

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.4 Tubulações

O módulo de tubulações atua como um banco de dados de engenharia, fornecendo especificações padronizadas para acessórios, materiais e dimensões de tubulações. A validação deste módulo consiste na verificação da conformidade dos dados retornados com as tabelas normativas padrão.

4.4.4.1 Acessórios

A função *fittings()* retorna uma lista de todos os acessórios hidráulicos cadastrados no sistema. Esta funcionalidade permite que outros módulos (como o de Perda de Carga) validem a entrada de dados do usuário e utilizem os coeficientes corretos.

4.4.4.2 Especificação de Acessórios

A função *fitting_specifications(nome)* retorna os detalhes técnicos de um acessório, incluindo seu comprimento equivalente adimensional (L_{eq}/D) ou coeficiente de perda de carga (K). Para validação, utilizou-se o acessório *90 degrees Elbow long radius* (Cotovelo 90º Raio Longo).

4.4.4.3 Composição

A função *compositions()* lista os materiais de tubulação disponíveis, associando-os às suas respectivas rugosidades absolutas, parâmetro crítico para o cálculo do Fator de Atrito de Darcy.

4.4.4.4 Especificação da Composição

A função *composition_specifications(nome)* retorna as propriedades de um material específico. Para validação, verificou-se o material *Commercial steel* (Aço comercial).

4.4.4.5 Schedules

A função *schedules()* fornece as classes de pressão/espessura disponíveis (ex: SCH40, SCH80), permitindo a seleção adequada conforme a norma ANSI/ASME B36.10M.

4.4.4.6 Diâmetros

A função *diameters(schedule)* lista os diâmetros nominais (DN) disponíveis para uma determinada classe (*schedule*).

4.4.4.7 Especificação de Diâmetros

A função *diameter_specifications(schedule, dn)* retorna as dimensões reais da tubulação, incluindo diâmetro externo, espessura de parede e diâmetro interno (calculado). Para validação, utilizou-se uma tubulação de *Schedule 40* com Diâmetro Nominal 50 (aprox. 2 polegadas).

Tabela 18 – Resumo dos contratos validados no módulo de tubulações

Contrato	Consulta validada	Evidência verificada
Acessórios	<i>fittings()</i>	Lista reutilizável para validação de entradas e perdas locais.
Especificação de acessório	<i>fitting_specifications(nome)</i>	Comprimento equivalente $L_{eq}/D = 16$ do cotovelo de 90 graus de raio longo.
Composição	<i>compositions()</i>	Materiais disponíveis e suas rugosidades absolutas.
Especificação de composição	<i>composition_specifications(nome)</i>	Aço comercial: rugosidade absoluta 0,06 mm e coeficiente de rugosidade $C = 135$.
Schedules	<i>schedules()</i>	Classes de pressão e espessura, como SCH40 e SCH80.
Diâmetros	<i>diameters(schedule)</i>	Diâmetros nominais disponíveis para o SCH40.
Especificação de diâmetro	<i>diameter_specifications(schedule, dn)</i>	SCH40 DN50: diâmetro externo 60,3 mm, espessura 3,91 mm, massa linear 4,44 kg/m e pressão máxima 7,93 MPa (catalogada como 1150 psi).

Fonte: Autoria própria.

4.4.5 Reatores

Esta seção apresenta a validação detalhada dos modelos de reatores *CSTR* (*Continuous Stirred-Tank Reactor*) e *PFR* (*Plug Flow Reactor*). Para garantir a precisão dos algoritmos, foram realizados cálculos manuais passo a passo para cenários de projeto e desempenho, comparando-os com os resultados obtidos pela ferramenta computacional.

Para todos os casos, adotou-se uma reação irreversível de primeira ordem $A \rightarrow B$ ocorrendo em fase líquida isotérmica, com os seguintes parâmetros globais:

- Constante cinética da reação (k): $0,05 \text{ s}^{-1}$
- Concentração inicial do reagente A (C_{A0}): 1000 mol/m^3
- Vazão volumétrica de alimentação (Q ou v_0): $0,01 \text{ m}^3/\text{s}$
- Taxa molar de alimentação (F_{A0}): 10 mol/s

4.4.5.1 CSTR: Reator Tanque Agitado Continuamente

A equação de projeto (balanço molar) para um *CSTR* operando em regime estacionário é a Equação 4.24.

Para esta validação, a base dimensional segue os parâmetros globais acima; a cinética de primeira ordem gera $-r_A$ em $\text{mol}/(\text{m}^3 \text{ s})$ e as conversões permanecem adimensionais.

Para uma reação de primeira ordem em fase líquida (massa específica constante), a taxa de reação é dada por:

$$-r_A = kC_A = kC_{A0}(1 - X) \quad (4.45)$$

Substituindo na equação de projeto e sabendo que $F_{A0} = C_{A0}v_0$:

$$V_{CSTR} = \frac{C_{A0}v_0X}{kC_{A0}(1 - X)} = \frac{v_0X}{k(1 - X)} \quad (4.46)$$

Cálculo Manual (Design): Considerando uma conversão alvo de $X = 0,85$ (85%):

$$V_{manual} = \frac{0,01 \cdot 0,85}{0,05 \cdot (1 - 0,85)} \quad (4.47)$$

$$V_{manual} = \frac{0,0085}{0,05 \cdot 0,15} = \frac{0,0085}{0,0075} \approx 1,1333 \text{ m}^3 \quad (4.48)$$

Comparação com o Código: O módulo *Reactor* foi executado com os mesmos parâmetros.

Tabela 19 – Validação *CSTR* ($X = 0,85$)

Parâmetro	Cálculo Manual	<i>Software</i>	Erro (%)
Volume (m^3)	1,1333	1,1333	0,0000

Fonte: Elaboração própria (2026).

Também validou-se o cálculo inverso (Desempenho), onde fornece-se $V = 1,1333m^3$ e espera-se $X = 0,85$. O código retornou exatamente 0,8500.

4.4.5.2 PFR: Reator Tubular

A equação de projeto para um PFR é obtida através do balanço diferencial de massa (Equação 4.28).

Na validação do PFR, $F_{A0}/(-r_A)$ tem unidade de volume ao combinar vazão molar com taxa molar de reação por volume de reator, e a integração ocorre sobre conversão adimensional.

Substituindo a cinética de primeira ordem:

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{kC_{A0}(1-X)} = \frac{F_{A0}}{kC_{A0}} \int_0^X \frac{dX}{1-X} \quad (4.49)$$

Como $\frac{F_{A0}}{C_{A0}} = v_0$:

$$V = \frac{v_0}{k} [-\ln(1-X)]_0^X = -\frac{v_0}{k} \ln(1-X) \quad (4.50)$$

Cálculo Manual (Design): Considerando uma conversão alvo de $X = 0,90$ (90%):

$$V_{\text{manual}} = -\frac{0,01}{0,05} \ln(1-0,90) \quad (4.51)$$

$$V_{\text{manual}} = -0,2 \cdot \ln(0,10) \quad (4.52)$$

Sabendo que $\ln(0,10) \approx -2,302585$:

$$V_{\text{manual}} = -0,2 \cdot (-2,302585) \approx 0,4605 \text{ m}^3 \quad (4.53)$$

Comparação com o Código:

Tabela 20 – Validação PFR ($X = 0,90$)

Parâmetro	Cálculo Manual	Software	Erro (%)
Volume (m^3)	0,4605	0,4605	0,0000

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.4.5.3 PFR com Reciclo

Em reatores com reciclo, parte da corrente de saída retorna à entrada. Para uma razão de reciclo R (vazão reciclada / vazão fresca de alimentação), a conversão na entrada do reator (X_{in}) é diferente de zero, pois há mistura de reagentes frescos ($X = 0$) com reagentes reciclados ($X = X_{out}$).

Na validação com reciclo, R , X_{in} e a variável de integração X permanecem adimensionais; $F_{A0}/(-r_A)$ define a escala de volume do reator.

A relação de balanço de massa no ponto de mistura fornece:

$$X_{in} = \frac{R}{R+1} X_{out} \quad (4.54)$$

A equação de volume torna-se:

$$V = (R+1)F_{A0} \int_{X_{in}}^{X_{out}} \frac{dX}{-r_A} \quad (4.55)$$

Integrando para primeira ordem:

$$V = (R+1) \frac{v_0}{k} \ln \left(\frac{1 - X_{in}}{1 - X_{out}} \right) \quad (4.56)$$

Cálculo Manual (Design): Considerando uma conversão de saída $X_{out} = 0,90$ e razão de reciclo $R = 2,0$.

Passo 1: Calcular X_{in} .

$$X_{in} = \frac{2,0}{2,0+1} \cdot 0,90 = \frac{2}{3} \cdot 0,90 = 0,60 \quad (4.57)$$

Passo 2: Calcular o Volume.

$$V_{manual} = (2+1) \cdot \frac{0,01}{0,05} \cdot \ln \left(\frac{1 - 0,60}{1 - 0,90} \right) \quad (4.58)$$

$$V_{manual} = 3 \cdot 0,2 \cdot \ln \left(\frac{0,40}{0,10} \right) = 0,6 \cdot \ln(4) \quad (4.59)$$

Sabendo que $\ln(4) \approx 1,38629$:

$$V_{manual} = 0,6 \cdot 1,38629 \approx 0,8318 \text{ m}^3 \quad (4.60)$$

Comparação com o Código:

Tabela 21 – Validação *PFR* com Reciclo ($R = 2,0$; $X = 0,90$)

Parâmetro	Cálculo Manual	<i>Software</i>	Erro (%)
Volume (m^3)	0,8318	0,8318	0,0000

Fonte: Elaboração própria (2026).

Os testes confirmam que as rotinas computacionais implementam corretamente as equações diferenciais e algébricas fundamentais da engenharia de reações, incluindo cenários complexos de integração numérica com limites variáveis como no caso do reciclo.

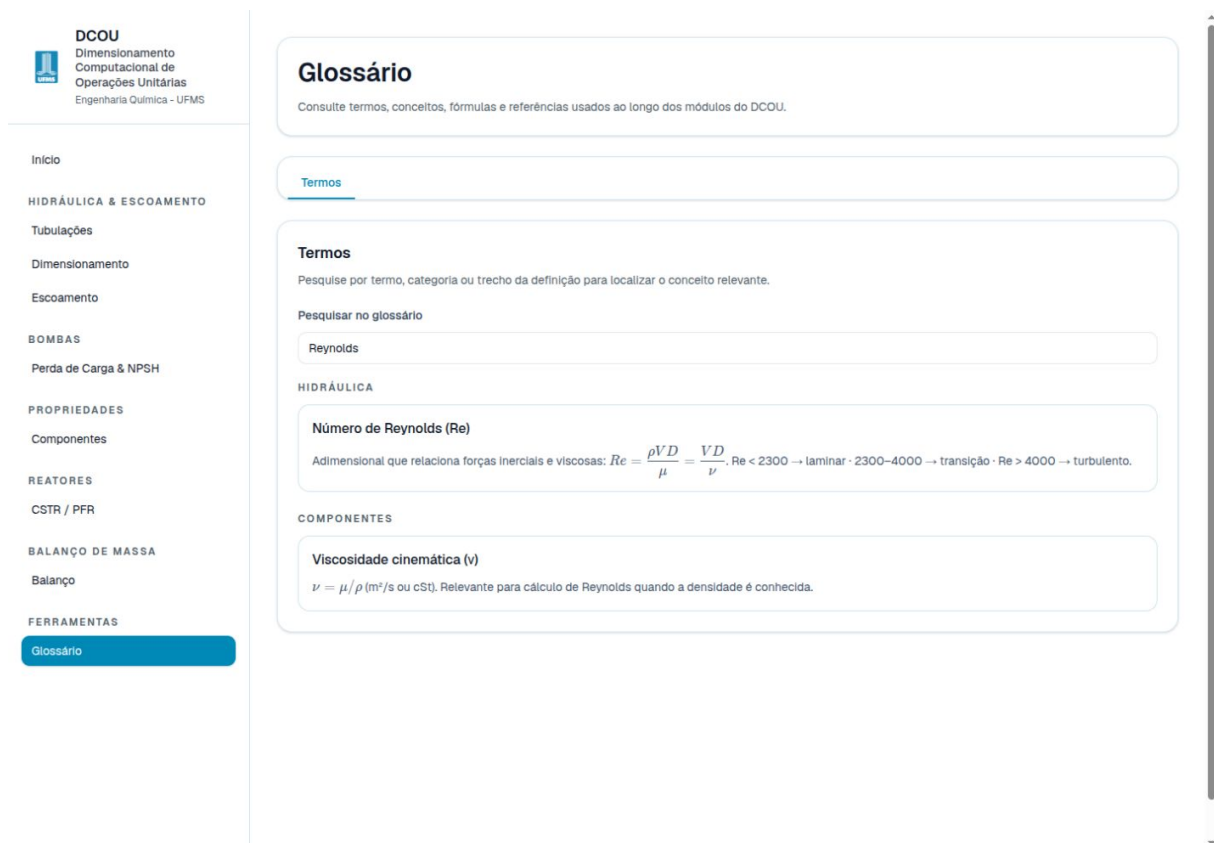
4.5 Recursos Didáticos

Além dos módulos de cálculo, o DCOU incorpora uma camada de recursos voltados ao aprendizado conceitual, que diferenciam a ferramenta de uma simples calculadora. Esses recursos articulam cada resultado numérico ao seu fundamento teórico e ao fenômeno físico correspondente, apoiando estudantes e engenheiros em formação. As subseções a seguir descrevem o glossário técnico, as explicações teóricas embutidas, as visualizações interativas, os cenários de exemplo e as trilhas de aprendizagem.

4.5.1 Glossário

O glossário reúne 49 termos técnicos organizados em oito categorias (*Hidráulica, Dimensionamento, Bombas, Reatores, Componentes, Balanço, Termodinâmica e Transferência de calor*), cada um acompanhado de definição e, quando pertinente, da equação correspondente renderizada matematicamente por meio da biblioteca *KaTeX*. Um campo de busca filtra os termos em tempo real, e as categorias se reorganizam dinamicamente conforme os resultados, permitindo que o estudante localize rapidamente conceitos como número de *Reynolds*, fator de atrito de *Darcy*, *NPSH* ou equação de *Antoine*. Na interface final, o glossário também passou a atuar como recurso de apoio ao fluxo de navegação, aparecendo integrado ao painel de recursos para que o usuário compreenda o papel dessa área sem sair da experiência principal.

