



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Laboratório de Pesquisa em Processos Químicos e Gestão Empresarial – FEQ

Desenvolvimento de uma interface gráfica para um software de modelagem em nível molecular de frações de petróleo em processos de refino.

INFO

Autor: Lucas Henrique de Oliveira Collaço
Coautor: Dr. Tarcisio Soares Siqueira Dantas
Orientador: Prof. Dr. Dirceu Noriler
Data: 11/10/2020

1. Resumo

Uma interface gráfica para auxiliar nas aplicações e análises de resultados do software de modelagem de reconstrução molecular de frações de petróleo através de métodos de reconstrução molecular.

2. Introdução

Com o advento da computação sendo uma ferramenta de extrema importância para diversas aplicações na sociedade, foi se intensificando o desenvolvimento de tarefas com diferentes níveis de abstração em um processador, exigindo cada vez mais tempo de preparação do usuário para poder gerenciar as diversas funcionalidades e também um certo grau de especialização do mesmo. Pensando nesse contratempo da programação, a demanda por interfaces gráficas e projetos voltados para a experiência do usuário cresceu exponencialmente, como principal solução para esse problema. Projetar produtos interativos utilizáveis, portanto, requer considerar quem será o usuário e onde eles serão usados. Outra preocupação importante é entender o tipo de atividades que as pessoas realizam ao interagir com os produtos [3]. Por meio dessa ferramenta, atualmente, o usuário final pode utilizar diversos softwares sem necessitar saber das linhas de programação que norteiam aquela aplicação e suas diversas peculiaridades, como a linguagem e o paradigma de programação escolhido.

A demanda por processos químicos que apresentam maiores rendimentos tem levado ao desenvolvimento de tecnologias que buscam estimar a composição mais provável de misturas complexas contendo milhares de moléculas diferentes. Visando tornar o problema de estimação mais tratável,

Os métodos de reconstrução molecular visam determinar uma mistura representativa de diferentes cortes de petróleo baseando-se em dados experimentais oriundos dessa indústria. Essa mistura é representada matematicamente na forma de uma matriz de lumping orientado por estrutura (SOL) onde o conceito de lumping é aplicado aos atributos moleculares que compõem uma molécula, como p. ex. presença de ramificações, número de anéis saturados com 6 carbonos, número de anéis aromáticos com 6 carbonos, existência de heteroátomos, ligação



dupla entre carbonos, etc. Então na matriz SOL, cada linha representa uma molécula e cada coluna representa um atributo molecular. Percebe-se que essa descrição da mistura é muito mais detalhada e próxima de uma descrição a nível molecular em comparação com outras abordagens que consideram um conjunto pequeno de 3-4 moléculas produto como representativas para uma mistura inteira. Dentre os métodos de reconstrução molecular, foi utilizado método de Reconstrução Estocástica com Maximização Entrópica (SR-REM) proposto por Hudebine Verstraete (2004). O método SR-REM, de maneira simplificada, envolve a determinação de parâmetros através da solução de um problema de otimização e a utilização desse conjunto de parâmetros para geração de moléculas, através da aplicação do método de Monte-Carlo em conjunto com um código de geração molecular ou Diagrama de construção. A função objetivo é descrita pela diferença entre as propriedades experimentais alimentadas e as propriedades experimentais da mistura “virtual”. A descrição por lumping orientado por estrutura serve como pré-requisito na construção de modelos matemáticos detalhados de processos, como modelo cinéticos, quando há reações químicas envolvidas.

Neste projeto, está sendo desenvolvida uma interface gráfica para um software de métodos de reconstrução molecular para moléculas de frações de petróleo que visa tornar esse aplicativo bem mais simples e rápido para um usuário de laboratório de pesquisa e desenvolvimento, também, pensando nas necessidades específicas de um laboratório, com base nos parâmetros do resultado final, será gerado também um relatório para impressão.

3. Objetivos

O principal objetivo do projeto é o desenvolvimento de uma interface gráfica para um software utilizado na reconstrução molecular da alimentação e produtos de uma unidade de FCC (Fluid Catalytic Cracking).

Para o desenvolvimento do projeto, sugere-se a execução das seguintes etapas:

1. Familiarização do aluno de iniciação científica com o método de reconstrução molecular de frações de petróleo já utilizado pelo grupo de pesquisa.
2. Ambientação do aluno com o software utilizado para o desenvolvimento de interface gráfica.
3. Desenvolvimento da interface gráfica para o software de reconstrução molecular.
4. Compilação do código da interface gráfica em conjunto com o código do programa de reconstrução molecular.

As metas a serem atingidas durante o período de trabalho são;

Primeiro semestre: Ambientação com o software de reconstrução molecular de frações de petróleo e também, com o framework que será utilizado para o desenvolvimento da interface gráfica esquematizando o projeto e suas diversas aplicações.

