

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS - UFAL

# SIMULAÇÃO NO COCO-COFE

APOSTILA DE TERMODINÂMICA

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
CENTRO DE TECNOLOGIA  
ENGENHARIA QUÍMICA

Esta apostila foi desenvolvida com o intuito de auxiliar os/as alunos/as de engenharia química da Universidade Federal de Alagoas – Ufal a utilizar o simulador COCO-COFE<sup>®</sup>. A aplicação do software abordada neste documento foi voltada para a disciplina de Termodinâmica 2 no ensino de equilíbrio líquido-vapor.

**Organizadores:**

Prof. Dr. Wagner Roberto de Oliveira Pimentel

Ana Beatriz Vitorino de Farias

Carlos Eduardo da Silva

Matheus Henrique Monteiro Silva

Mayara Teixeira da Silva

Maceió

2021

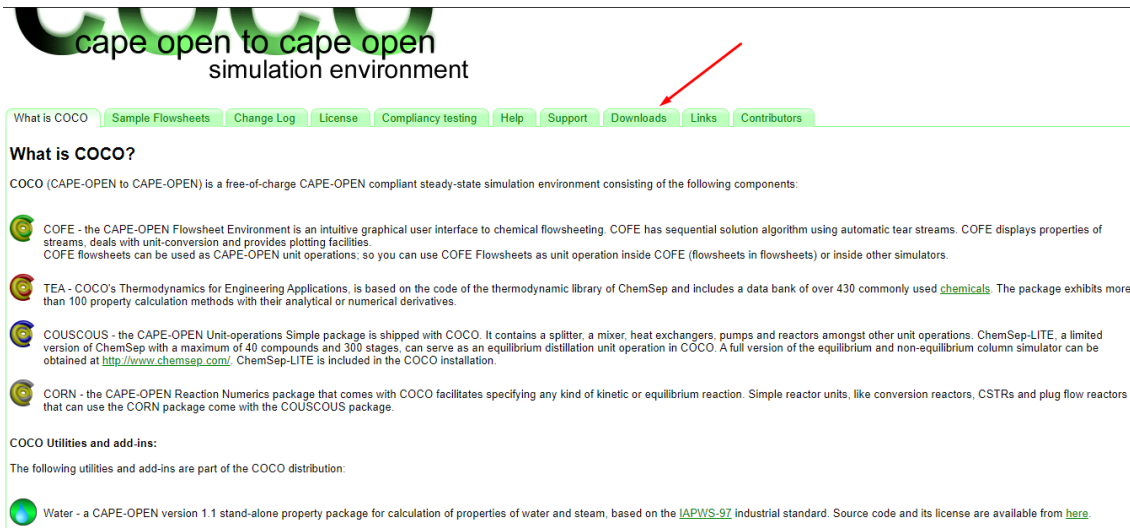
## SUMÁRIO

1. Baixando o COCO-COFE:.....	4
1.1 Fazendo o <i>Download</i> .....	4
1.2 Possíveis problemas. ....	8
2. Criando a curva do ELV no COCO-COFE:.....	9
2.1 Configurando as propriedades.....	9
2.2 Adicionando uma corrente. ....	15
2.3 Opções de configuração do diagrama. ....	19
2.4 Copiando e inserindo dados. ....	30
2.5 Encontrando os valores dos parâmetros wilson, nrtl, entre outros no simulador. ....	34

# 1. Baixando o COCO-COFE:

## 1.1 Fazendo o Download.

Primeiramente vá até a página <https://www.cocosimulator.org/>, lá você encontrará esse “Layout”:



cape open to cape open simulation environment

What is COCO | Sample Flowsheets | Change Log | License | Compliance testing | Help | Support | Downloads | Links | Contributors

### What is COCO?

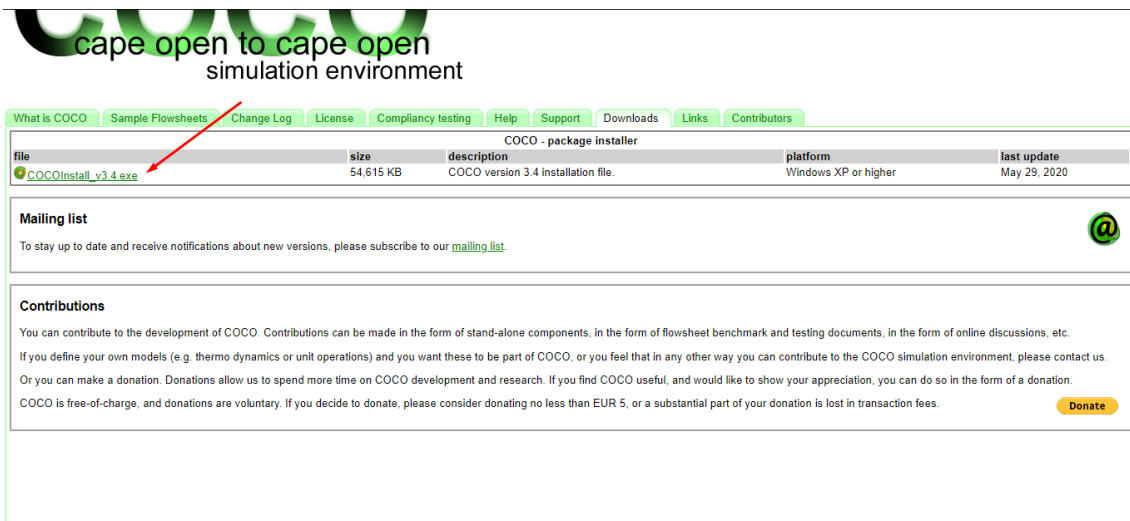
COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) is a free-of-charge CAPE-OPEN compliant steady-state simulation environment consisting of the following components:

- COFE** - the CAPE-OPEN Flowsheet Environment is an intuitive graphical user interface to chemical flowsheeting. COFE has sequential solution algorithm using automatic tear streams. COFE displays properties of streams, deals with unit-conversion and provides plotting facilities. COFE flowsheets can be used as CAPE-OPEN unit operations; so you can use COFE Flowsheets as unit operation inside COFE (flowsheets in flowsheets) or inside other simulators.
- TEA** - COCO's Thermodynamics for Engineering Applications, is based on the code of the thermodynamic library of ChemSep and includes a data bank of over 430 commonly used [chemicals](#). The package exhibits more than 100 property calculation methods with their analytical or numerical derivatives.
- COUSCOUS** - the CAPE-OPEN Unit-operations Simple package is shipped with COCO. It contains a splitter, a mixer, heat exchangers, pumps and reactors amongst other unit operations. ChemSep-LITE, a limited version of ChemSep with a maximum of 40 compounds and 300 stages, can serve as an equilibrium distillation unit operation in COCO. A full version of the equilibrium and non-equilibrium column simulator can be obtained at <http://www.chemsep.com/>. ChemSep-LITE is included in the COCO installation.
- CORN** - the CAPE-OPEN Reaction Numerics package that comes with COCO facilitates specifying any kind of kinetic or equilibrium reaction. Simple reactor units, like conversion reactors, CSTRs and plug flow reactors that can use the CORN package come with the COUSCOUS package.

**COCO Utilities and add-ins:**  
The following utilities and add-ins are part of the COCO distribution:

- Water** - a CAPE-OPEN version 1.1 stand-alone property package for calculation of properties of water and steam, based on the [IAPWS-97](#) industrial standard. Source code and its license are available from [here](#).

Vá na parte de “Downloads” indicado pela seta acima, nesta parte clique no link em “file” indicado pela seta abaixo:



cape open to cape open simulation environment

What is COCO | Sample Flowsheets | Change Log | License | Compliance testing | Help | Support | Downloads | Links | Contributors

file	size	description	platform	last update
<a href="#">COCOInstall_v3.4.exe</a>	54,615 KB	COCO version 3.4 installation file.	Windows XP or higher	May 29, 2020

### Mailing list

To stay up to date and receive notifications about new versions, please subscribe to our [mailing list](#).

### Contributions

You can contribute to the development of COCO. Contributions can be made in the form of stand-alone components, in the form of flowsheet benchmark and testing documents, in the form of online discussions, etc. If you define your own models (e.g. thermo dynamics or unit operations) and you want these to be part of COCO, or you feel that in any other way you can contribute to the COCO simulation environment, please contact us. Or you can make a donation. Donations allow us to spend more time on COCO development and research. If you find COCO useful, and would like to show your appreciation, you can do so in the form of a donation. COCO is free-of-charge, and donations are voluntary. If you decide to donate, please consider donating no less than EUR 5, or a substantial part of your donation is lost in transaction fees. [Donate](#)

Depois disso você terá a opção de escolher onde deseja que o instalador seja baixado, ao escolher espere a instalação terminar e execute o instalador:

---

## Download

Thank you for downloading COCOInstall\_v3.4.exe. Your download will start automatically. If it does not start, please click [here](#).

If clicking the above link fails, try clicking with the right mouse button and select "Save link as" from the menu that pops up.

If you continue to have trouble downloading the specified file, please contact [us](#).



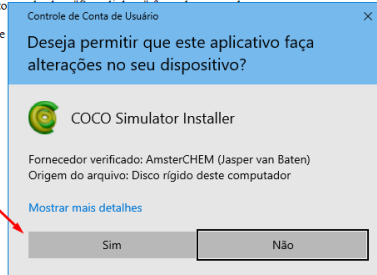
Lembre de permitir que o programa faça alterações no dispositivo:

## Download

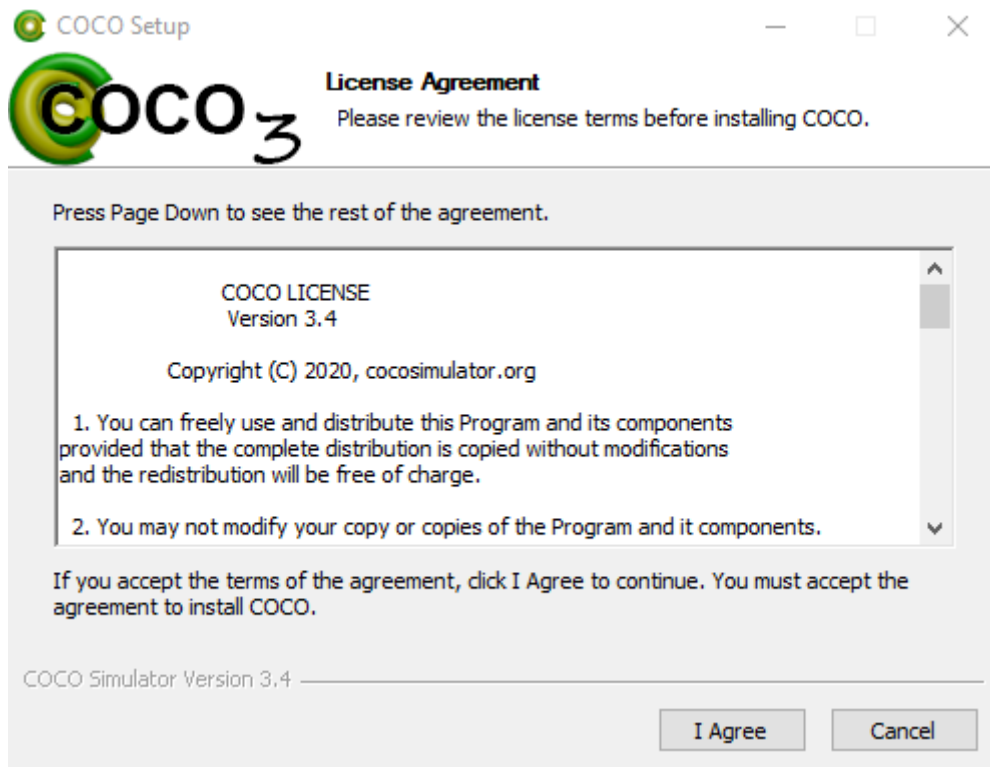
Thank you for downloading COCOInstall\_v3.4.exe. Your download will start automatically. If it does not start, please click [here](#).

If clicking the above link fails, try clicking with the right mouse button and select "Save link as" from the menu that pops up.

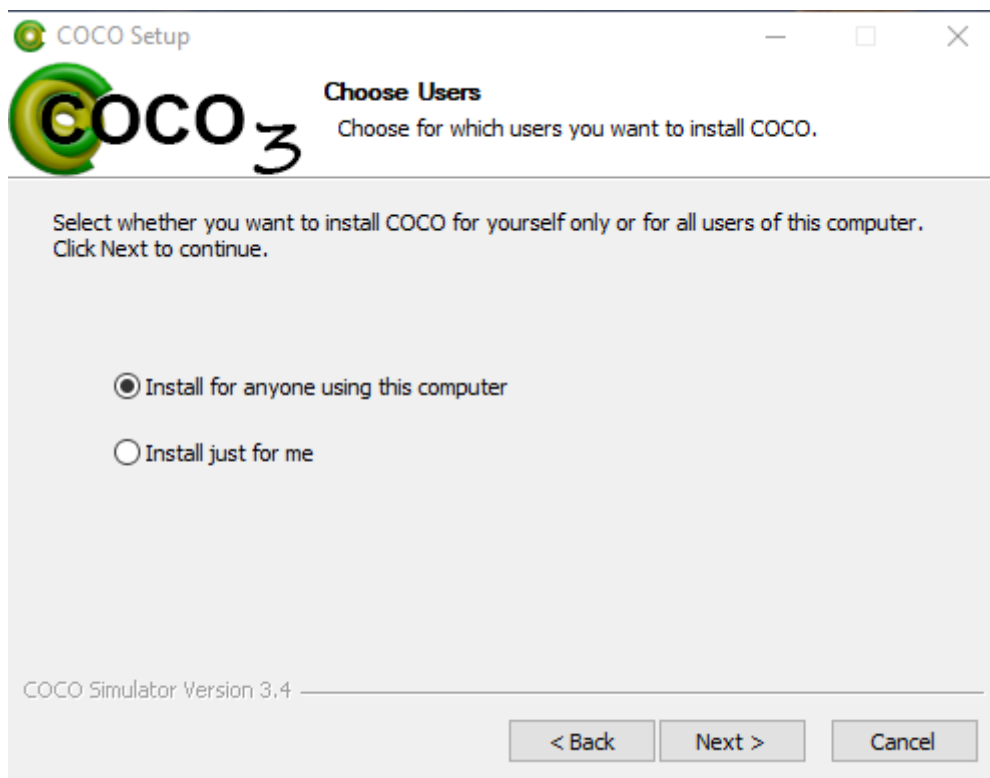
If you continue to have trouble downloading the specified file, please