Figura 15 – Glossário técnico com busca e equações renderizadas



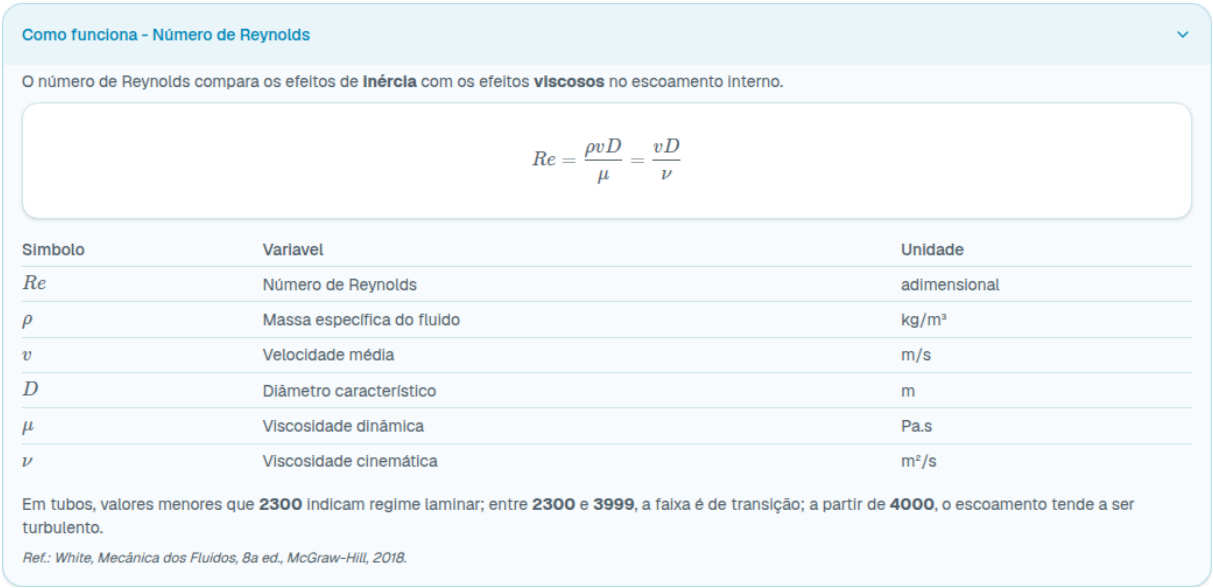
Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.2 Explicações Teóricas Embutidas

Cada calculadora dispõe de blocos teóricos retráteis (“Como funciona”), que apresentam a fundamentação do cálculo sem afastar o usuário da interface. Na versão atual, esses blocos não se limitam às calculadoras escalares de diâmetro, número de *Reynolds*, fator de atrito, diâmetro hidráulico, perda de carga, *NPSH* disponível e altura manométrica: eles também acompanham visualizações específicas, como o diagrama de *Moody*, as curvas

de bomba, o mapa de eficiência com *BEP*, o diagrama *T-x-y* binário, o *McCabe-Thiele*, o envelope de fase, a curva de pressão de vapor, o diagrama ternário e os painéis de reatores. Em conjunto, esses blocos reúnem equações, regras de leitura, interpretação física das variáveis e referências bibliográficas coerentes com cada fenômeno (WHITE, 2018; PERRY; GREEN, 2007; FOGLER, 2009; SMITH et al., 2018; MCCABE; SMITH; HARRIOTT, 2005; POLING; PRAUSNITZ; O’CONNELL, 2001; SEADER; HENLEY; ROPER, 2016; KARASSIK et al., 2008; BELL et al., 2014).

Figura 16 – Exemplo de explicação teórica embutida em uma calculadora



Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3 Visualizações Interativas

Para tornar tangíveis os fenômenos físicos, o *frontend* incorpora uma camada ampla de visualizações contextuais construída em componentes reativos de *SVG*. Essa abordagem permite que os gráficos respondam imediatamente às alterações de entrada e se integrem à mesma arquitetura modular dos formulários e resultados. Atualmente, a aplicação reúne mais de vinte visualizações distribuídas entre gráficos numéricos com eixos padronizados, diagramas conceituais, mapas de processo e indicadores de operação. Entre os exemplos, destacam-se o perfil de velocidade do escoamento; a régua de regime de escoamento e o diagrama de *Moody*; as curvas de perda de carga em função da vazão, a margem de *NPSH* e a decomposição da altura manométrica; os diagramas de *Levenspiel*, *T-x-y*, *y-x*, envelope de fase e *McCabe-Thiele*; além de representações de apoio como o gráfico de *Arrhenius*, o perfil espacial de *PFR*, o mapa de eficiência da bomba, os diagramas ternários, a superfície de propriedades e os fluxos de reciclo e purga. Em conjunto, essas visualizações reforçam a leitura dos resultados e aproximam a interpretação numérica do comportamento físico representado.

O valor didático dessa biblioteca de visualizações está em tornar observáveis relações que, em um cálculo puramente tabular, permaneceriam implícitas. No módulo de escoamento, por exemplo, o perfil de velocidade e a régua de regime ajudam a relacionar o número de *Reynolds* com a forma do escoamento e com a mudança de correlações de atrito. No módulo de bombas, as curvas do sistema, a decomposição da altura manométrica, o indicador de *NPSH* e o mapa de eficiência com destaque para o *Best Efficiency Point (BEP)* permitem discutir simultaneamente energia mecânica, perdas, faixa operacional e risco de cavitação. Nos módulos de propriedades e reatores, diagramas como *McCabe-Thiele*, envelope de fase, curva de pressão de vapor, *Levenspiel* e *Arrhenius* transformam resultados intermediários do *backend* em objetos gráficos que favorecem a interpretação física das equações, e não apenas a obtenção do valor final.

Figura 17 – Card do perfil de velocidade em duto circular



Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.1 Diagrama de Moody

O diagrama de *Moody* foi incorporado para tornar explícita a relação entre número de *Reynolds*, rugosidade relativa e fator de atrito de *Darcy*. Na interface, o usuário não recebe apenas o valor final de f : o ponto operacional é sobreposto à família de curvas, permitindo compreender por que materiais distintos e regimes distintos conduzem a perdas de carga diferentes. Como o *backend* já devolve o Re calculado, a rugosidade relativa e o fator de atrito coerentes com a correlação adotada, a visualização permanece rastreável ao modelo hidráulico e favorece a leitura do cálculo em chave física, e não apenas algorítmica (WHITE, 2018; COLEBROOK, 1939; SWAMEE; JAIN, 1976; HAALAND, 1983).

4.5.3.2 Curva da Bomba, Margem de *NPSH* e Mapa de Eficiência

A curva da bomba e do sistema foi adicionada para discutir o ponto operacional como resultado do equilíbrio entre a energia fornecida pelo equipamento e a resistência hidráulica da instalação. Em vez de apresentar apenas uma altura manométrica calculada, a interface mostra como a interseção entre as curvas se desloca quando a vazão ou as perdas variam, o que reforça a interpretação operacional do problema (FOX; PRITCHARD;

MCDONALD, 2011). Complementarmente, o gráfico de margem de $NPSH$ foi incluído para representar visualmente a folga entre $NPSH_d$ e $NPSH_r$, permitindo discutir cavitação de modo imediato; já o mapa de eficiência com destaque para o *Best Efficiency Point* (*BEP*) evidencia se a condição corrente está próxima da região de melhor rendimento ou deslocada para uma faixa menos favorável, inclusive com indicação aproximada da região de cavitação. Nesses casos, o *backend* devolve não apenas valores escalares, mas também a malha de eficiência relativa, a curva do sistema, o ponto de operação e os marcadores críticos que estruturam a leitura didática (KARASSIK et al., 2008; FOX; PRITCHARD; MCDONALD, 2011).

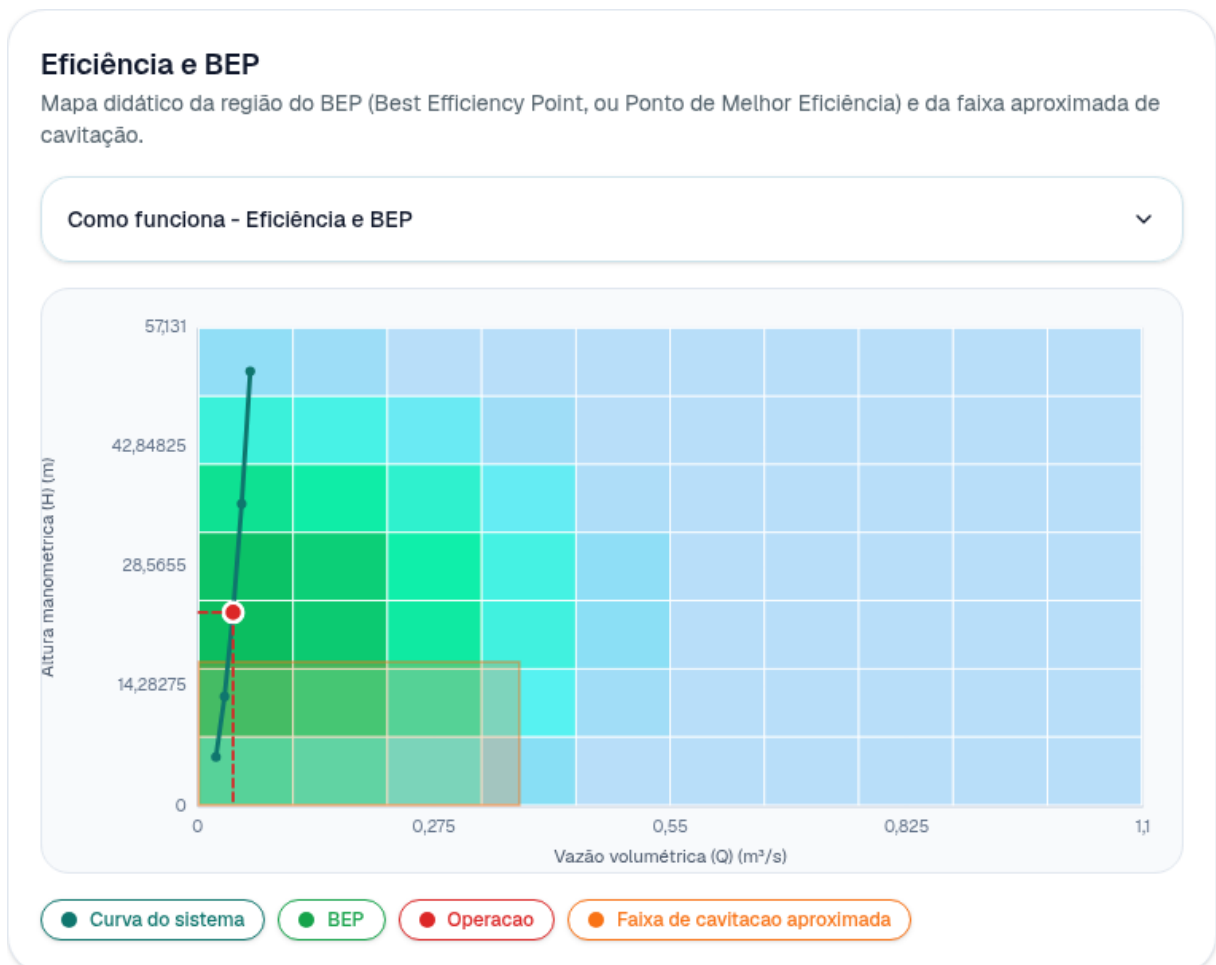
Figura 18 – Card da curva da bomba e do sistema



Fonte: Elaboração própria (2026).

Figura 19 – Card da margem de *NPSH*

Fonte: Elaboração própria (2026).

Figura 20 – Card do mapa de eficiência da bomba com destaque do *BEP*

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.3 Diagrama de Levenspiel

O diagrama de *Levenspiel* foi mantido como peça central do módulo de reatores porque ele transforma a comparação entre *CSTR* e *PFR* em uma relação geométrica facilmente interpretável pelo estudante. Na implementação atual, o gráfico destaca os pontos operacionais de ambos os modelos e compara a demanda volumétrica associada a uma mesma conversão, deixando visível por que o *PFR* tende a requerer menor volume em cinéticas positivas quando comparado ao *CSTR*. Sua presença no TCC é particularmente importante porque ele não atua como ornamento visual: ele traduz em forma gráfica a própria equação de projeto dos reatores ideais, articulando diretamente cálculo e interpretação (LEVENSPIEL, 2000; FOGLER, 2009).

Figura 21 – Card do diagrama de *Levenspiel* comparando reatores *CSTR* e *PFR*



Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.4 Gráfico de Arrhenius

O gráfico de *Arrhenius* foi incluído para apoiar a compreensão da dependência da constante cinética com a temperatura. Ao linearizar a relação entre k e T no plano $1000/T$ versus $\ln(k)$, a visualização permite discutir sensibilidade térmica, energia de ativação e velocidade reacional sem exigir que o estudante permaneça apenas na manipulação simbólica da equação. Seu papel pedagógico é evidenciar que pequenas alterações de temperatura podem produzir mudanças expressivas na taxa de reação, o que se conecta diretamente à análise dos módulos de *CSTR* e *PFR* (FOGLER, 2009).

Figura 22 – Card do gráfico de Arrhenius



Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.5 Perfis Espaciais no *PFR*

Os perfis espaciais no *PFR* foram adicionados para evitar uma leitura excessivamente agregada do reator tubular. Em vez de resumir o comportamento do sistema a um único ponto de saída, a interface exibe séries de concentração e temperatura ao longo do volume relativo do reator, acompanhadas de um esquema que marca estações intermediárias calculadas pelo *backend*. A mesma família de visualizações inclui o gráfico de conversão em função da razão de reciclo, que mostra como a variação de R altera a conversão prevista para o caso atual e permite comparar diretamente cenários de recirculação. Isso ajuda a consolidar a ideia de que o *PFR* deve ser interpretado como um campo espacial de estados e como um sistema sensível à recirculação, no qual cada posição do reator opera sob composição distinta (FOGLER, 2009; LEVENSPIEL, 2000).

Figura 23 – Card dos perfis espaciais de concentração e temperatura no *PFR*

Fonte: Elaboração própria (2026).

Figura 24 – Card da conversão do *PFR* em função da razão de reciclo

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.6 Diagrama T - x - y Binário

O diagrama T - x - y binário foi incluído para representar o equilíbrio líquido-vapor em misturas binárias a pressão fixa. A presença simultânea das curvas de bolha e de orvalho permite discutir início de vaporização, início de condensação, coexistência entre fases e volatilidade relativa sem depender apenas de tabelas termodinâmicas. Como o *backend* calcula os pontos de equilíbrio e entrega as séries já estruturadas para renderização, o estudante observa o comportamento do sistema a partir de dados consistentes com o mesmo núcleo termodinâmico usado nas demais consultas de propriedades (SMITH et al., 2018).

Figura 25 – Card do diagrama T - x - y binário

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.7 Diagrama de McCabe-Thiele

O diagrama de *McCabe-Thiele* foi incorporado para explicitar a construção gráfica do número teórico de estágios em uma separação binária por destilação. Na aplicação, a curva de equilíbrio, a diagonal, as linhas de enriquecimento e esgotamento, a linha q e os degraus são todos montados a partir dos dados termodinâmicos e operacionais resolvidos no *backend*, o que permite ao usuário relacionar composição de topo, composição de fundo, condição da alimentação e razão de refluxo com a contagem de estágios. O valor didático do gráfico está em mostrar que o resultado de projeto não emerge de uma “caixa-preta”, mas de uma sequência geométrica interpretável (MCCABE; SMITH; HARRIOTT, 2005; SMITH et al., 2018).

Figura 26 – Card do diagrama de *McCabe-Thiele* gerado a partir do equilíbrio binário

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.8 Envelope de Fase e Curva de Pressão de Vapor

O envelope de fase e a curva de pressão de vapor foram adicionados para apoiar a leitura termodinâmica de limites de estabilidade e mudança de fase. O envelope destaca a fronteira entre regiões de líquido, vapor e coexistência, incluindo marcadores de ponto crítico e ponto tríplice; a curva de pressão de vapor, por sua vez, mostra como a pressão de saturação varia com a temperatura, auxiliando discussões sobre volatilidade, ebulição e risco de cavitação. Em ambos os casos, a utilidade pedagógica está em associar propriedades antes tratadas de forma tabular a regiões operacionais visualmente distinguíveis (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001; SMITH et al., 2018).