Segundo semestre: Desenvolvimento propriamente dito da interface gráfica baseado em uma experiência de usuário voltada para laboratórios de pesquisa e desenvolvimento e sua fusão com o software de reconstrução trabalhando nos possíveis bugs e validando os resultados esperados.

4. Metodologia

O Algoritmo foi desenvolvido inteiramente utilizando a linguagem Python no paradigma Orientado a Objetos e focado, principalmente, na utilização dos seus pacotes de experiência de usuário como o PyQt5 e o PySimpleGUI trabalhando com o layout da tela como uma matriz $M_{(lxc)}$, na qual l representa o número de linhas e c representa o número de colunas, dessa forma, cada ponto matricial do layout é um elemento da tela podendo acrescentar diversas aplicações dinâmicas ou estáticas. Após o desenvolvimento do layout, o desenvolvedor



necessita programar os eventos e funcionalidades dos botões de cada janela definindo a funcionalidade e papel de cada elemento da janela no sistema.

Na imagem 1, logo abaixo, está mostrando um layout PySimpleGUI, na qual, é denominado 'Hello World', neste temos, basicamente, quatro elementos na tela, uma string textual que dialoga com o usuário trazendo instruções, a segunda seria um elemento de entrada que recebe uma string, após clicar no botão 'Ok' essa string iria ser armazenada nos eventos do layout e utilizada para outros fins, como um preenchimento de informações em um banco de dados, enquanto que o ultimo elemento seria apenas um botão de finalização de tarefa marcado com a label 'Sair' [1].



Imagem 1: Tela PySimpleGUI Hello World.

Para o gerenciamento de pacotes e ambientes do sistema foi selecionado o framework Anaconda, uma das principais ferramentas de código aberto ligado a análise e ciência de dados, e foi criado um ambiente virtual para trabalho, utilizando pacotes, tais como Numpy, Pandas e Matplotlib para tratamento de dados com o intuito de poder gerar tabelas e gráficos necessários para o usuário final fazer suas constatações de pesquisa.

Houve um breve estudo e avaliação, ao longo do período de projeto, sobre a implementação ou não de um banco de dados relacional para armazenar todos os dados gerados pelo software de reconstrução molecular, contudo, pelo tempo que demandaria para construir todos os elementos do banco de dados e pela necessidade do aplicativo ser em vários aspectos, optou se por não utilizar essa solução mais complexa.

5. Procedimento experimental

Basicamente, antes da interface ser iniciada, o sistema passará por uma janela inicial que escolherá caso o usuário queira acessar o menu principal ou deseja acessar o software de reconstrução por outros meios, tais como um terminal que também está sendo desenvolvido pela equipe de pesquisa. A interface se comunica com todos os resultados gerados pelo programa anterior, ou seja, todos os arquivos no formato (.txt) poderão ser tratados, modificados ou analisados de uma forma mais adequada à aplicação desejada no momento. No menu principal, existem vários botões e elementos de acesso como Desenho Molecular, Análise de Dados, Arquivo de Entrada e um botão de Execução para o usuário executar o software de reconstrução e esse menu terá o controle total da aplicação de interface tendo acesso a todo o conteúdo, além disso, também existe um menu de acesso rápido que orientará o usuário com ajuda de como utilizar o sistema e também uma funcionalidade de geração de relatório com as informações organizadas de parâmetros finais do software principal.

Um ponto interessante do menu inicial é que ele não necessariamente obrigará o usuário a executar o programa de reconstrução, pois, uma vez já executado todos os arquivos serão armazenados dentro de uma pasta da interface para que possam ser reutilizados posteriormente

em análises comparativas, dando uma alternativa de reutilizar os resultados anteriores da maneira que bem entender. Na imagem abaixo está sendo representado um fluxograma geral da interface gráfica e suas diversas funcionalidades, sendo que cada uma dessas foi baseada na lógica “O que? Usar quando? Porque? Como?” [2], onde pode ser demarcado o item, a sua funcionalidade principal quando demandada, o porquê da sua necessidade e como será utilizado respectivamente.

