

# ANÁLISE DA TAXA DE CRISTALIZAÇÃO E FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE CRISTALIZAÇÃO ATRAVES DA INTERPOLAÇÃO POR POLINÔMIOS DE LAGRANGE E SPLINES CÚBICOS

Congresso Online Nacional de Química, 4ª edição, de 04/04/2022 a 06/04/2022  
ISBN dos Anais: 978-65-81152-51-2

OLIVEIRA; Jakelyne Farias de <sup>1</sup>

## RESUMO

Uma forma de classificação de materiais sólidos é relacionada à sua cristalização, sendo que as propriedades térmicas e mecânicas de polímeros, um exemplo, são influenciadas pelo processo de cristalização, em outras palavras, de acordo com a forma em que os átomos e íons estão dispostos, como em um padrão tridimensional bem definido. O processo de cristalização remete à três principais etapas: duas nucleações, em que há a formação de pequenas estruturas cristalinas, seguidas de um crescimento das mesmas, podendo formar fases ordenadas, dependendo dos parâmetros utilizados. O estudo da cinética de cristalização de um composto é importante, pois quando exposto a diferentes condições de operação, formam-se distintas formas cristalinas com propriedades específicas. Esse processo é conhecido na área da engenharia química, sendo aplicada nas produções de sal e açúcar, de sulfato de sódio e amônia para fertilizantes, carbonato de cálcio para indústria de papel, cerâmicas e plásticos, entre outras aplicações. Isto posto, o presente trabalho utilizará os métodos de interpolação por polinômios de Lagrange, com grau 2, e por splines cúbicos, para avaliar, a partir de dados experimentais tabelados, a taxa máxima de cristalização de um polímero, bem como sua respectiva fração volumétrica de cristalinidade. Quando aplicados no tempo determinado de experimento, de 1 em 1 minuto, observou-se uma maior taxa de cristalização aos 33 minutos para ambos os métodos, sendo que para Lagrange o valor encontrado foi de  $29,77 \text{ min}^{-1}$ , com uma fração volumétrica de  $0,16 \text{ min}^{-1}$ , enquanto que para o método de splines cúbicos se encontrou uma taxa de  $30,08$  e uma fração correspondente de  $0,17 \text{ min}^{-1}$ . Concluiu-se que, por se tratar de polinômios de baixos graus, os valores encontrados se adequaram ao problema em questão de forma satisfatória, mostrando que são ferramentas importantes e úteis para diversos problemas em engenharia, quando aplicados com os parâmetros corretos.

**PALAVRAS-CHAVE:** cristalização, engenharia química, Lagrange

<sup>1</sup> Universidade Federal de Mato Grosso, jakefariasdeoliveira@gmail.com