Figura 27 – Card da curva de pressão de vapor

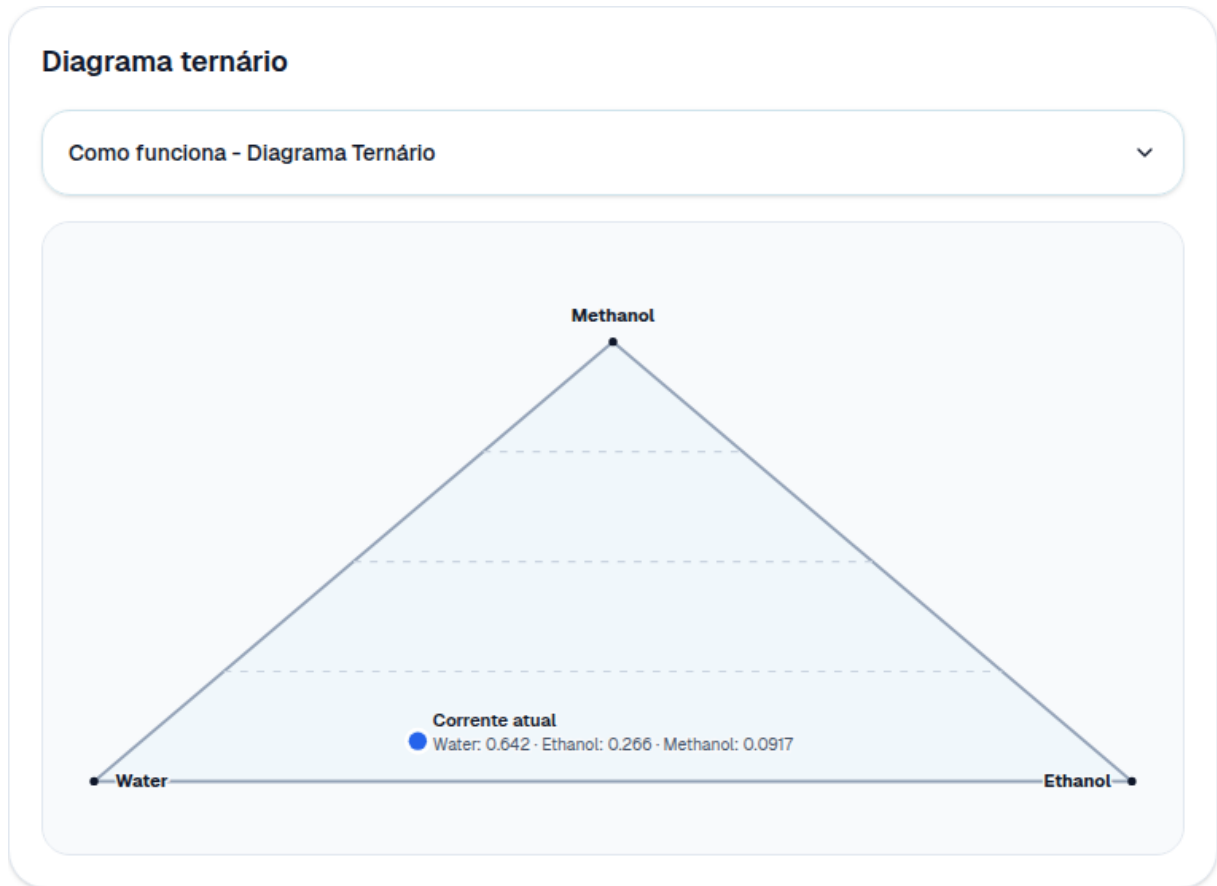


Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.9 Diagrama Ternário

O diagrama ternário foi incorporado para representar composições de correntes com três componentes sem a necessidade de introduzir, neste estágio, um módulo completo de separações multicomponentes. Na implementação atual, o *backend* normaliza as frações molares, projeta a corrente no plano ternário e devolve a geometria do triângulo, das linhas-guia e do ponto da corrente pronta para renderização. Didaticamente, isso permite mostrar que cada vértice representa um componente puro, cada lado uma mistura binária e o interior uma composição ternária, o que facilita a leitura de misturas e a preparação conceitual para problemas de extração e equilíbrio mais avançados (SEADER; HENLEY; ROPER, 2016; DEVOE, 2014).

Figura 28 – Card do diagrama ternário para uma corrente de três componentes

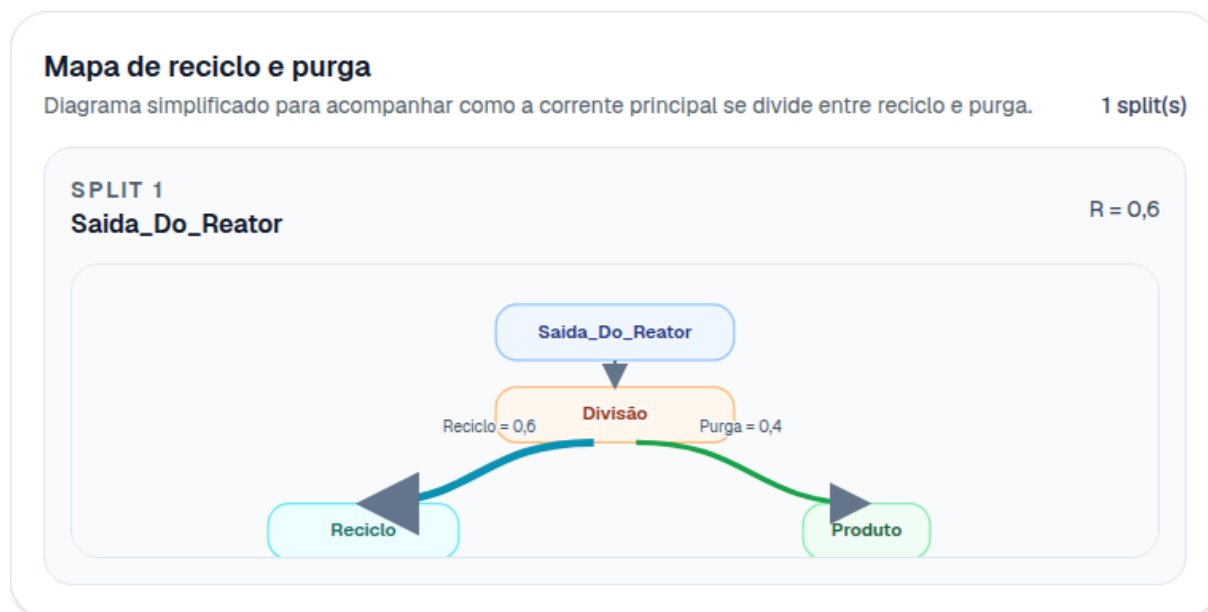


Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.10 Mapa de Reciclo e Purga

O mapa de reciclo e purga foi incorporado ao fluxo de balanço de massa para representar graficamente a divisão de uma corrente principal entre retorno ao processo e retirada de produto ou purga. Essa visualização explicita a razão de reciclo adotada no exemplo, evitando que o estudante interprete o reciclo apenas como uma linha tabular e reforçando a relação entre topologia do processo e fechamento de massa.

Figura 29 – Card do mapa de reciclo e purga no balanço de massa



Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.3.11 Superfície T - P de Propriedades

Por fim, a superfície T - P de propriedades foi adicionada para evidenciar que grandezas termodinâmicas não dependem de forma linear das variáveis de estado. Ao colorir e discretizar o valor de uma propriedade em função de temperatura e pressão, a visualização transforma uma consulta isolada em um campo interpretável, útil para comparar tendências, identificar regiões de maior gradiente e compreender a sensibilidade do modelo termodinâmico às condições impostas. Como essa superfície é construída a partir do mesmo núcleo de propriedades do *CoolProp*, ela reforça a coerência entre cálculo puntual e exploração gráfica (BELL et al., 2014; POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001).

Figura 30 – Card da superfície T - P de propriedades

Fonte: Elaboração própria (2026).

4.5.4 Cenários de Exemplo

Além das visualizações, o sistema oferece cenários de exemplo providos pela própria *API* para acelerar a exploração didática dos módulos. Em vez de armazenar resultados prontos no *frontend*, esses *endpoints* retornam conjuntos coerentes de entradas para escoamento, dimensionamento, bombas, propriedades de componentes e outros contextos, respeitando os catálogos e limites disponíveis no *backend*. A interface utiliza esses dados para pré-preencher os formulários e, em seguida, executa o mesmo fluxo de cálculo usado em situações reais.

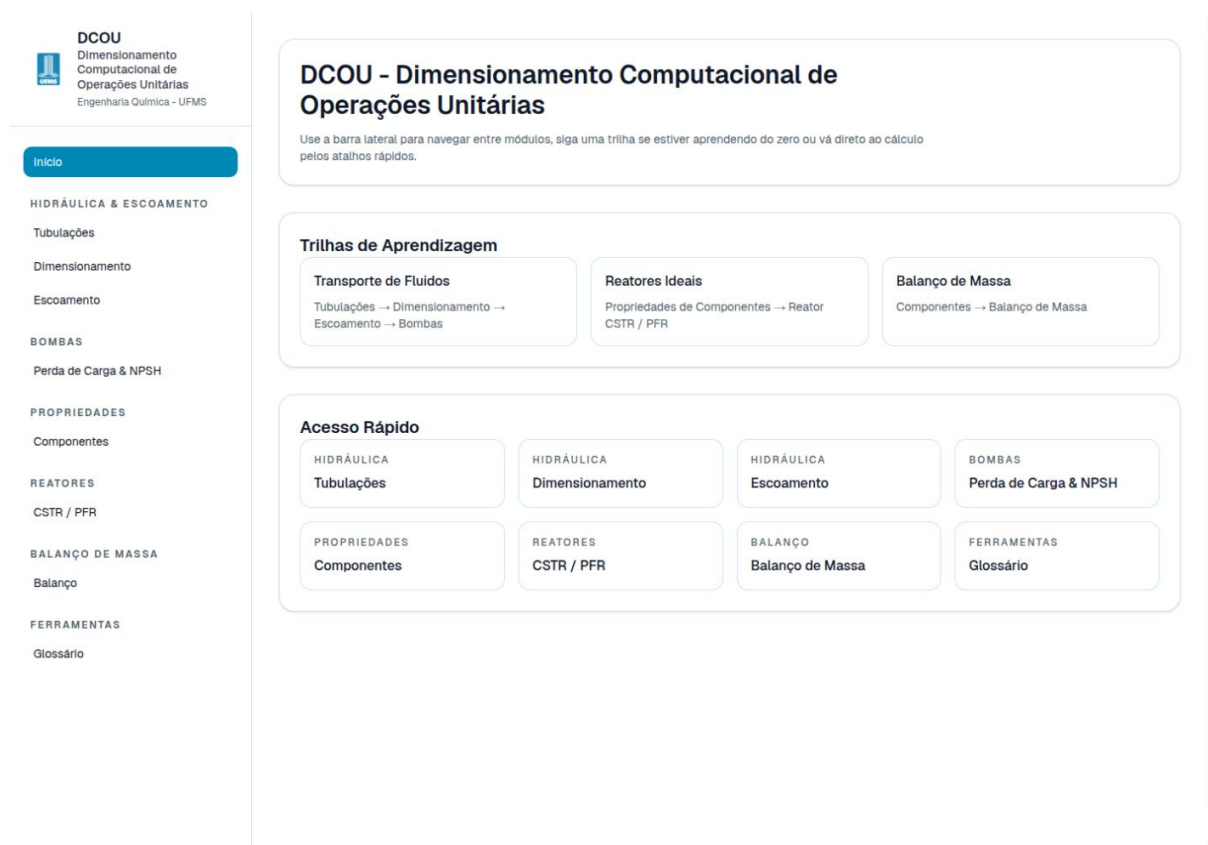
Essa estratégia possui valor pedagógico relevante por dois motivos. Primeiro, reduz a barreira inicial para o estudante, que passa a observar um caso funcional antes de montar um cenário próprio do zero. Segundo, preserva a rastreabilidade entre entradas, equações e visualizações, pois os exemplos não contornam as rotinas de cálculo: eles apenas selecionam condições iniciais representativas, como um caso de transição em número de *Reynolds*, um sistema com margem de *NPSH* explícita ou uma separação binária que justifique a

construção de um diagrama de *McCabe-Thiele*.

4.5.5 Trilhas de Aprendizagem

A página inicial organiza o uso dos módulos em três trilhas de aprendizagem, que sugerem uma sequência didática de estudo: **Transporte de Fluidos** (Tubulações → Dimensionamento → Escoamento → Bombas); **Reatores Ideais** (Componentes → Reatores *CSTR/PFR*); e **Balanço de Massa** (Componentes → Balanço). As trilhas orientam o estudante a percorrer os módulos em uma ordem coerente com a construção dos conceitos, em vez de utilizá-los de forma isolada. No desenho atual da interface, essas trilhas convivem com cartões de acesso rápido para os módulos principais, reforçando a intenção de uso de cada área antes da abertura do cálculo.

Figura 31 – Trilhas de aprendizagem apresentadas na página inicial



Fonte: Elaboração própria (2026).

5 Resultados e Discussões

O desenvolvimento do *software* demonstrou que é possível integrar conceitos fundamentais da engenharia química com tecnologias modernas de programação para produzir uma ferramenta acessível, modular e capaz de automatizar cálculos recorrentes da área.

Do ponto de vista funcional, o *backend* em *FastAPI* apresentou desempenho satisfatório, respondendo rapidamente aos cálculos mesmo em operações envolvendo chamadas reiteradas ao módulo de propriedades termodinâmicas (*CoolProp*) ou a rotinas numéricas como métodos iterativos de Brent e integrações do *SciPy*.

A validação de entradas pelo *Pydantic* mostrou-se fundamental para evitar inconsistências numéricas e garantir segurança nos cálculos, reduzindo significativamente erros comuns como unidades incorretas, tipos inválidos ou parâmetros ausentes.

No *frontend*, o uso de *React*, *TypeScript* e *Vite*, associado a *Tailwind CSS*, primitivas acessíveis de *@base-ui/react*, componentes compostos no padrão *shadcn*, *React Router* e elementos visuais próprios, resultou em uma interface modular, responsiva e adequada ao propósito educacional do sistema. Essa arquitetura favoreceu a separação entre apresentação, estado e integração com a *API*, permitindo encapsular cada categoria de cálculo em componentes e serviços tipados. Bibliotecas como *KaTeX*, *Lucide React* e *Sonner* complementam a interface com renderização matemática, ícones contextuais e notificações discretas. Além disso, a criação de uma camada compartilhada para grades, eixos, marcadores e rótulos numéricos padronizou parte relevante das visualizações em *SVG*, o que melhora a consistência gráfica e simplifica a evolução dos componentes. Na interface consolidada, a navegação evidencia o papel pedagógico de cada área, com uma *home* orientada por trilhas, atalhos diretos para os módulos e indicadores visuais de processo que reforçam a interpretação do regime de escoamento.