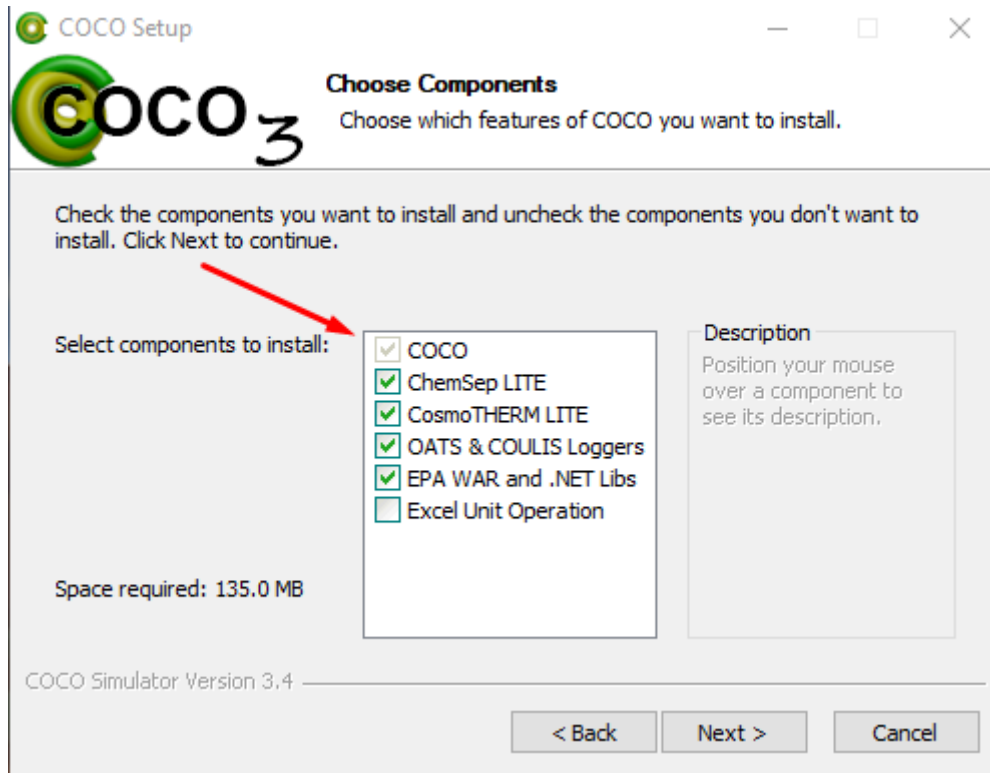
Ao abrir o instalador ele vai dar a opção de concordar com os termos de compromisso do programa, para concordar clique em “*I agree*”:



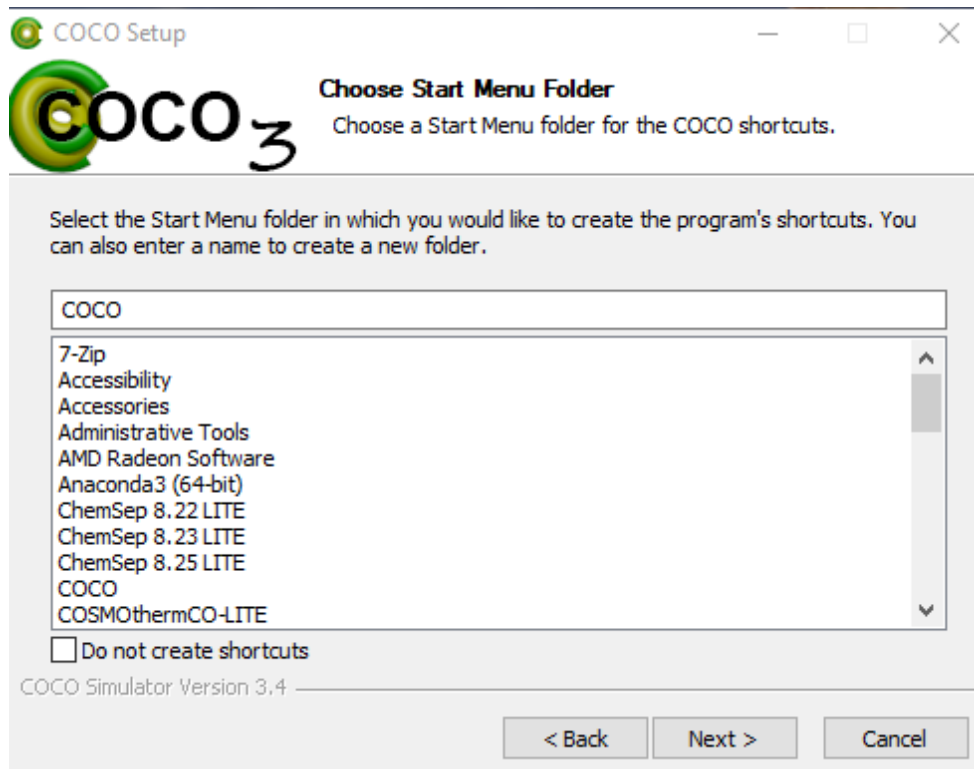
Em seguida, escolha se quer que o programa esteja disponível para todos usando o computador “*Install for anyone using this computer*” ou somente para você “*Install just for me*” e clique em “*Next*”:



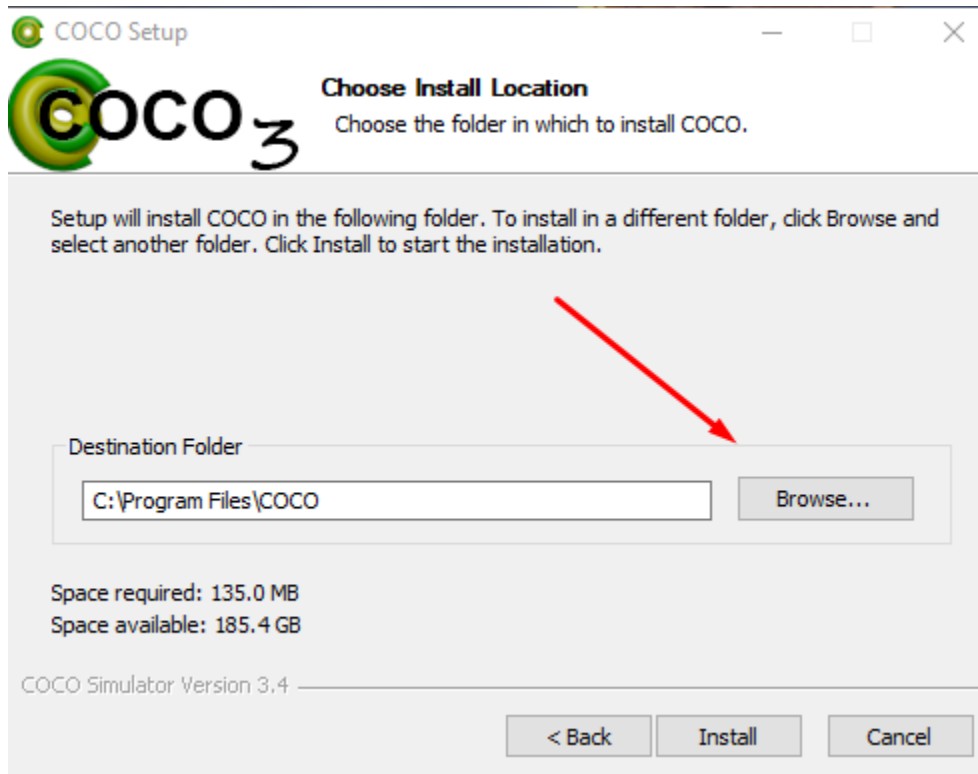
Posteriormente escolha quais extensões do programa deseja ter no seu computador, as extensões normalmente utilizadas serão selecionadas automaticamente. Após isso clique em “Next”:



Aqui você pode escolher ou criar a pasta onde estarão os atalhos do programa:



Aqui você pode escolher onde será a pasta que o programa vai ser instalado. Após isso clique em “*Install*” para efetuar a instalação. Lembre que durante a instalação será necessário permitir as instalações das extensões, a instalação delas podem ser mais simples, mas de maneira geral segue um processo análogo:



## 1.2 Possíveis problemas.

Caso não consiga baixar, verifique se é o seu antivírus que está identificando o site como uma ameaça e impedindo que o mesmo faça as alterações necessárias para fazer o *download*, você pode resolver esse problema indo nas configurações do antivírus e adicionando o site do COCO que vc está fazendo o *download* como uma exceção.

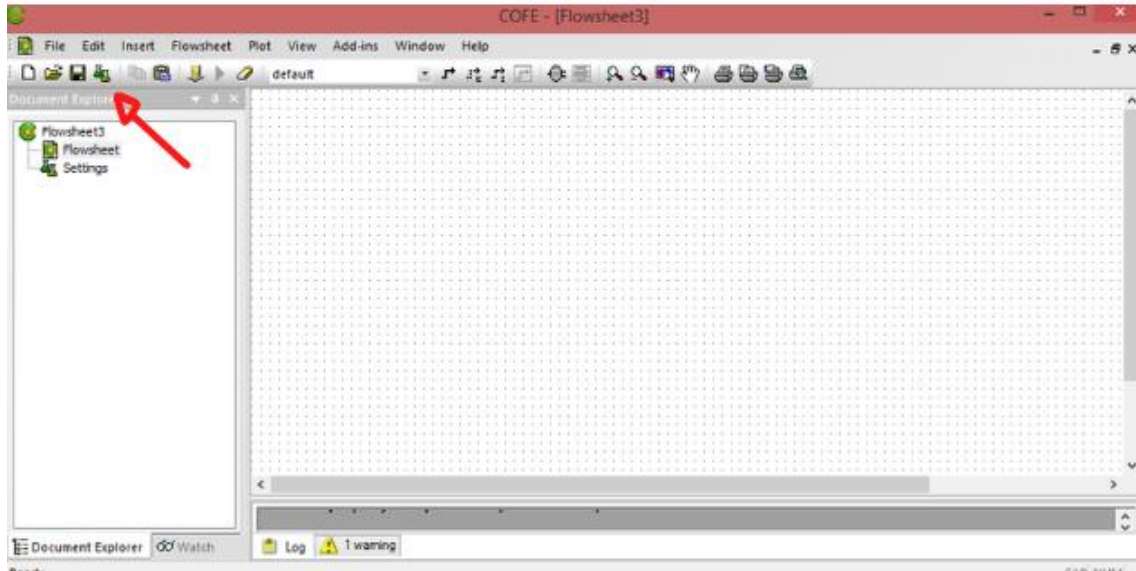
Outro problema que pode ocorrer é não lembrar onde está a pasta que foi feita a instalação do arquivo, para isso você pode procurar “COFE” (caso esteja em um windows) na parte de busca (na sua barra de tarefas onde tem uma lupa), assim que fizer isso o windows te indicará o programa. Caso precise utilizá-lo com frequência, você pode fixá-lo na sua barra de tarefas clicando em cima dele com o botão direito e selecionando “fixar na barra de tarefas”



