

UTILIZAÇÃO DO SIMULADOR DE PROCESSOS COCO COMO FERRAMENTA DE ENSINO PARA A DISCIPLINA DE TERMODINÂMICA

Congresso Online de Engenharia Química, 1^a edição, de 09/11/2020 a 12/11/2020
ISBN dos Anais: 978-65-86861-56-3

XAVIER; Ivan Pedro Arêdes Sousa ¹, COSTA; Gean Carlos Costa ², MIGUEL; Karolyna Barros ³, FÉLIX;
Jamyla Soares Anício Oliveira ⁴, REIS; Miria Hespanhol Miranda ⁵

RESUMO

A utilização de simuladores como ferramenta computacional didática para estudantes de termodinâmica possibilita uma visão panorâmica das variáveis resultantes de forma rápida e fácil por meio de uma interface gráfica. Este trabalho tem finalidade comparativa entre dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor (ELV) em sistemas binários com dados calculados com diferentes modelos termodinâmicos utilizando o software Cape open to Cape Open (COCO) e, avaliar os impactos promovidos pelo uso do software COCO como ferramenta de ensino. Foram realizados cálculos de ELV de duas misturas binárias (Metanol + Acetonitrila e Água + 1,4 Dioxano) no software comparando-os com dados experimentais da literatura. Os modelos termodinâmicos avaliados para os cálculos foram a Lei de Raoult modificada com coeficientes de atividade determinados pelos modelos de Wilson e NRTL, além da suposição de idealidade nas fases líquida e vapor (Lei de Raoult). Foram avaliados a proximidade entre dados calculados e dados experimentais, além do comportamento do equilíbrio, investigando os ganhos no processo de ensino quando associados ao estudo da disciplina. Na análise do ELV da mistura Metanol + Acetonitrila a 101,33 kPa, os dados calculados com os modelos de Wilson e NRTL foram próximos aos dados experimentais. Ambos modelos conseguiram prever satisfatoriamente o azeotropo formado por essa mistura com fração molar de metanol próxima a 0,80 e temperatura de 337 K. Contudo, a Lei de Raoult, para tais dados, não representou satisfatoriamente os dados experimentais e, conforme esperado, não representou a ocorrência do ponto azeotrópico. Analogamente, avaliando a mistura Água + 1,4 Dioxano, em temperatura fixa (303,15 K), os resultados calculados com os modelos de Wilson e NRTL representaram satisfatoriamente os dados experimentais, e o ponto azeotrópico foi identificado com, aproximadamente, fração molar de água de 0,4 e pressão de 8,4 kPa. Similarmente, os dados experimentais da mistura Água + 1,4 Dioxano não foram descritos satisfatoriamente pela Lei de Raoult devido às não-linearidades na fase líquida. Assim, a complementação do estudo teórico e prático pela simulação permitiu uma análise coesa do caminho tomado, principalmente associado ao ensino da termodinâmica, permitindo fazer comparações com dados experimentais, além de desenvolver as habilidades criativas, indispensável na rotina do engenheiro químico. Nesse contexto, o professor atua mediando conhecimento, podendo o aluno exercitar pensamentos críticos e criatividade buscando, através das ferramentas de simulação, resolver problemas baseados nos conhecimentos adquiridos em sala de aula. A utilização de simuladores como o COCO associados ao processo de ensino da termodinâmica é uma estratégia que pode ser empregada considerando a complexidade dos problemas reais, trazendo para os estudantes uma liberdade para aplicarem diversas situações que muitas vezes não são compreendidas de forma tão clara quando vistas teoricamente e, pela simulação pode ser realizada uma recapitulação de conceitos antes apresentados e agora vistos de forma simulada. Finalmente, foi observado grande proximidade entre dados simulados e experimentais certificando a utilização do simulador, que é de fácil manuseio e acessibilidade gratuita. Há então um grande potencial do simulador COCO como ferramenta computacional de ensino da termodinâmica, favorecendo o

¹ Universidade Federal de Uberlândia, ivanpedroasx@outlook.com

² Universidade Federal de Uberlândia, geancarloscostaecosta@gmail.com

³ Universidade Federal de Uberlândia, karolyna.miguel@ufu.br

⁴ Universidade Federal de Uberlândia, jamyla_soares@hotmail.com

⁵ Universidade Federal de Uberlândia, miria@ufu.br

estudante assimilar maior conhecimento em análises de processos químicos.

PALAVRAS-CHAVE: Equilíbrio Líquido-Vapor, Novas Metodologias, Simulador