Tabela 22 – Síntese das evidências de validação dos módulos implementados

Módulo	Validação aplicada	Referência	Resultado observado	Limitação
Componentes e propriedades	Consultas de componentes, propriedades da água, propriedades críticas e mistura binária, com conferência manual.	Valores de referência da literatura e cálculos manuais (SMITH et al., 2018; POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001).	Para a água a 300 K, obtiveram-se $\rho = 996,56 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 8,54 \cdot 10^{-4} \text{ Pa s}$; também foram reproduzidos $T_c = 647,1 \text{ K}$ e $P_c = 22,06 \text{ MPa}$.	Misturas dependem do modelo termodinâmico e das propriedades disponíveis.
Tubulações e acessórios	Conferência de acessórios, materiais, <i>schedules</i> , diâmetros e especificações, incluindo comprimento equivalente.	Tabelas de referência e cálculos manuais (PERRY; GREEN, 2007).	Para SCH40, 45,0 mm foi elevado a 50,0 mm; dois cotovelos de raio longo produziram $L_{eq} = 1,6 \text{ m}$ e $h_f = 8,2882 \text{ m}$.	Ausência de aço inoxidável SCH 10S/40S validado.
Escoamento e perdas de carga	Verificação de Reynolds, Darcy–Weisbach, Colebrook–White, Swamee–Jain, Haaland e diâmetros hidráulicos por cálculos manuais.	Literatura de mecânica dos fluidos e correlações publicadas (WHITE, 2018; COLEBROOK, 1939; SWAMEE; JAIN, 1976; HAALAND, 1983).	Os resultados de Reynolds e das perdas de carga foram concordantes, com desvio de 0,00%; os fatores de atrito e as geometrias hidráulicas também coincidiram com os cálculos de referência.	Casos incompressíveis e geometrias selecionadas; não substitui validação experimental.
Bombas	Aplicação de Bernoulli para $NPSH_a$ e altura manométrica, conferida por cálculo manual.	Literatura de bombas e mecânica dos fluidos (FOX; PRITCHARD; MCDONALD, 2011; KARASSIK et al., 2008).	O $NPSH_a$ calculado foi 16,24 m, com desvio inferior a 0,01%, e a altura manométrica foi 25,48 m, com desvio de 0,00%.	Validação escalar, sem ensaios experimentais ou curva de fabricante.
Reatores ideais	Cálculos de projeto e desempenho para CSTR, PFR e PFR com reciclo, comparados com integrações manuais.	Fundamentos de engenharia das reações (FOGLER, 2009; LEVENSPIEL, 2000).	Foram reproduzidos os volumes de 1,1333, 0,4605 e 0,8318 m^3 ; o cálculo inverso do CSTR retornou conversão de 0,8500.	Cinética de primeira ordem, fase líquida isotérmica e casos idealizados.
Balanco de massa	Balancos global e por componente em misturador, reator de conversão e divisor de corrente, com cálculo manual.	Princípios de conservação e estequiometria (FELDER; ROUSSEAU, 2005).	O misturador retornou 200 kg/h e frações 0,50; o reator retornou 60 e 40 mol/s; o divisor retornou 20 e 80 kg/h, preservando a composição.	Escopo concentrado em operações ideais, reação simples e configurações selecionadas.

Fonte: Autoria própria (2026).

Os testes por código e os exemplos executáveis funcionam como evidência de regressão, enquanto os cálculos manuais e os valores de referência da literatura delimitam o domínio de validade dos resultados, sem deslocar o detalhamento metodológico apresentado no capítulo de validação.

Para além da automação de cálculos, a incorporação de recursos didáticos consolidou o DCOU como um ambiente de ensino, e não apenas como uma calculadora. As explicações teóricas embutidas em cada módulo, o glossário técnico, os cenários de exemplo providos pela *API* e o conjunto ampliado de visualizações interativas aproximam o resultado numérico do conceito que o fundamenta, ao apresentar o comportamento dos fenômenos físicos de forma contextualizada. O uso de contratos tipados para exemplos e gráficos também mostrou-se eficaz para manter coerência entre cálculo, apresentação e interpretação pedagógica em diferentes módulos.

A comparação dos resultados obtidos com valores de referência da literatura e com cálculos manuais evidenciou concordância adequada para os módulos implementados e validados, englobando cálculos de *Reynolds*, perdas de carga, seleção de diâmetros e estimativas de *NPSH*, apresentando diferenças mínimas em relação aos valores calculados. Para reatores *CSTR* e *PFR*, os valores de conversão e volume mostraram-se consistentes com soluções de Fogler e Levenspiel, reforçando a confiabilidade das integrações numéricas.

Embora o *software* esteja plenamente funcional para os módulos desenvolvidos, observou-se que o sistema ainda pode ser expandido significativamente. A ausência de módulos como trocadores de calor, destiladores, absorção, secagem e operações com múltiplas reações limita sua aplicabilidade em projetos de maior complexidade. Do ponto de vista de usabilidade e de maturidade funcional, futuras melhorias incluem exportação de relatórios, ampliação de gráficos especializados e integração com bancos de dados externos de propriedades físicas, de modo a ampliar o alcance técnico da ferramenta.

Ainda assim, o objetivo de criar uma ferramenta precisa, acessível, gratuita e colaborativa foi alcançado. O fato de o projeto ser *open-source* torna natural que seu ciclo de evolução dependa da contribuição da comunidade acadêmica e profissional, que poderá incluir novos módulos, otimizar algoritmos e expandir a base de dados.

6 Guia de Uso da Ferramenta

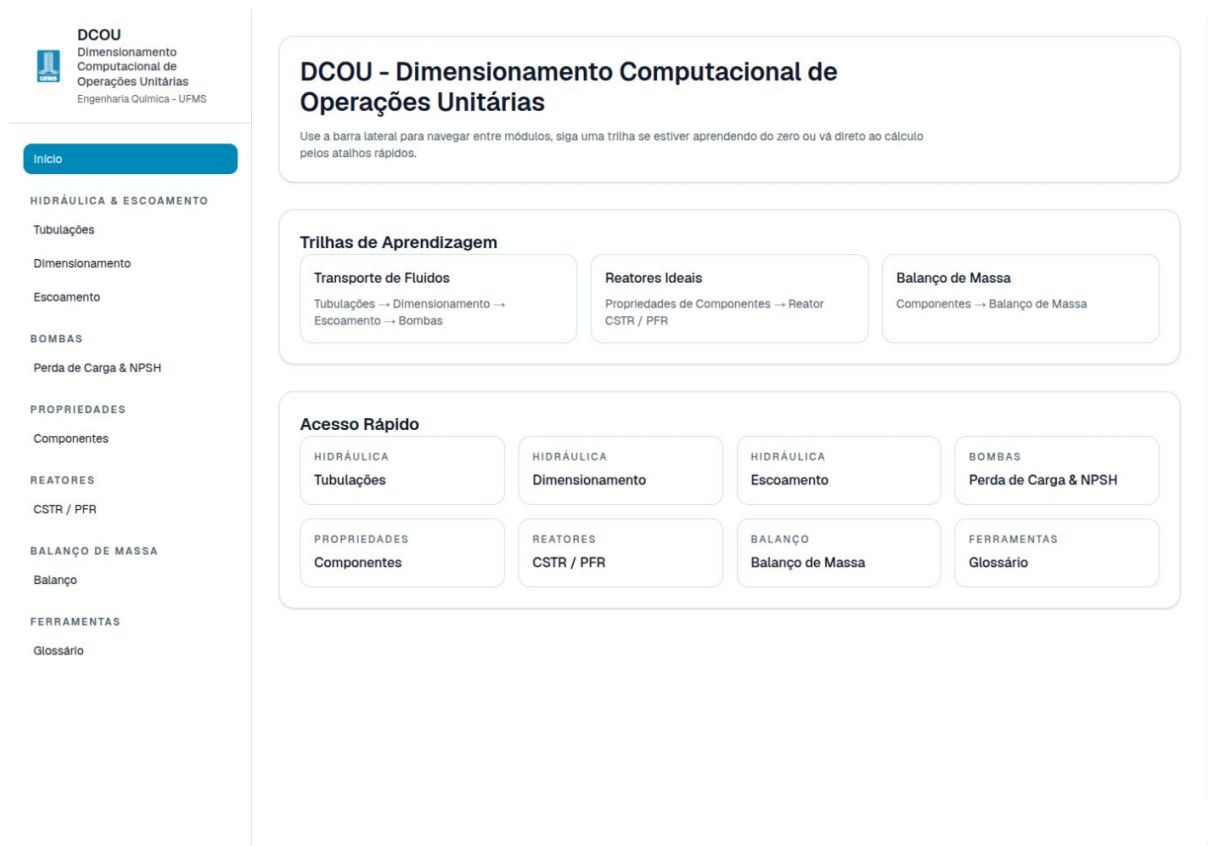
Este capítulo apresenta um roteiro de uso do DCOU para discentes e docentes de Engenharia Química. A finalidade é mostrar, em sequência, como acessar a aplicação, navegar entre os módulos, carregar exemplos, executar cálculos e interpretar resultados numéricos e gráficos. As telas foram verificadas na aplicação local em ambiente desktop, no endereço *web* local na data de 13 de julho de 2026, podendo haver diferenças visuais e de funcionalidade conforme atualização no servidor produtivo.

Em todos os módulos que disponibilizam o botão **Carregar exemplo**, as capturas deste capítulo foram feitas a partir dos exemplos fornecidos pela própria ferramenta. Quando a tela possuía botão de execução, como **Calcular Reynolds**, **Calcular CSTR**, **Calcular PFR** ou **Calcular Balanço de Massa**, o cálculo foi executado antes da captura. Dessa forma, o fluxo documentado reproduz o uso real esperado: carregar um caso coerente, observar as entradas, executar o cálculo e interpretar o resultado.

6.1 Acesso e Tela Inicial

O acesso local é feito abrindo o navegador e informando a URL [<http://localhost:5173>](http://localhost:5173). Em produção, o endereço atualmente utilizado é [<https://tcc.joao.baza.dev.br>](https://tcc.joao.baza.dev.br). A tela inicial apresenta a identidade do DCOU, o menu lateral de módulos, as trilhas de aprendizagem e os cartões de acesso rápido. Para uma atividade de ensino, recomenda-se escolher a trilha compatível com o conteúdo da aula: transporte de fluidos, reatores ideais ou balanço de massa.

Figura 32 – Tela inicial com trilhas de aprendizagem e cartões de acesso rápido



Fonte: Elaboração própria (2026).

Na leitura didática, o estudante deve observar que a aplicação não é organizada como uma calculadora única. Cada módulo representa uma etapa conceitual: catálogos de dados, dimensionamento, análise de regime, propriedades, reatores, balanço e glossário. Para o docente, essa organização permite conduzir uma aula por sequência de fenômenos, em vez de apresentar apenas resultados isolados.

6.2 Tubulações e Acessórios

O módulo **Tubulações** reúne dados usados posteriormente nos cálculos hidráulicos. Na aba **Composições**, o exemplo carregado seleciona uma composição de tubulação e mostra suas propriedades catalogadas. Essa tela deve ser usada antes de problemas de perda de carga para discutir como material e rugosidade afetam a modelagem.

Figura 33 – Aba Composições do módulo de tubulações com exemplo carregado

DCOU
Dimensionamento
Computacional de
Operações Unitárias
Engenharia Química - UFMS

Início

HIDRÁULICA & ESCOAMENTO

Tubulações

Dimensionamento

Escoamento

BOMBAS

Perda de Carga & NPSH

PROPRIEDADES

Componentes

REATORRES

CSTR / PFR

BALANÇO DE MASSA

Balanço

FERRAMENTAS

Glossário

Tubulações e Acessórios

Consulte materiais, schedules, diâmetros nominais e conexões usadas nos módulos hidráulicos da aplicação.

Sucesso
Exemplo carregado com sucesso.

Composições Schedules e Diâmetros Conexões

Composições

Como funciona - Composições

Composição

Aço galvanizado

RESULTADO

Propriedade	Valor	Unidade
Nome	Aço galvanizado	-
Descrição	Tubulação de aço revestida com zinco para prevenir corrosão.	-
Aplicações	Sistemas de água potável, sprinklers e irrigação.	-
Roughness	0,16	mm
Roughness Coefficient	125	-

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Schedules e Diâmetros**, o usuário observa diâmetros nominais e dimensões comerciais. Essa etapa conecta o diâmetro calculado pelo modelo matemático com a seleção real de tubulações disponíveis.

Figura 34 – Aba Schedules e Diâmetros com diâmetro comercial do exemplo

DCOU
Dimensionamento
Computacional de
Operações Unitárias
Engenharia Química - UFMS

Início

HIDRÁULICA & ESCOAMENTO

Tubulações

Dimensionamento

Escoamento

BOMBAS

Perda de Carga & NPSH

PROPRIEDADES

Componentes

REATORES

CSTR / PFR

BALANÇO DE MASSA

Balanço

FERRAMENTAS

Glossário

Tubulações e Acessórios

Consulte materiais, schedules, diâmetros nominais e conexões usadas nos módulos hidráulicos da aplicação.

Sucesso
Exemplo carregado com sucesso.

Composições **Schedules e Diâmetros** Conexões

Schedules e Diâmetros

Como funciona - Schedules e Diâmetros

Schedule

Schedule 40

Schedule padrão utilizado na maioria das aplicações comerciais e industriais.

Diâmetro nominal

125 mm

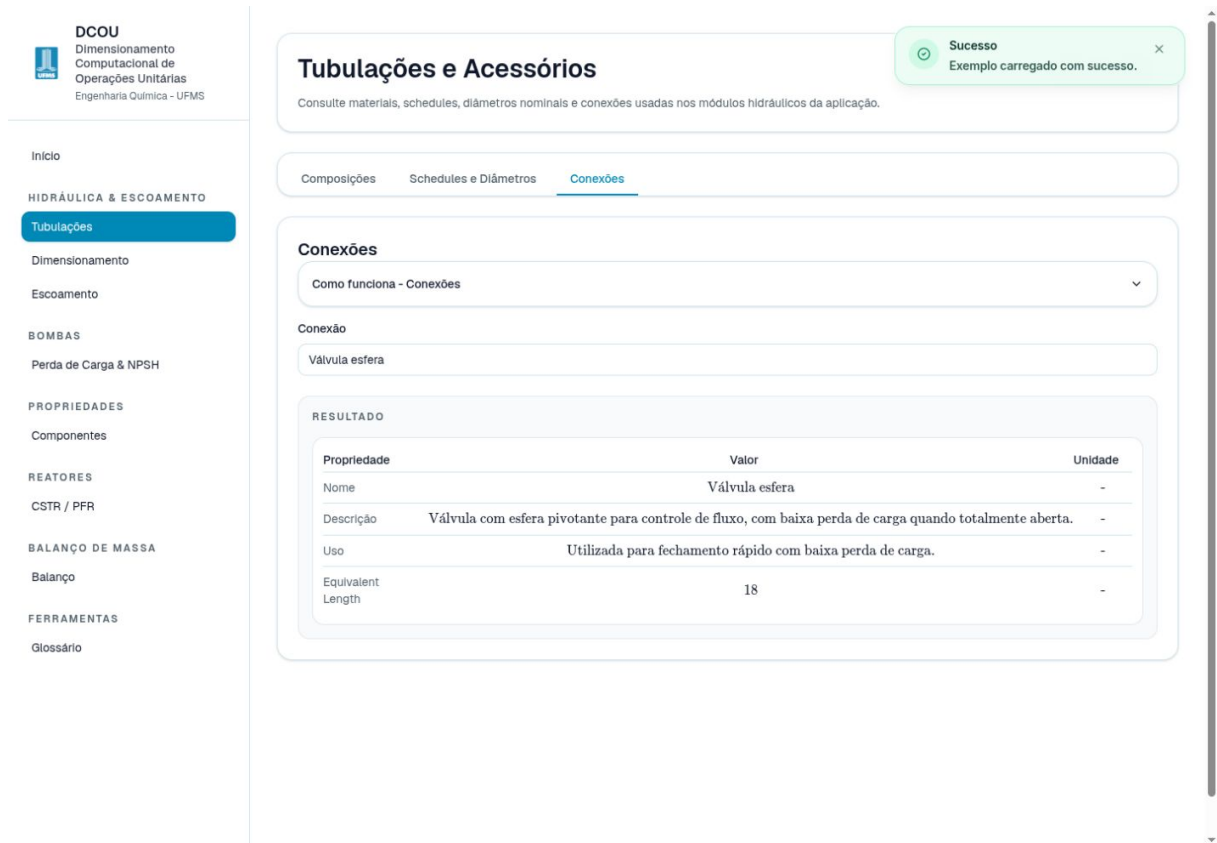
RESULTADO

Propriedade	Valor	Unidade
External Diameter	141,3	mm
Thickness	6,55	mm
Weight	21,77	kg/m
Max Pressure	$5,75712 \times 10^6$	Pa

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Conexões**, o exemplo mostra o cadastro de acessórios e seus coeficientes. A interpretação esperada é que válvulas, cotovelos, entradas e saídas de tanque não são detalhes secundários: eles entram diretamente no cálculo de perdas localizadas.

