

# ALGORITMO DE SIMULAÇÃO EM PADRÃO *EXTREME PROGRAMMING* DA REAÇÃO DE DIÓXIDO DE CLORO ASSISTIDA POR RADIAÇÃO ULTRAVIOLETA E APLICADO PARA O TRATAMENTO DE ÁGUA

Lucas Scheres Firak<sup>1</sup>, Ricardo Cardoso de Oliveira<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Acadêmico do Curso de Licenciatura em Matemática, EAD, Universidade Cesumar - UNICESUMAR.

Bolsista PIBIC/ICETI-UniCesumar. lucasfirak@gmail.com

<sup>2</sup>Orientador, Doutor, Departamento de Matemática, UNICESUMAR. Pesquisador do Instituto Cesumar de  
Ciência, Tecnologia e Inovação – ICETI. ricardo.oliveira@unicesumar.edu.br

## RESUMO

Esta pesquisa possui como objetivo a modelagem e implementação de um algoritmo de simulação de uma conhecida reação química aplicada no tratamento de água para remoção de bactérias e pesticidas desde 1902 na Bélgica porém focada na remoção de pesticidas e fármacos os quais possuem recente preocupação. Neste meio, a utilização da Matemática Computacional apresenta-se como forma essencial para dedução e modelagem matemática para o problema. Utilizando o padrão de codificação *Extreme Programming* possui como um dos objetivos finais código documentado e de fácil reutilização. Com isso espera-se como objetivo final a criação de algoritmo de simulação e sua documentação para simulação de reação de cinético química de um projeto de doutorado de ciências ambientais sobre tratamento de água.

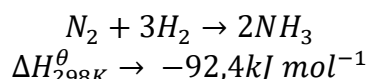
**PALAVRAS-CHAVE:** Simulação; Tratamento de Água; Engenharia de Software; Matemática Computacional.

## 1 INTRODUÇÃO

O estudo da velocidade de reações é chamado de cinética química. A velocidade de uma reação é a mudança na concentração de um reagente (ou produto) por unidade de tempo. Cada reação tem sua própria velocidade, que deve ser medida em laboratório. (BETTELHEIM; BROWN; CAMPBELL; FARREL, 2012)

Ao diferenciar os campos da Cinética com o da Termodinâmica, AVERY (1977) explica que não cabe a termodinâmica mostrar a velocidade de reação nem o mecanismo de troca de reagentes em produtos.

Como exemplo, tem-se o processo de Haber de obtenção de amoníaco a partir de nitrogênio e hidrogênio:



Sendo uma reação a qual libera energia, o princípio de Le Chatelier afirma que a produção de amoníaco será favorecida por alta pressão e baixa temperatura. Contudo a produção de amoníaco a 200°C é tão baixa que seu custo fica inviável para indústria.

Desprezando o princípio de Le Chatelier o processo de Haber tem sua melhor velocidade, na presença de catalizador, sobre alta pressão e temperatura média de 450°C (processo Haber-Bosch). Por esta maneira ainda AVERY (1977) mostra a importância da cinética para apresentar mecanismos com velocidade ótima.

Para otimizar uma reação composta de múltiplos reagentes, faz se necessário amplo conhecimento sobre a velocidade desta reação, tendo em vista que diversas concentrações de reagentes podem ser variáveis, o que resulta em diversas reações com velocidades distintas.

Segundo JAMHOUR, a Matemática computacional pode ser definida como uma área que une a matemática com a computação, visando resoluções de problemas complexos e desenvolvimento de modelos visando obtenção de soluções.

Tendo em vista o que o tempo necessário para calcular todas as possíveis velocidades de uma reação com múltiplos reagentes tende ao infinito, faz se necessário a

utilização de ferramentas computacionais cuja capacidade de cálculo e velocidade dos mesmos superam e muito os limites humanos.

A reação a ser estudada e otimizada neste projeto, dióxido de cloro assistida por radiação ultravioleta, é uma reação conhecida no tratamento de água para eliminação de bactérias (MEYER, 1994), porém neste trabalho visamos a remoção de como pesticidas e fármacos, os quais tem seus índices pouco ou nada regulamentados e presença em afluentes cada vez maiores (CARRA et al., 2020; SICHEL; GARCIA; ANDRE, 2011).

A título de exemplo, o Brasil possuía os limites de concentração de substâncias na água potável regulados pela PORTARIA Nº 2.914, de 12 DE DEZEMBRO DE 2011, a qual foi revogada e consolidada pela PRC nº 5, de 28 de setembro de 2017, Anexo XX, com, o mesmo texto o qual trata do limite permitido da concentração de pesticidas na água. Os limites estabelecidos na legislação brasileira diferem bastante dos encontrados nas normativas da União Européia - Commission Directive (EU) 2015/1787 of 6 October 2015. Entretanto, de maneira geral, tem se observado uma crescente preocupação com a presença destes e outros compostos na água de abastecimento, uma vez que a toxicidade destas substâncias já é conhecida e comprovada (SOUSA et al., 2018). Além disto, sabe-se que os processos convencionais de tratamento de água são incapazes de eliminar estas substâncias (DHODAPKAR; GANDHI, 2019; SOUSA et al., 2018). Logo, encontrar soluções para remoção destes compostos tornou-se uma prioridade, e a utilização da reação de dióxido de cloro assistida por radiação ultravioleta apresenta grande potencial para essa aplicação.

A utilização de Padrões de codificação (*Coding Standards*) tem seu objetivo principal em padronizar projetos de modo a possuírem mais qualidade, confiabilidade, facilidade de compreensão e reprodução assim como a reutilização de códigos.