## 2. Criando a curva do ELV no COCO-COFE:

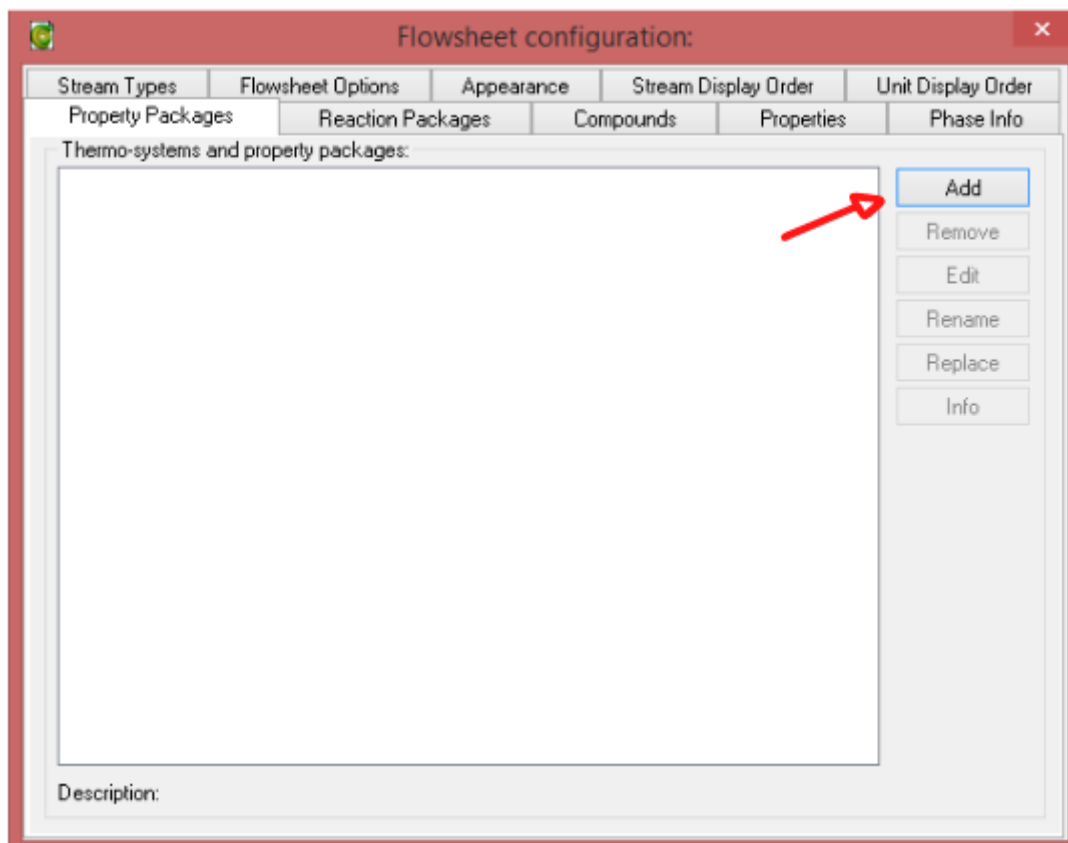
### 2.1 Configurando as propriedades.

Primeiro clique no botão “Settings” na parte superior esquerda, assim como mostrado na figura a seguir:

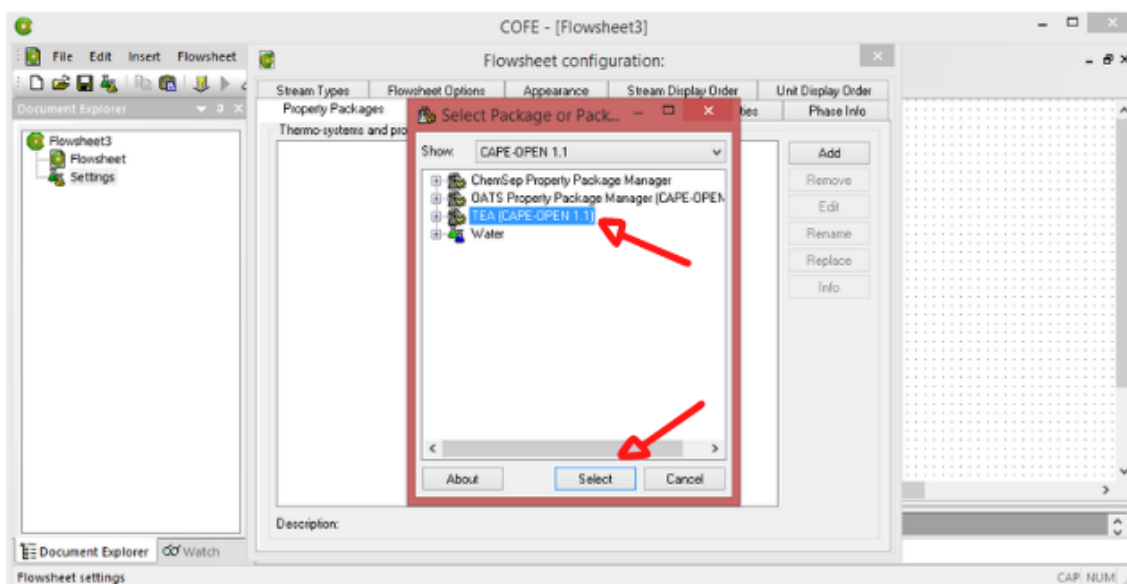


Ao fazer isso você será redirecionado a uma guia mostrada abaixo. Nela você pode adicionar os pacotes de propriedades necessários para resolução dos problemas.