Figura 35 – Aba Conexões com acessório carregado pelo exemplo



DCOU
Dimensionamento
Computacional de
Operações Unitárias
Engenharia Química - UFMS

Início

HIDRÁULICA & ESCOAMENTO

Tubulações

Dimensionamento

Escoamento

BOMBAS

Perda de Carga & NPSH

PROPRIEDADES

Componentes

REATORES

CSTR / PFR

BALANÇO DE MASSA

Balanço

FERRAMENTAS

Glossário

Tubulações e Acessórios

Consulte materiais, schedules, diâmetros nominais e conexões usadas nos módulos hidráulicos da aplicação.

Composições Schedules e Diâmetros **Conexões**

Conexões

Como funciona - Conexões

Conexão

Válvula esfera

RESULTADO

Propriedade	Valor	Unidade
Nome	Válvula esfera	-
Descrição	Válvula com esfera pivotante para controle de fluxo, com baixa perda de carga quando totalmente aberta.	-
Uso	Utilizada para fechamento rápido com baixa perda de carga.	-
Equivalent Length	18	-

Fonte: Elaboração própria (2026).

6.3 Dimensionamento

No módulo **Dimensionamento**, a aba **Diâmetro Calculado** solicita vazão volumétrica e velocidade de projeto. Com o exemplo carregado, o estudante pode acionar **Calcular diâmetro** e observar a tabela de resultado. A pergunta didática central é: o valor calculado é um requisito hidráulico, mas a escolha final ainda precisa ser compatibilizada com um diâmetro comercial.

Figura 36 – Aba Diâmetro Calculado com exemplo executado

Dimensionamento de Tubulação

Calcule o diâmetro hidráulico a partir da vazão e da velocidade de projeto e, em seguida, selecione o próximo diâmetro comercial do schedule adotado.

Diâmetro Calculado | Diâmetro Real

Diâmetro Calculado

Como funciona - Cálculo de Diâmetro

Vazão (m³/s)
0,0166667

Velocidade de projeto (m/s)
1,5

Calcular diâmetro | Limpar campos

RESULTADO

Propriedade	Valor	Unidade
Diâmetro calculado	118,94173	mm

Perfil de Velocidade - Duto Circular

Turbulento - $Re = 1,78413 \times 10^5$ | Perfil estimado para água a 20 °C - D = 118,94173 mm - V = 1,5 m/s

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Diâmetro Real**, a ferramenta compara o diâmetro calculado com o schedule selecionado e retorna o diâmetro comercial imediatamente aplicável. O discente deve observar a diferença entre cálculo contínuo e seleção discreta de catálogo.

Figura 37 – Aba Diâmetro Real com seleção de diâmetro comercial

Dimensionamento de Tubulação

Calcule o diâmetro hidráulico a partir da vazão e da velocidade de projeto e, em seguida, selecione o próximo diâmetro comercial do schedule adotado.

Sucesso
Exemplo carregado com sucesso.

Diâmetro Calculado **Diâmetro Real**

Diâmetro Real

Como funciona - Diametro Nominal Comercial

Diâmetro calculado (mm)

118,94

Schedule

Schedule 40

Schedule padrão utilizado na maioria das aplicações comerciais e industriais.

Obter diâmetro real

RESULTADO		
Propriedade	Valor	Unidade
Diâmetro real	125	mm

Fonte: Elaboração própria (2026).

6.4 Escoamento Interno

O módulo **Escoamento** começa pela aba **Número de Reynolds**. Depois de carregar o exemplo e executar o cálculo, a tela mostra o valor de Reynolds e a régua de regime. A interpretação não deve parar no número: o marcador indica se o escoamento é laminar, de transição ou turbulento, afetando as correlações posteriores.

Figura 38 – Aba Número de Reynolds com resultado e régua de regime

Dimensionamento
Escoamento
BOMBAS
Perda de Carga & NPSH
PROPRIEDADES
Componentes
REATORES
CSTR / PFR
BALANÇO DE MASSA
Balanço
FERRAMENTAS
Glossário

Número de Reynolds

Sucesso
Exemplo carregado com sucesso.

Como funciona - Número de Reynolds

Dímetro característico (mm)
13,843

Velocidade média (m/s)
3,923

Densidade (kg/m³)
0,65688

Viscosidade dinâmica (Pa.s)
0,000011963

Viscosidade cinemática (m²/s)

Calcular Reynolds

RESULTADO

Propriedade	Valor	Unidade
Número de Reynolds	3186,10467	-

Regime do escoamento

Escala linear de Reynolds de 100 a 10.000. O marcador mostra a posição atual.

Transição

Re = 3186,1

Transição

Laminar

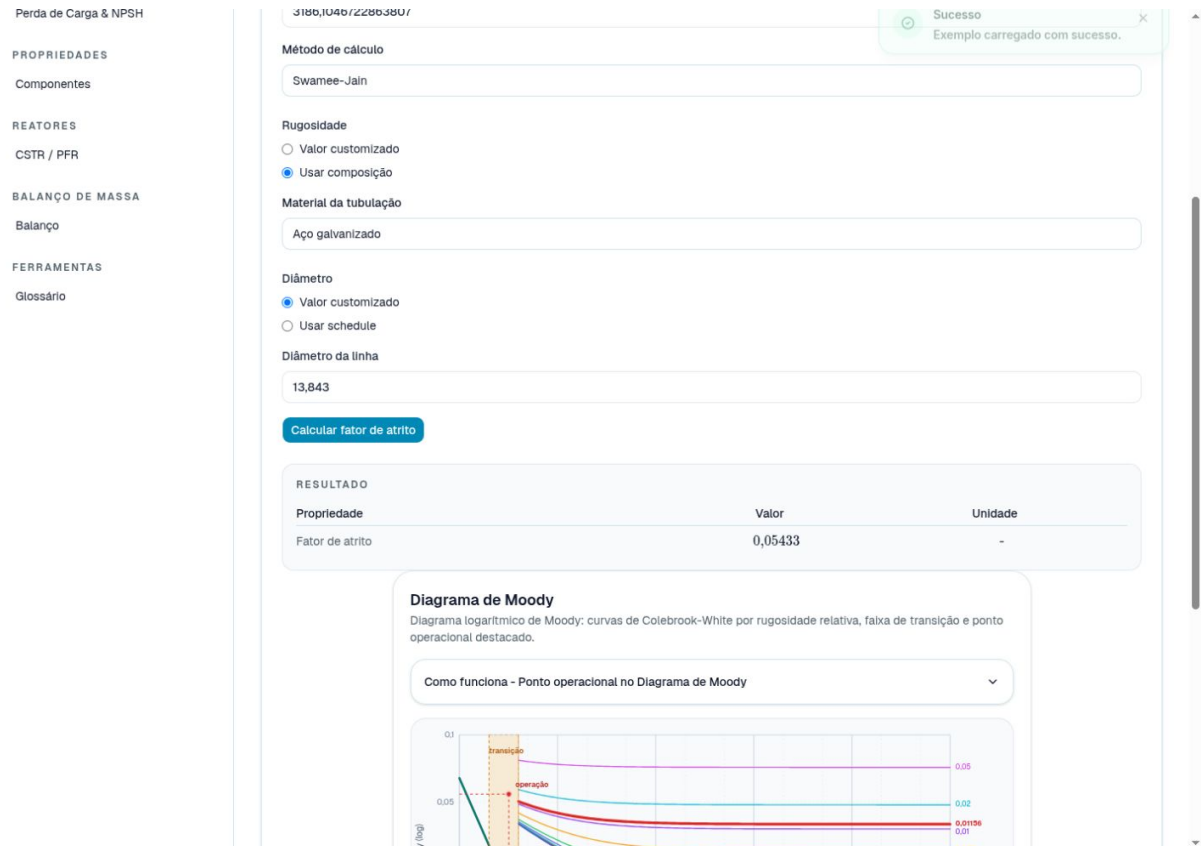
Transição

Turbulento

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Fator de Atrito**, o exemplo calcula o fator de Darcy e exibe o diagrama de *Moody*. Essa tela deve ser usada para discutir a influência simultânea do número de Reynolds e da rugosidade relativa.

Figura 39 – Aba Fator de Atrito com diagrama de Moody



Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Diâmetro Hidráulico**, o exemplo evidencia que geometrias não circulares também podem ser tratadas por uma dimensão característica. O estudante deve observar a relação entre geometria, área molhada e perímetro molhado.

Figura 40 – Aba Diâmetro Hidráulico com pré-visualização geométrica

Interface da ferramenta para cálculo de Diâmetro Hidráulico.

Menu Lateral:

- Início
- HIDRÁULICA & ESCOAMENTO
 - Tubulações
 - Dimensionamento
 - Escoamento**
- BOMBAS
 - Perda de Carga & NPSH
- PROPRIEDADES
 - Componentes
- REATORES
 - CSTR / PFR
- BALANÇO DE MASSA
 - Balanço
- FERRAMENTAS
 - Glossário

Topo da Aba:

- Número de Reynolds
- Fator de Atrito
- Diâmetro Hidráulico**

Diâmetro Hidráulico

Como funciona - Diâmetro Hidráulico

Forma geométrica

Canal circular

Diâmetro (m)

0,125

Altura (m)

0,08333

Calcular diâmetro hidráulico

Pré-visualização geométrica

Segmento circular preenchido, com D, h e R destacados.

D = 0,125 h = 0,08333 R = 0,0625

RESULTADO

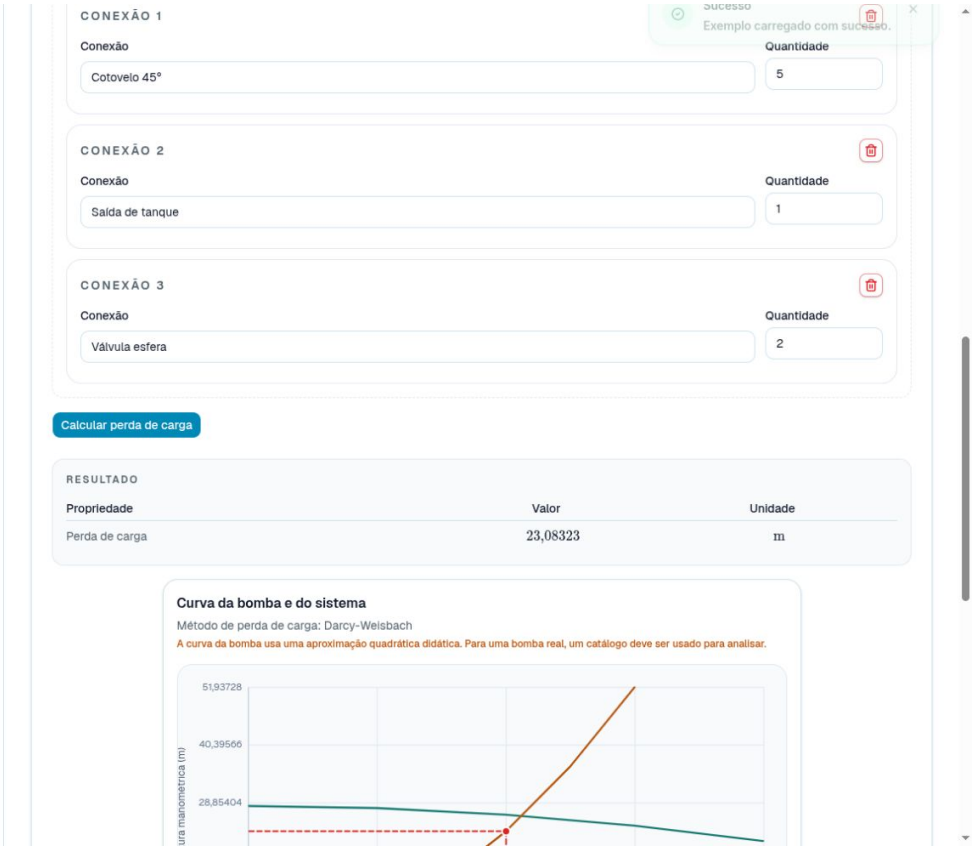
Propriedade	Valor	Unidade
Diâmetro hidráulico	0,09746	m

Fonte: Elaboração própria (2026).

6.5 Perda de Carga e Bombas

Na aba **Perda de Carga**, o exemplo combina comprimento da tubulação, diâmetro, vazão, material, Reynolds, método de fator de atrito e acessórios. Ao executar o cálculo, a ferramenta retorna a perda de carga e apresenta curvas didáticas do sistema. O docente pode explorar a tela alterando material, vazão ou conexões e observando o deslocamento do ponto de operação.

Figura 41 – Aba Perda de Carga com exemplo e curva do sistema



Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **NPSH Disponível**, o exemplo calcula a margem entre o *NPSH* disponível e o requerido. O ponto de atenção para o estudante é a cavitação: valores próximos ao limite indicam risco operacional e exigem revisão das condições de sucção.

Figura 42 – Aba NPSH Disponível com indicador de margem

Pressão de vapor (kgf/cm²)

0,023

Massa específica (kg/m³)

1000

Perda de carga na sucção (m)

10

Velocidade na sucção (m/s)

1,5

Elevação do manômetro (m)

3

NPSHr opcional (m)

3

Calcular NPSH disponível

Propriedade	Valor	Unidade
NPSH disponível	3,21472	m

Margem de NPSH

Risco de cavitação — NPSHd insuficiente X

NPSHr NPSHd

Margem segura

How it works - Margem de NPSH

NPSHd abaixo da margem segura; há risco de cavitação.

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Altura Manométrica**, a ferramenta separa os termos de energia associados a pressão, elevação, velocidade e perdas. Essa decomposição ajuda a relacionar a equação de Bernoulli estendida com a seleção de bomba.

Figura 43 – Aba Altura Manométrica com decomposição dos termos de energia

REATORRES

CSTR / PFR

BALANÇO DE MASSA

Balanço

FERRAMENTAS

Glossário

Elevação 1 (m)
0

Elevação 2 (m)
5

Velocidade 1 (m/s)
0

Velocidade 2 (m/s)
3

Massa específica do fluido (kg/m³)
1000

Perda de carga total (m)
23,08

Calcular altura manométrica

RESULTADO

Propriedade	Valor	Unidade
Altura manométrica	28,53887	m

Decomposição

H total = 28,53887 m

PARCELA	VALOR	PORCENTAGEM
$\Delta P / (\rho g)$	0	0%
Δz	5	17,51996%
$\Delta V^2 / (2g)$	0,45887	1,60789%
$-\dot{h}_f$	-23,08	80,87215%

Fonte: Elaboração própria (2026).