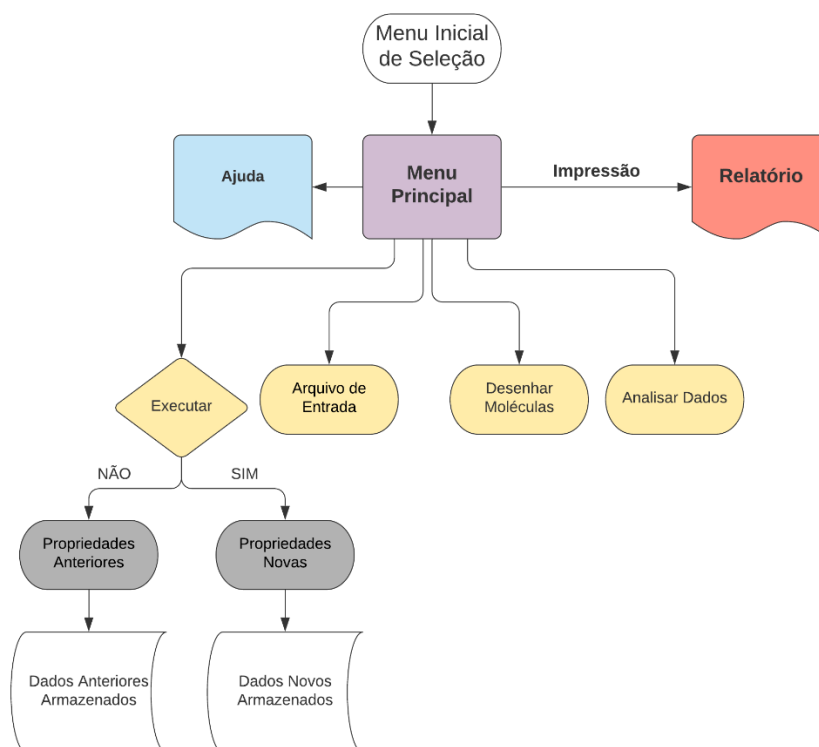


Imagem 2: Fluxograma Interface Gráfica.

- **Arquivo de Entrada:** o usuário poderá alterar todos os dados de entrada do software de reconstrução e, dessa forma, poder trabalhar todos os critérios, respeitando o formato dos campos adequados para a solução e possíveis desvios de solução.
- **Executar:** O sistema irá executar o software e armazenar os dados anteriores nas pastas e, logo após isso, será exibido as propriedades e algumas informações de parâmetros que foram resultantes daquele processamento.
- **Analisar Dados:** Essa janela conterá todas as tabelas de resultados e os gráficos referentes aos parâmetros de saída, a fim de analisar os dados de uma forma mais clara, plotando informações relevantes como Ponto de Ebulição, Fração Molar, Número de Carbonos e outras propriedades físico químicas da mistura resultante.
- **Ajuda:** Uma janela que irá descrever todas as informações necessárias para poder utilizar a interface gráfica e o software de reconstrução, alertando os possíveis desvios de resultado e instruções adicionais de como proceder usando o software sem possíveis problemas, reportando também os bugs e as soluções.
- **Desenhar Moléculas:** A mistura resultante será representada por uma matriz de moléculas, sendo, cada elemento descrito nessa tela como um botão que acessará uma imagem (.png) da molécula e suas informações adicionais.



- **Relatório:** Um relatório geral (.pdf) que pode ser impresso, contendo todas as informações pertinentes da mistura final;

6. Resultados e Perspectivas

O código está modelando bem todos os elementos necessários para uma boa análise do programa, todavia, ainda faltam algumas validações finais juntamente com o código de software de reconstrução para que ambos possam trabalhar em conjuntos sem possíveis desvios de resultados. Os desvios de resultado serão todos reportados para o usuário na sessão de Ajuda do menu de acesso rápido do Menu Principal.

No momento, está sendo realizado um estudo de como instalar todos os pacotes no disco do Desktop do usuário final por meio de um instalador, visando diminuir o uso de memória mínimo que requer do computador, e fazendo a validação, juntamente dos ajustes finais da ligação entre os algoritmos de reconstrução e interface.

7. Agradecimentos

Agradeço imensamente a empresa Petrobras, Petróleo Brasileiro S.A., pela parceria, oportunidade e pelo seu apoio a equipe de pesquisadores do Laboratório de Pesquisa em Processos Químicos e Gestão Empresarial, fomentando sempre a pesquisa e desenvolvimento do nosso país.

8. Cronograma

Tarefas	Trimestre			
	1	2	3	4
Familiarização do aluno de iniciação científica com o método de reconstrução molecular de frações de petróleo já utilizado pelo grupo de pesquisa	X			
Ambientação do aluno com o software utilizado para o desenvolvimento de interface gráfica	X			
Desenvolvimento da interface gráfica para o software de reconstrução molecular		X	X	X
Compilação do código da interface gráfica em conjunto com o código do programa de reconstrução molecular			X	X

9. Referências Bibliográficas

[1] PySimpleGUI Cookbook, "2020 - Updates are in Progress". Disponível em: <<https://pysimplegui.readthedocs.io/en/latest/cookbook/>>. Acesso em: 08/10/2020

[2] Tidwell, J. 2010. Designing interfaces: Patterns for effective interaction design. " O'Reilly Media, Inc."

[3] Preece, Jenny, Yvonne Rogers, and Jenny Preece. Interaction Design: Beyond Human-Computer Interaction. Chichester: Wiley, 2007. Print.