Conhecida também como Reutilização de Software, A reutilização de códigos é um conceito amplamente estudado desde 1980 por Peter Freeman na universidade da Califórnia tendo duas conferências principais sobre o tema: ICSR – *International Conference on Software Reuse* e o SSR – *Symposium on Software Reusability*.

Nos tempos atuais, temos muitos códigos, análises e modelos feitos por excelentes pesquisadores em diversas áreas como Física, Química, Matemática, etc., contudo com pouco conhecimento de padrões de projeto, embora funcionais, os códigos ficam pouco ou nada reutilizáveis, com isso novas pesquisas, as quais poderiam utilizar ao menos partes dos algoritmos, sejam atrasadas pois os códigos devem ser reescritos.

Todo e qualquer atraso em pesquisa gera custos, que por mais insignificantes perante ao resultado final da pesquisa, poderiam ser evitados.

Dentre os diversos padrões existentes na literatura foi adotado o modelo *Extreme Programming (XP)* por possuir um foco na programação e testes com documentação mais reduzida, sem ser necessário conhecimentos avançados de modelagem, diagramação de algoritmos, estruturas de dados, análise de projetos, gerenciamento de mudanças entre outros. (BELL, 2018)

Esta pesquisa possui como objetivo a criação de algoritmo e sua documentação para simulação de reação de cinético química de um projeto de doutorado de ciências ambientais sobre tratamento de água.

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

Para elaboração e correção de funções matemáticas serão utilizados os softwares GeoGebra e MatLab.

Está sendo abordado o modelo Extreme Programming de engenharia de software para confecção de algoritmo em linguagem R, no software MatLab, software o qual tem ampla aceitação no meio científico devido a vasta gama bibliográfica sobre ele.

A base de dados utilizada, gentilmente fornecida pela Universidade de Szeged, de um projeto de doutorado de ciências ambientais. Neste meio ainda esta em teste o uso de equações diferenciais para resolver o sistema de equações da decomposição do  $\text{ClO}_2$  (Dióxido de Cloro) considerando a formação dos radicais  $\text{Cl}^\bullet$  e  $\text{HO}^\bullet$ , e a reação destes com um composto orgânico modelo.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Pelo fato desta pesquisa estar em andamento, ainda não possui resultados conclusos, porém cabe ressaltar a importância e relevância tanto da resolução da equação cinética quanto do modelo de implementação a ser utilizado.

Em um mundo onde a poluição por fármacos e pesticidas cresce de maneira exponencial e nossas fontes de água são limitadas existe grande preocupação em métodos cada vez mais baratos e eficazes na despoluição dos mesmos.

A implementação de códigos utilizando metodologias já estudadas na engenharia de software proporciona códigos mais confiáveis e de fácil reutilização.

Esperamos com este projeto a criação de algoritmo de simulação e sua documentação para simulação de reação de cinético química de um projeto de doutorado de ciências ambientais sobre tratamento de água e sua respectiva documentação.

### REFERENCIAS

AVERY, H. E. Cinética Y Termodinámica. In: CINÉTICA Química Básica y Mecanismos de Reaccion. [S. l.: s. n.], 1977. ISBN 978-84-291-9161-5. E-book(188 p.).

BELL, Jhon T. Extreme Programming. [S. l.: s. n.], S.A. Disponível em:  
<https://pdfs.semanticscholar.org/0018/95a221312d80f69bc3c525ff458d727fd0c5.pdf>  
Acesso em: 14 ago. 2021.

CARRA, Irene et al. Disinfection by-product formation during UV/Chlorine treatment of pesticides in a novel UV-LED reactor at 285 nm and the mitigation impact of GAC treatment. *Science of the Total Environment*, v. 712, p. 136413, 2020. Disponível em:  
<<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.136413>>.

FILHO, Firmino dos Santos. Padrões para Codificação: Coding Standards. Disponível em:  
[https://www.angelfire.com/nt2/softwarequality/padrao\\_codificacao.pdf](https://www.angelfire.com/nt2/softwarequality/padrao_codificacao.pdf). Acesso em: 14 ago. 2021.

JAMHOUR, Edgard. MATEMÁTICA Computacional. [S. l.: s. n.], S.A. Disponível em:  
<https://www.ppgia.pucpr.br/~jamhour/Pessoal/Graduacao/MatComputacional/Introducao.pdf>. Acesso em: 14 ago. 2021.

MATEMÁTICA Computacional. [S. l.], 2006. Disponível em:  
[https://www.ufmg.br/diversa/15/index.php?option=com\\_content&view=article&id=74:materiamatica-computacional&catid=19:ciencias-exatas-e-da-terra&Itemid=33](https://www.ufmg.br/diversa/15/index.php?option=com_content&view=article&id=74:materiamatica-computacional&catid=19:ciencias-exatas-e-da-terra&Itemid=33). Acesso em: 14 ago. 2021.

MENEZES, Paulo Blauth. **Matemática Discreta para computação e informática**. 2. ed. [S. l.: s. n.], 2005.

SICHEL, C.; GARCIA, C.; ANDRE, K. Feasibility studies: UV/chlorine advanced oxidation treatment for the removal of emerging contaminants. *Water Research*, v. 45, n. 19, p. 6371–6380, 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.watres.2011.09.025>>.

SOUSA, João C.G. et al. A review on environmental monitoring of water organic pollutants identified by EU guidelines. *Journal of Hazardous Materials*, v. 344, p. 146–162, 2018.

TERHALLE, Jens et al. Chlorine Dioxide - Pollutant Transformation and Formation of Hypochlorous Acid as a Secondary Oxidant. *Environmental Science and Technology*, v. 52, n. 17, p. 9964–9971, 2018.