6.6 Propriedades de Componentes

O módulo **Componentes** reúne consultas termodinâmicas e visualizações de equilíbrio. Na aba **Propriedades Críticas**, o exemplo recupera propriedades críticas do fluido selecionado. Essa tela é útil para introduzir limites de validade e regiões próximas ao ponto crítico.

Figura 44 – Aba Propriedades Críticas com fluido do exemplo

DCOU
Dimensionamento
Computacional de
Operações Unitárias
Engenharia Química - UFMS

Início

HIDRÁULICA & ESCOAMENTO

Tubulações

Dimensionamento

Escoamento

BOMBAS

Perda de Carga & NPSH

PROPRIEDADES

Componentes

REATORRES

CSTR / PFR

BALANÇO DE MASSA

Balanço

FERRAMENTAS

Glossário

Propriedades de Componentes

Consulte propriedades críticas, fluidos puros, misturas e equilíbrio binário usando os serviços já expostos pela API.

Propriedades Críticas Fluido Puro Misturas Equilíbrio Binário Envelope de Fase

Propriedades Críticas

Como funciona - Propriedades Críticas

Fluido crítico

Air

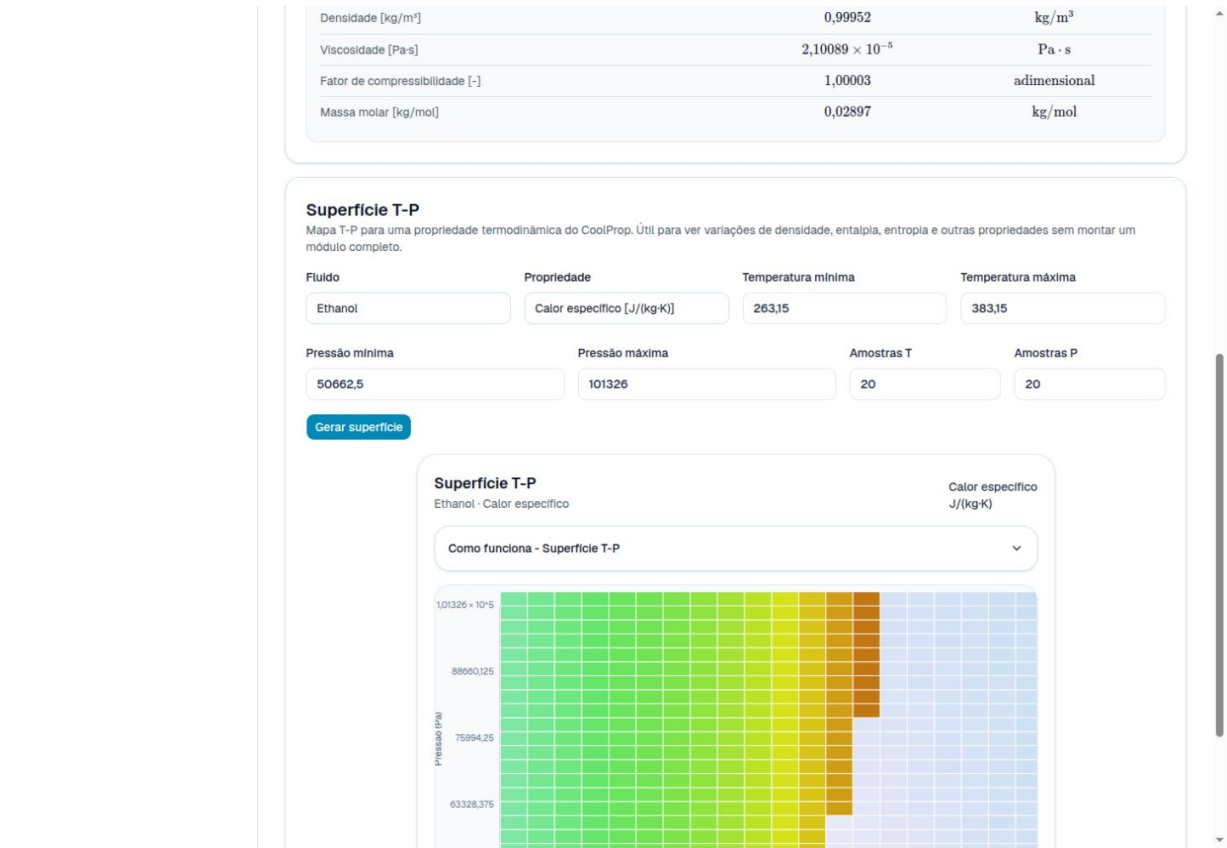
Obter propriedades críticas

Propriedade	Valor	Unidade
Temperatura crítica	132,5306	K
Pressão crítica	3,786 × 10 ⁶	Pa
Densidade crítica	342,68456	kg/m ³
Temperatura do ponto triplo	59,75	K
Pressão do ponto triplo	5264,18107	Pa

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Fluido Puro**, o exemplo mostra propriedades de estado e, na mesma tela, a superfície T - P . O discente deve observar que propriedades como massa específica, entalpia e entropia variam com temperatura e pressão, não apenas com uma variável isolada.

Figura 45 – Aba Fluido Puro com propriedades e superfície T-P



Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Misturas**, a ferramenta calcula propriedades de mistura e apresenta a visualização ternária quando aplicável. Essa tela apoia discussões sobre composição, normalização de frações e leitura de sistemas multicomponentes.

Figura 46 – Aba Misturas com exemplo e diagrama ternário

Methanol

Fração molar 3
0,01

Remover fluido

Adicionar fluido

Temperatura da mistura
303,15

Pressão da mistura
101325

Propriedades da mistura

Densidade [kg/m³] x Massa molar [kg/mol] x Viscosidade [Pa·s] x Calor específico [J/(kg·K)] x Seleccione propriedades

Calcular mistura

COMPOSIÇÃO DA MISTURA

Water: 0.7 Ethanol: 0.29 Methanol: 0.01

RESULTADO

Propriedade	Valor	Unidade
Densidade [kg/m³]	842,63486	kg/m³
Massa molar [kg/mol]	0,02629	kg/mol
Viscosidade [Pa·s]	$9,14928 \times 10^{-4}$	Pa · s
Calor específico [J/(kg·K)]	3900,39747	joule/K/kg

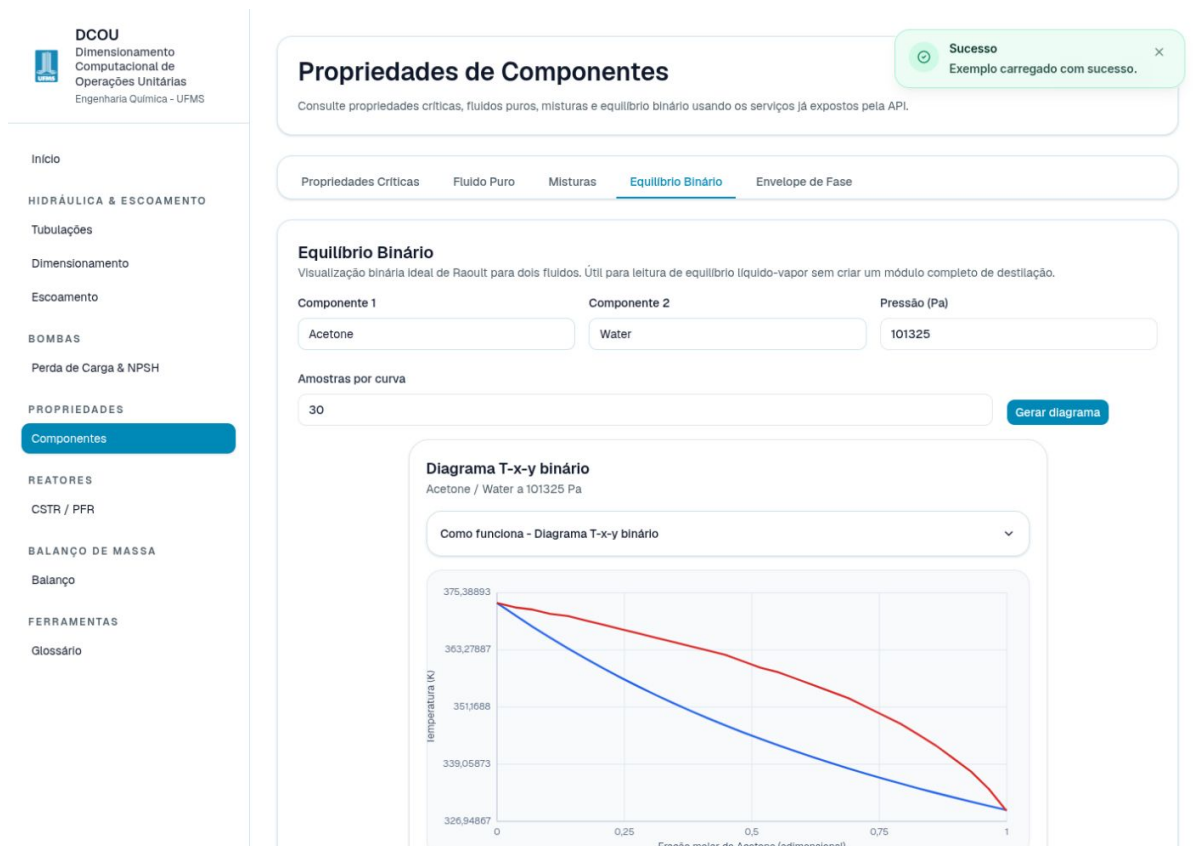
Diagrama Ternário

Diagrama de uma corrente de três componentes. Útil para misturas e separações multicomponentes com adicionar um fluido novo.

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Equilíbrio Binário**, o exemplo gera o diagrama de equilíbrio líquido-vapor. O estudante deve acompanhar as curvas de bolha e orvalho e relacioná-las às composições das fases em equilíbrio.

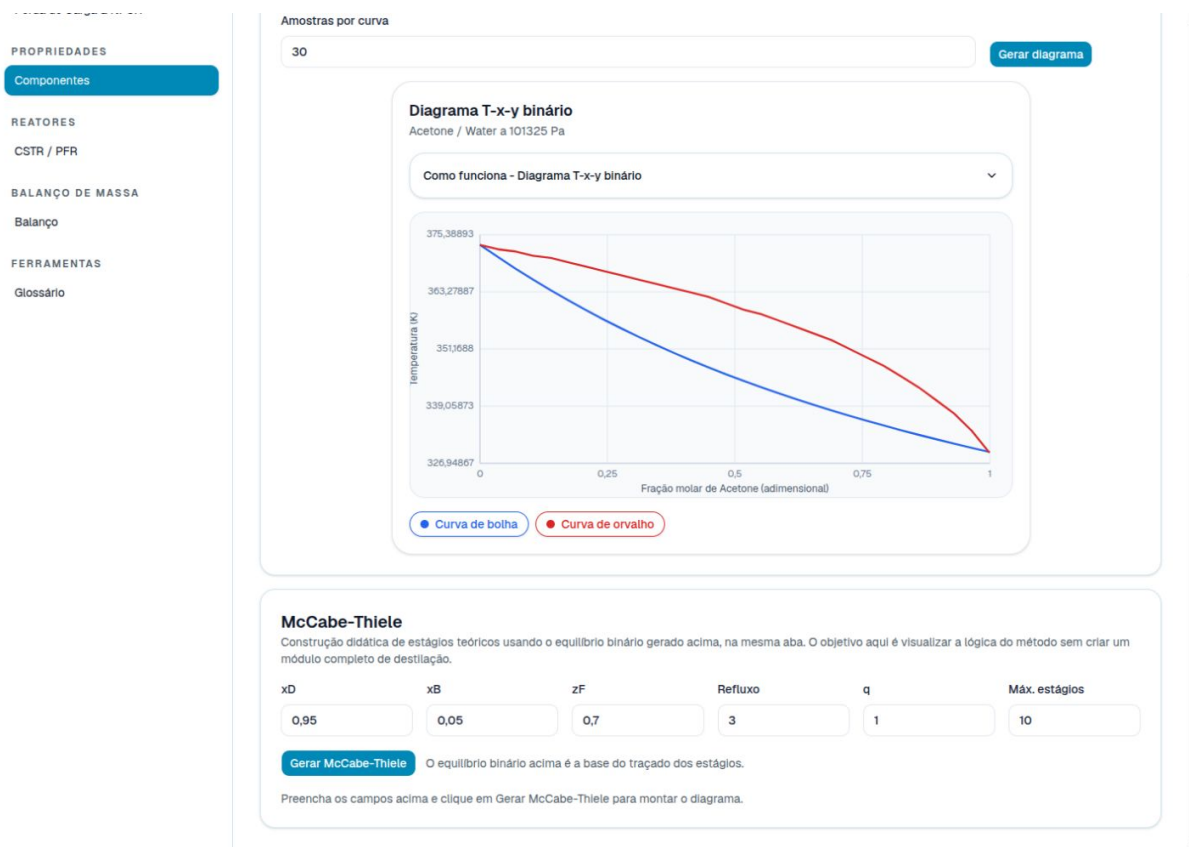
Figura 47 – Aba Equilíbrio Binário com diagrama T-x-y



Fonte: Elaboração própria (2026).

Na mesma área de equilíbrio binário, o bloco **McCabe-Thiele** permite visualizar estágios teóricos de separação. A construção gráfica torna visíveis a curva de equilíbrio, linhas operacionais e degraus de separação.

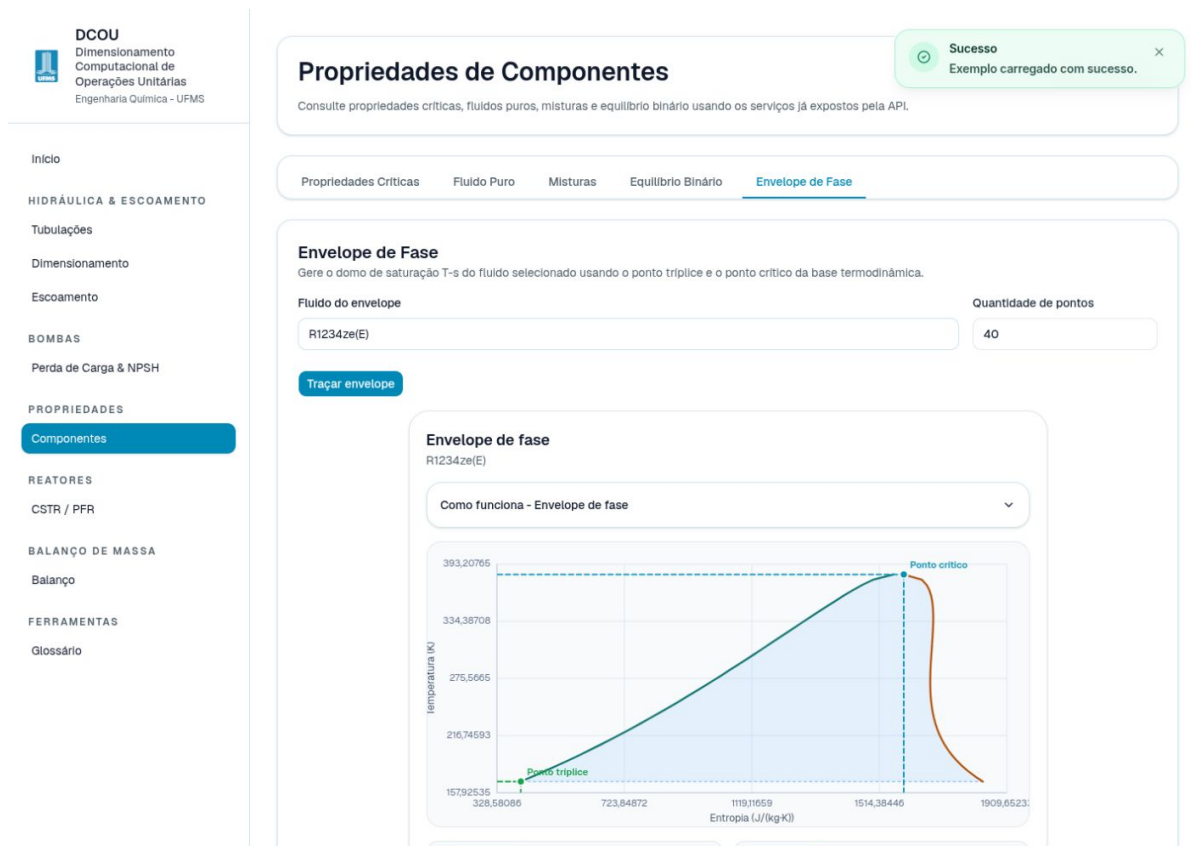
Figura 48 – Bloco McCabe-Thiele gerado a partir do exemplo binário



Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Envelope de Fase**, o exemplo apresenta a fronteira entre regiões de fase. Essa tela é adequada para discutir ponto crítico, mudança de fase e limites operacionais de um componente.

Figura 49 – Aba Envelope de Fase com curva gerada pelo exemplo



Fonte: Elaboração própria (2026).

6.7 Reatores Ideais

O módulo **CSTR / PFR** deve ser usado após carregar o exemplo, pois o caso preenche componentes, estequiometria, ordem de reação e condições operacionais. Na aba **CSTR**, a ferramenta calcula conversão, taxa de reação, concentrações de saída, tempo de residência e volume. O discente deve observar que, no CSTR, a composição de saída representa a composição no interior do reator perfeitamente misturado.

Figura 50 – Aba CSTR com exemplo calculado

COMPONENTE 1

Componente

Water

Estado

Líquido

Vazão de entrada (m³/s)

1,2

Concentração molar (mol/m³)

5000

Coef. estequiométrico

-1

Ordem de reação

1

COMPONENTE 2

Componente

Ethanol

Estado

Líquido

Vazão de entrada (m³/s)

0

Concentração molar (mol/m³)

0

Coef. estequiométrico

1

Ordem de reação

0,5

Calcular CSTR

RESULTADO CSTR

Propriedade	Valor	Unidade
Conversão	0,36885	-
Taxa de reação	737,69344	mol/m³/s
Concentrações na saída [Water]	2103,84426	mol/m³
Concentrações na saída [Ethanol]	1229,48907	mol/m³
Fator de diluição	0	-
Taxa molar na entrada (limitante)	6000	mol/s
Vazão de saída	1,2	m³/s
Tempo de residência	2,5	s
Volume	3	m³

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **PFR**, o exemplo calcula o reator tubular e apresenta resultados numéricos e perfis associados. A comparação com o CSTR deve enfatizar que o PFR descreve uma evolução espacial das variáveis, e não uma mistura perfeitamente uniforme.

Figura 51 – Aba PFR com exemplo calculado

5000 -1 1

COMPONENTE 2

Componente: Ethanol Estado: Líquido Vazão de entrada (m³/s): 0

Concentração molar (mol/m³): 0 Coef. estequiométrico: 1 Ordem de reação: 0,5

Calcular PFR

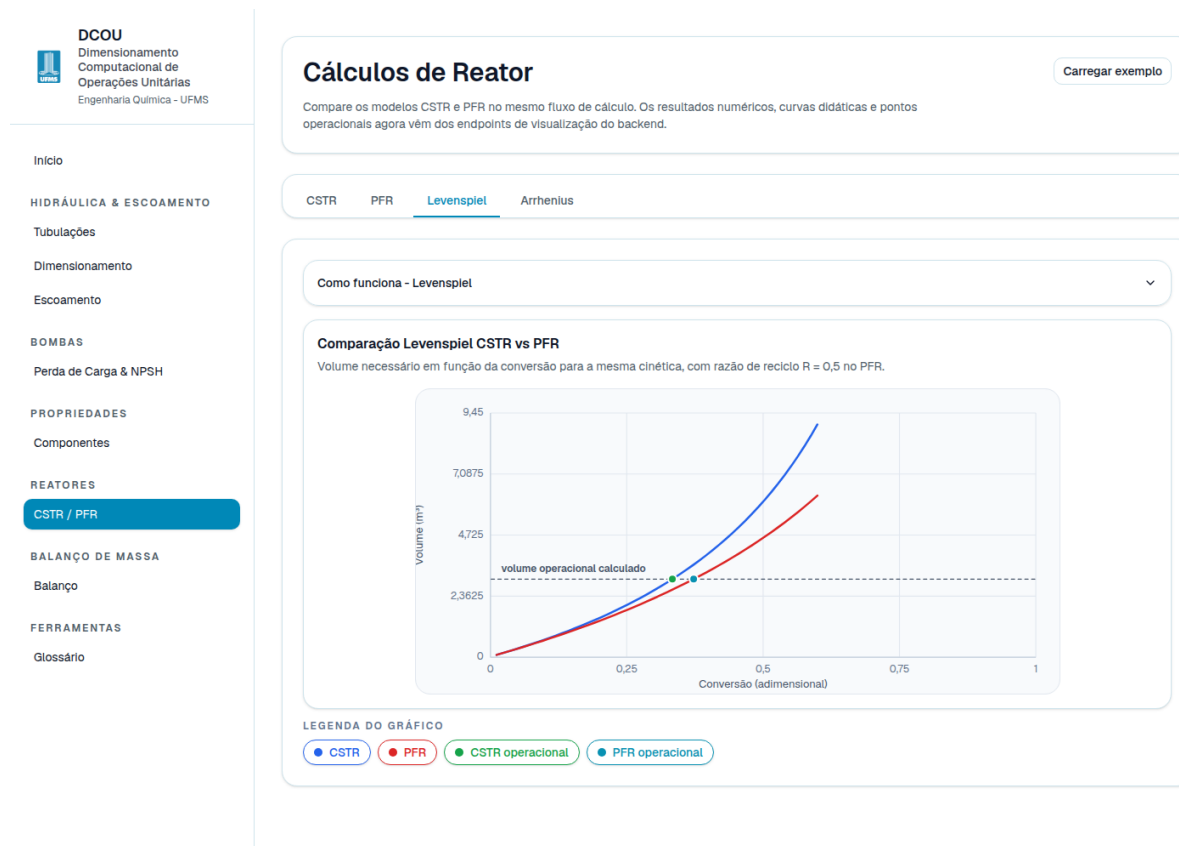
Calculando PFR...

Propriedade	Valor	Unidade
Conversão	0,19994	-
Taxa molar na entrada (limitante)	6000	mol/s
Vazão de saída	1,2	m³/s
Volume	3	m³
Taxa de reação	688,47703	mol/m³/s
Concentrações na saída [Water]	2666,87321	mol/m³
Concentrações na saída [Ethanol]	666,46012	mol/m³
Fator de diluição (1 + ε·P·O·T)	1,5	-
Tempo de residência	2,5	s
Fator de diluição	0	-

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Levenspiel**, a aplicação compara graficamente CSTR e PFR para o mesmo caso. Essa tela ajuda a discutir por que áreas sob a curva se relacionam ao volume requerido e como a geometria do gráfico expressa a equação de projeto.

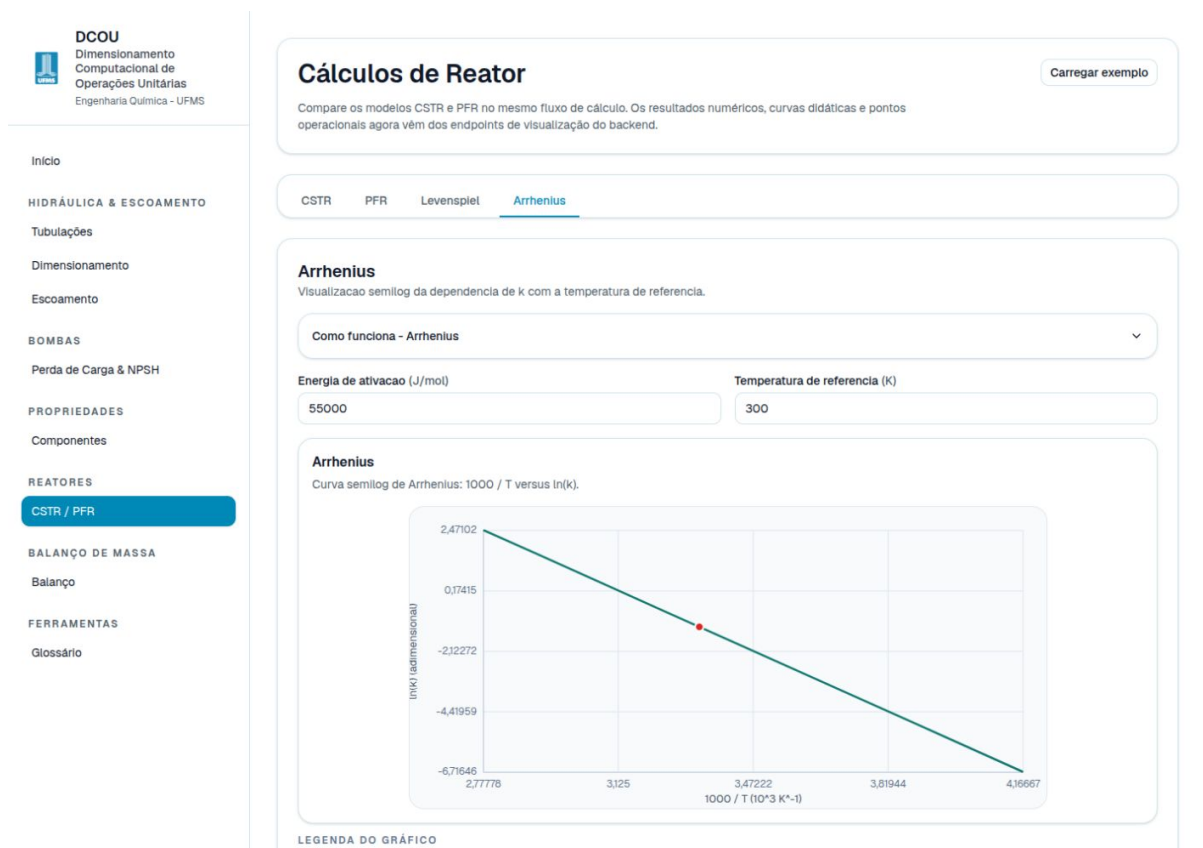
Figura 52 – Aba Levenspiel comparando CSTR e PFR



Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Arrhenius**, o exemplo mostra a dependência da constante cinética com a temperatura. O objetivo didático é destacar que variações térmicas podem alterar fortemente a velocidade de reação.

Figura 53 – Aba Arrhenius com curva semilogarítmica do exemplo

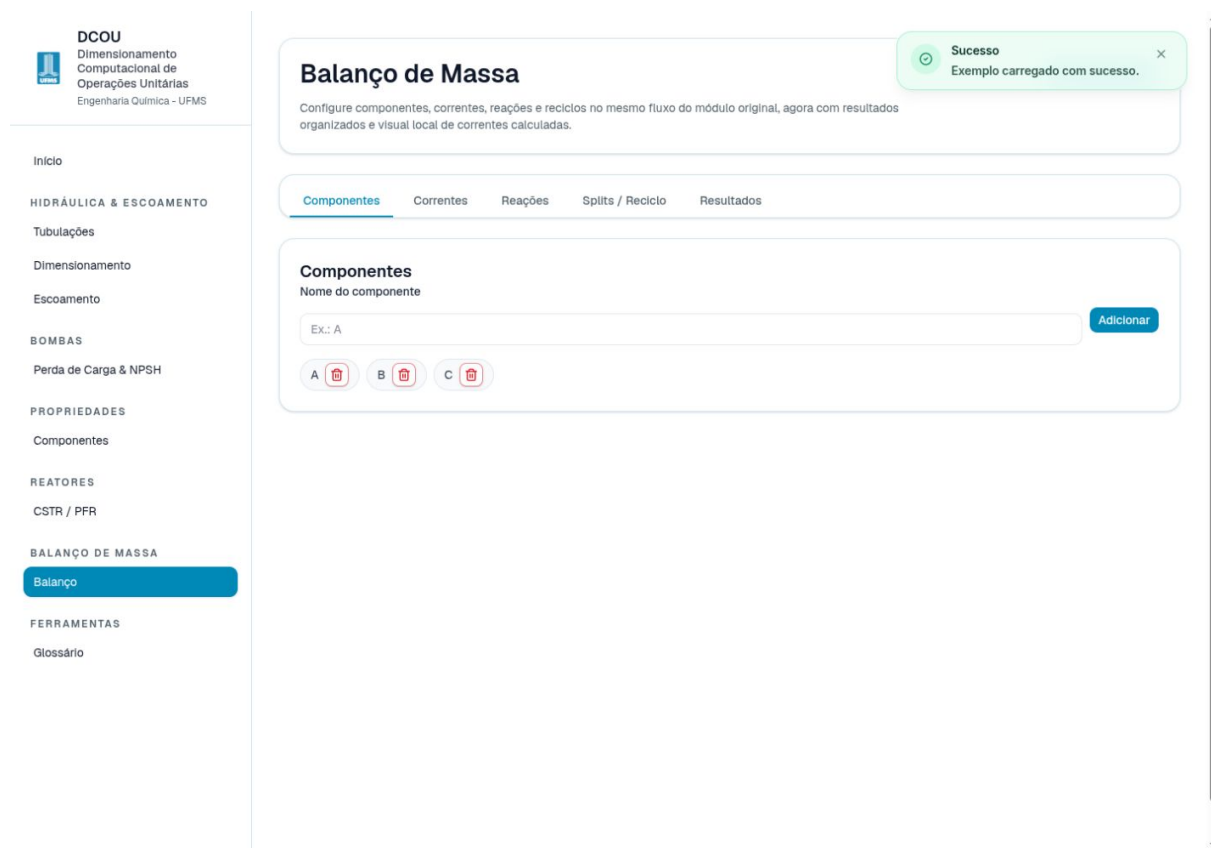


Fonte: Elaboração própria (2026).

6.8 Balanço de Massa

O módulo **Balanço de Massa** é organizado como um fluxo de montagem do problema. A aba **Componentes** define as espécies presentes. Essa etapa deve ser conferida antes de montar correntes e reações, pois todas as demais abas dependem dessa lista.

Figura 54 – Aba Componentes do balanço de massa com exemplo carregado



Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Correntes**, o exemplo lista entradas e saídas com vazões e composições. O estudante deve verificar sentido da corrente, vazão total e composição antes de avançar.

Figura 55 – Aba Correntes com alimentação, produto e reciclo do exemplo

DCOU
Dimensionamento
Computacional de
Operações Unitárias
Engenharia Química - UFMS

Início

HIDRÁULICA & ESCOAMENTO

Tubulações

Dimensionamento

Escoamento

BOMBAS

Perda de Carga & NPSH

PROPRIEDADES

Componentes

REATORRES

CSTR / PFR

BALANÇO DE MASSA

Balanço

FERRAMENTAS

Glossário

Balanço de Massa

Configure componentes, correntes, reações e reciclos no mesmo fluxo do módulo original, agora com resultados organizados e visual local de correntes calculadas.

Componentes **Correntes** Reações Splits / Reciclo Resultados

Correntes Adicionar Corrente

CORRENTE 1 ✕

Nome: Alimentacao_Fresca Direção: Entrada Vazão: 100

A: 0,8 B: 0,2 C: 0

CORRENTE 2 ✕

Nome: Saida_Do_Reator Direção: Saida Vazão:

A: B: C:

CORRENTE 3 ✕

Nome: Reciclo Direção: Entrada Vazão:

A: B: C:

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Reações**, a ferramenta organiza estequiometria e conversão. O docente pode usar essa tela para reforçar a diferença entre balanços com e sem reação química.

Figura 56 – Aba Reações com estequiometria do exemplo

Balanço de Massa

Configure componentes, correntes, reações e reciclos no mesmo fluxo do módulo original, agora com resultados organizados e visual local de correntes calculadas.

Componentes Correntes **Reações** Splits / Reciclo Resultados

Reações Adicionar Reação

REAÇÃO 1

Componente-chave: A Conversão (0-1): 0,7

A	B	C
-1		1

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Splits / Reciclo**, o exemplo configura divisão de correntes e reciclo. Essa tela ajuda a discutir fluxos internos do processo, que normalmente dificultam a resolução manual.

Figura 57 – Aba Splits / Reciclo com configuração do exemplo

DCOU
Dimensionamento
Computacional de
Operações Unitárias
Engenharia Química - UFMS

Início

HIDRÁULICA & ESCOAMENTO

Tubulações

Dimensionamento

Escoamento

BOMBAS

Perda de Carga & NPSH

PROPRIEDADES

Componentes

REATORES

CSTR / PFR

BALANÇO DE MASSA

Balanço

FERRAMENTAS

Glossário

Balanço de Massa

Sucesso
Exemplo carregado com sucesso.

Configure componentes, correntes, reações e reciclos no mesmo fluxo do módulo original, agora com resultados organizados e visual local de correntes calculadas.

Componentes Correntes Reações **Splits / Reciclo** Resultados

Splits / Reciclo Adicionar Split

SPLIT 1

Corrente pal
Saída_Do_Reator

Corrente de reciclo
Reciclo

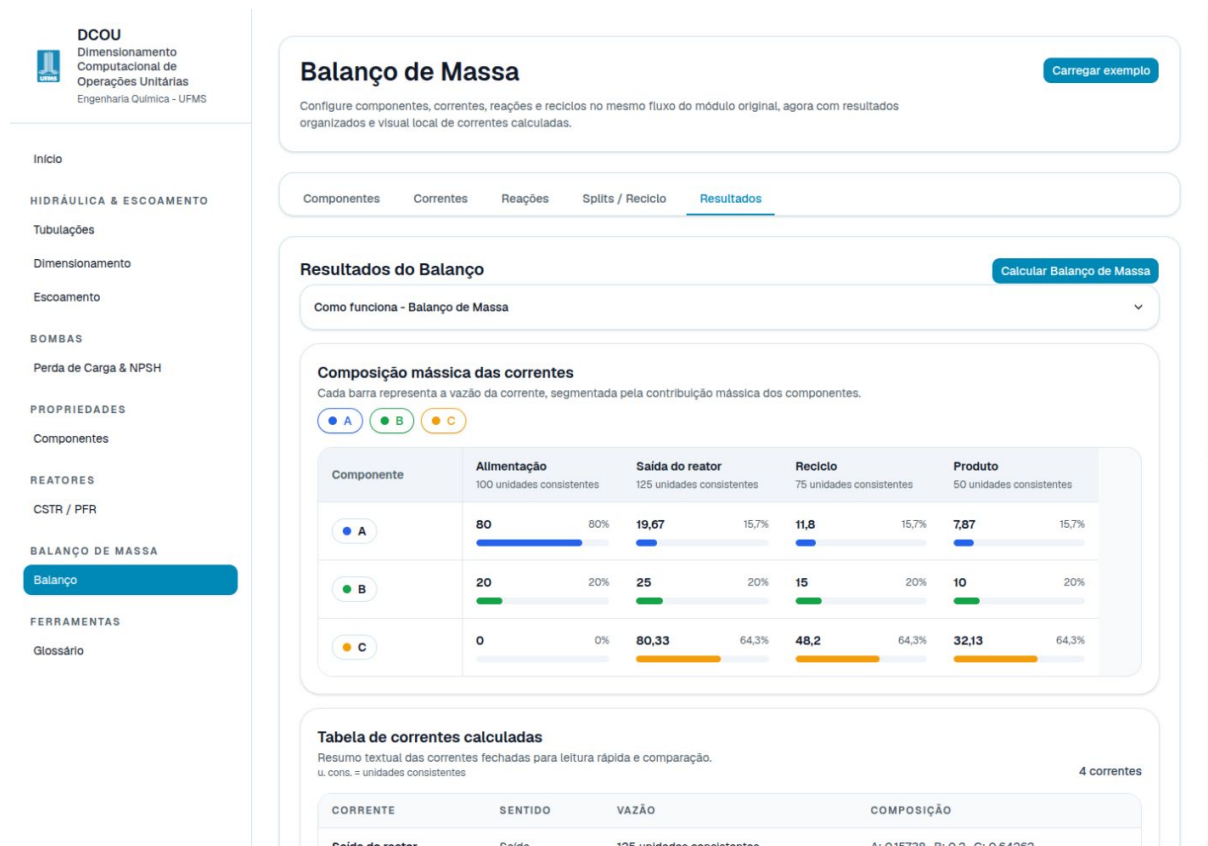
Corrente de purga
Produto

Fração de reciclo (0-1)
0,6

Fonte: Elaboração própria (2026).

Na aba **Resultados**, após executar **Calcular Balanço de Massa**, a ferramenta apresenta composição mássica das correntes, tabela de correntes calculadas e comparações detalhadas. A interpretação recomendada é verificar se as vazões fecham e se as frações dos componentes fazem sentido físico.

Figura 58 – Aba Resultados do balanço de massa após cálculo do exemplo

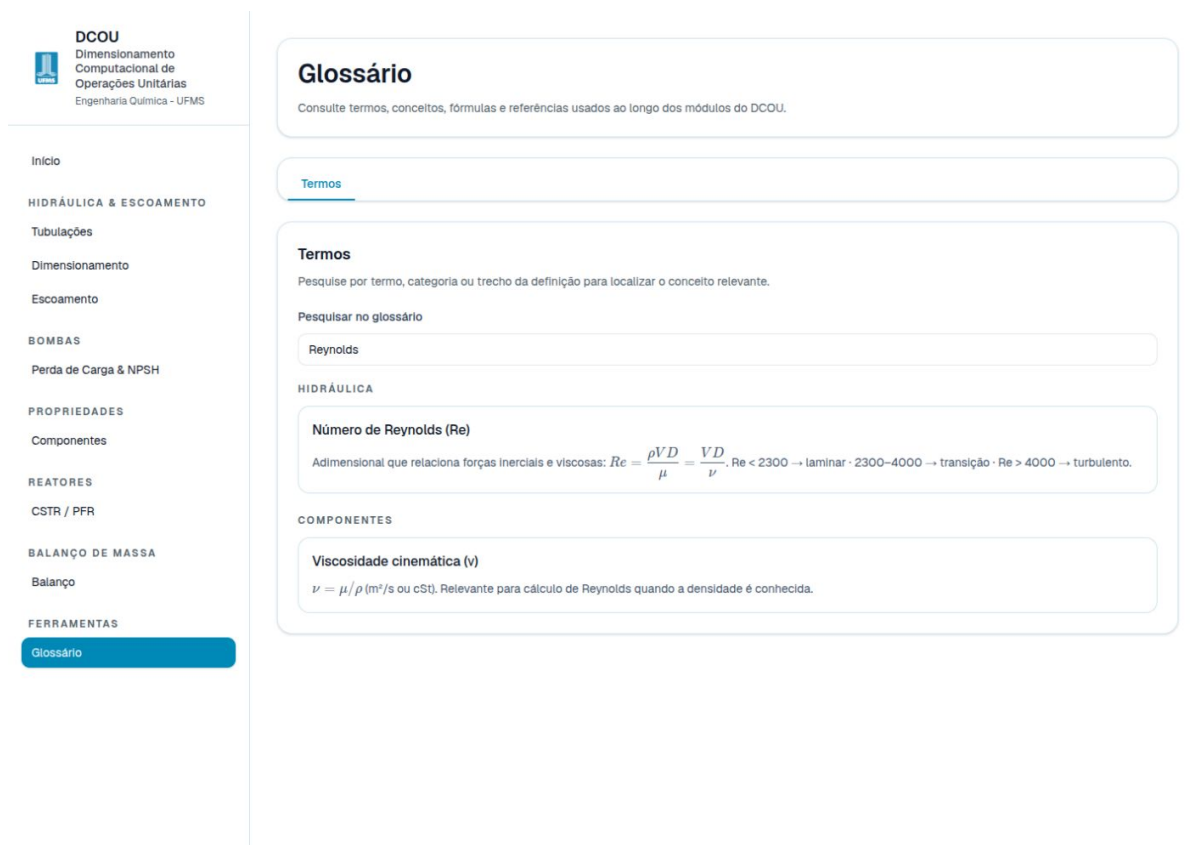


Fonte: Elaboração própria (2026).

6.9 Glossário e Validações

O **Glossário** apoia a leitura dos resultados durante o uso dos módulos. No exemplo de busca por *Reynolds*, a ferramenta filtra o termo principal e conceitos relacionados, como viscosidade cinemática. O estudante deve usar essa tela quando precisar revisar rapidamente definições e equações.

Figura 59 – Glossário com busca por Reynolds



Fonte: Elaboração própria (2026).

Além da consulta conceitual, a ferramenta possui validações de entrada. Campos obrigatórios, valores numéricos incompatíveis e combinações incompletas de parâmetros geram notificações, evitando que o usuário interprete ausência de dado como resultado físico. Em atividades didáticas, recomenda-se carregar o exemplo, executar o cálculo, registrar o resultado e então alterar apenas uma variável por vez. Essa prática permite comparar cenários mantendo rastreável a relação entre hipótese, entrada, equação e visualização.

Como sequência mínima de uso em aula ou estudo dirigido, recomenda-se:

1. abrir a tela inicial e escolher a trilha ou o módulo de interesse;
2. carregar o exemplo disponível no módulo;
3. conferir unidades, hipóteses e parâmetros preenchidos;
4. executar o cálculo ou geração gráfica da aba atual;
5. interpretar a tabela de resultados junto das visualizações;
6. navegar para as abas relacionadas, como CSTR/PFR, Levenspiel, Arrhenius, NPSH ou resultados de balanço;
7. alterar uma variável por vez para testar cenários;

8. consultar o glossário e os painéis **Como funciona** sempre que a interpretação física precisar ser reforçada.

Assim, o DCOU pode ser usado como ambiente de exploração guiada. O valor didático está em manter, no mesmo fluxo, entradas, catálogos, cálculos, visualizações, validações e explicações conceituais.

7 Conclusões

O presente trabalho alcançou com êxito o objetivo geral de desenvolver o DCOU, um *software web open-source* que reúne, em uma mesma plataforma, o dimensionamento de operações unitárias em engenharia química e uma camada de recursos didáticos. Do lado do cálculo, foram implementados módulos de tubulações, escoamento, bombas, propriedades termo-físicas, reatores *CSTR* e *PFR* e balanços de massa. Foi demonstrada precisão e utilidade prática, validadas com referências consolidadas da literatura, sobre uma arquitetura cliente-servidor moderna e acessível via *API*. Do lado didático, o glossário técnico, as explicações teóricas embutidas, os cenários de exemplo e a biblioteca de visualizações interativas consolidaram a ferramenta como apoio efetivo ao aprendizado conceitual.

A ferramenta desenvolvida preenche uma lacuna no acesso a simulações didáticas e gratuitas, especialmente em contextos acadêmicos e para profissionais autônomos, ao reunir a automação de cálculos rotineiros com recursos que promovem ativamente o aprendizado conceitual. O caráter *open-source* é fundamental para sua completude futura, permitindo contribuições comunitárias que expandam o repertório de módulos e aprimorem sua robustez, tornando-o uma plataforma escalável para o ensino e a prática da engenharia química na era da Indústria 4.0.

Como perspectivas, sugere-se a adição de funcionalidades como simulações multifásicas, otimização de processos, integração com bancos de dados remotos e compatibilidade com o padrão de interface CAPE-OPEN, consolidando o *software* como uma alternativa viável a ferramentas proprietárias.

Referências

ALVES, G. N. et al. Uso do software aberto dwsim na simulação de biorrefinarias: desafios e aprendizados. In: *Anais do XXX Congresso de Iniciação Científica da UNICAMP*. Campinas: UNICAMP, 2022.

ASPEN TECHNOLOGY. *Aspen HYSYS*. Bedford, MA, 2026. Acesso em: 8 jul. 2026. Disponível em: <<https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-hysys>>.

ASPEN TECHNOLOGY. *Aspen Plus*. Bedford, MA, 2026. Acesso em: 8 jul. 2026. Disponível em: <<https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-plus>>.

BELL, I. H. et al. Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library coolprop. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, ACS Publications, v. 53, n. 6, p. 2498–2508, 2014.

COLEBROOK, C. F. Turbulent flow in pipes, with particular reference to the transition region between the smooth and rough pipe laws. *Journal of the Institution of Civil Engineers*, Thomas Telford-ICE Virtual Library, v. 11, n. 4, p. 133–156, 1939.

DATACOR. *CHEMCAD Process Simulation Software*. Florham Park, NJ, 2026. Acesso em: 8 jul. 2026. Disponível em: <<https://www.datacor.com/products/chemcad>>.

DEVOE, H. *Thermodynamics and Chemistry*. 2. ed. [s.n.], 2014. Version 5. Acesso em: 8 jul. 2026. Disponível em: <<https://www2.chem.umd.edu/thermobook/>>.

DWSIM. *DWSIM – Open-Source Chemical Process Simulator*. 2026. Acesso em: 8 jul. 2026. Disponível em: <<https://dwsim.org/>>.

FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W. *Princípios Elementares dos Processos Químicos*. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2005.

FOGLER, H. S. *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.

FOX, R. W.; PRITCHARD, P. J.; MCDONALD, A. T. *Fox and McDonald's Introduction to Fluid Mechanics*. 8. ed. Hoboken: Wiley, 2011.

HAALAND, S. E. Simple and explicit formulas for the friction factor in turbulent pipe flow. *Journal of Fluids Engineering*, American Society of Mechanical Engineers, v. 105, n. 1, p. 89–90, 1983.

KARASSIK, I. J. et al. (Ed.). *Pump Handbook*. 4. ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

LEVENSPIEL, O. *Engenharia das Reações Químicas*. 3. ed. São Paulo: Edgard Blücher, 2000.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. *Unit Operations of Chemical Engineering*. 7. ed. New York: McGraw-Hill, 2005.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. (Ed.). *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 8. ed. New York: McGraw-Hill, 2007.

- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. *The Properties of Gases and Liquids*. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 2001.
- SEADER, J. D.; HENLEY, E. J.; ROPER, D. K. *Separation Process Principles: With Applications Using Process Simulators*. 4. ed. Hoboken: Wiley, 2016.
- SMITH, J. M. et al. *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. 8. ed. New York: McGraw-Hill Education, 2018.
- SWAMEE, P. K.; JAIN, A. K. Explicit equations for pipe-flow problems. *Journal of the Hydraulics Division*, ASCE, v. 102, n. 5, p. 657–664, 1976.
- WHITE, F. M. *Mecânica dos Fluidos*. 8. ed. Porto Alegre: AMGH, 2018.