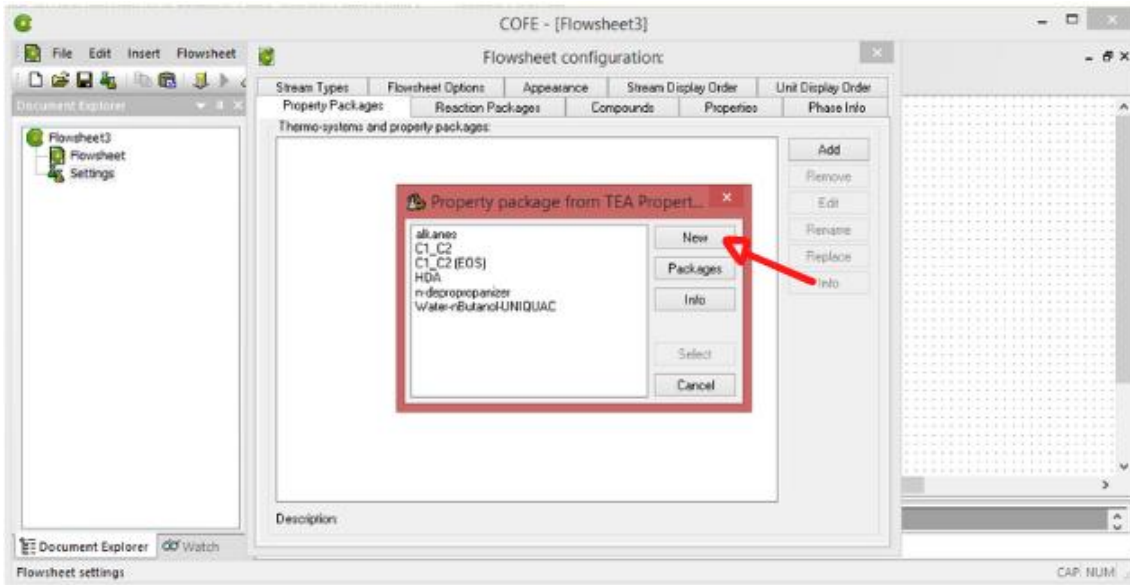
Para adicionar um pacote clique no botão “Add” indicado pela seta:



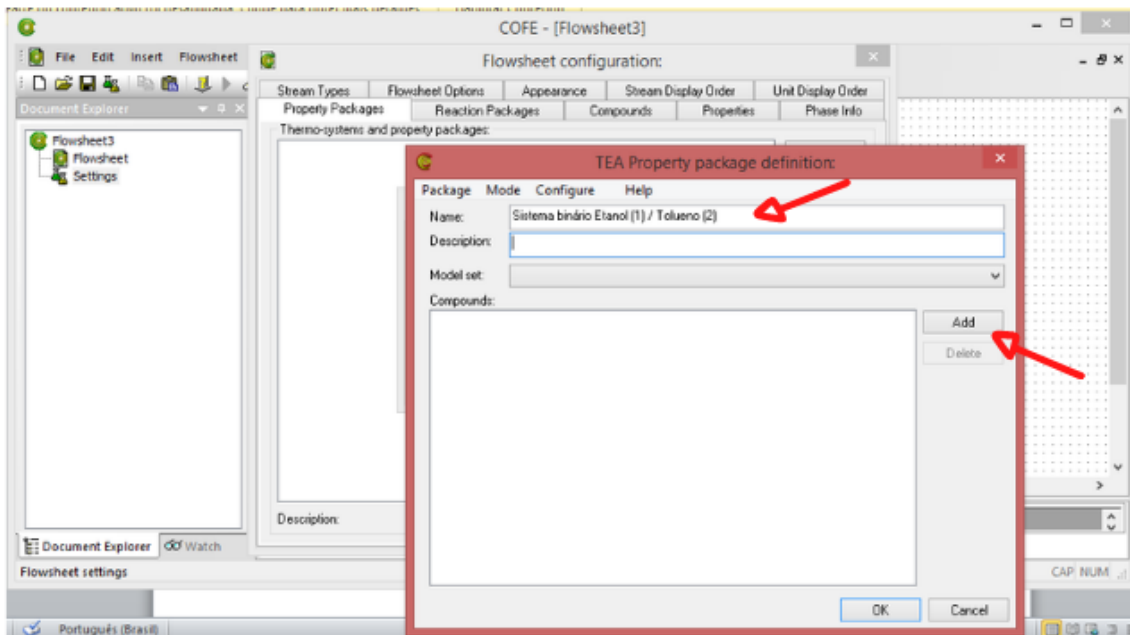
Para esse exemplo selecione o pacote “*TEA(CAPE-OPEN 1.1)*”, após clicar no pacote desejado, selecione-o através do botão “Select”:



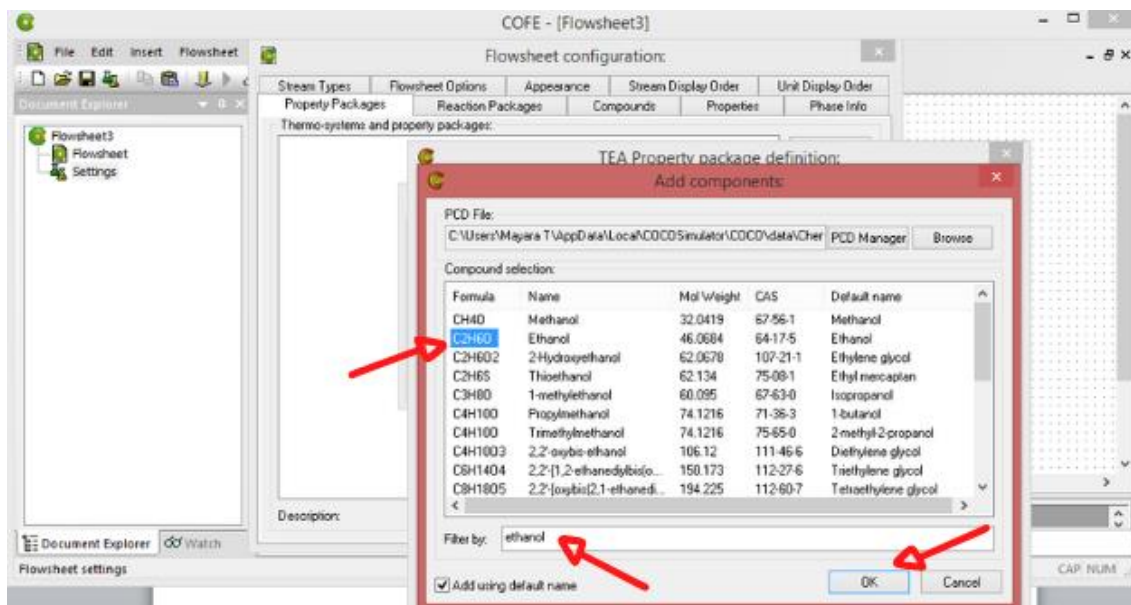
Para criar um novo projeto , clique em “New” . Caso deseje selecionar um projeto já criado, selecione o nome do projeto e clique em “Select”.



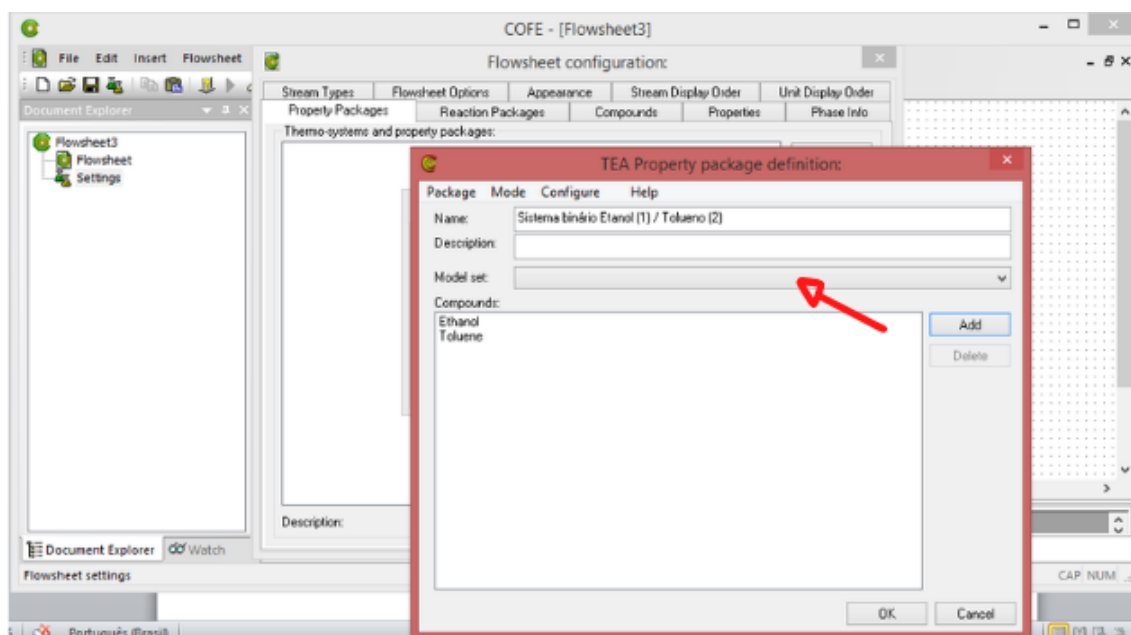
Ao criar o novo projeto dê um nome a ele no primeiro espaço disposto na figura abaixo, ao lado de “Name:”. Caso deseje também é possível adicionar uma descrição, por exemplo “Questão 2 da lista 3 de Termo”, como forma de facilitar um posterior entendimento da simulação, encontrar seu enunciado, entre outros. Depois disso clique em “Add” para adicionar os componentes:



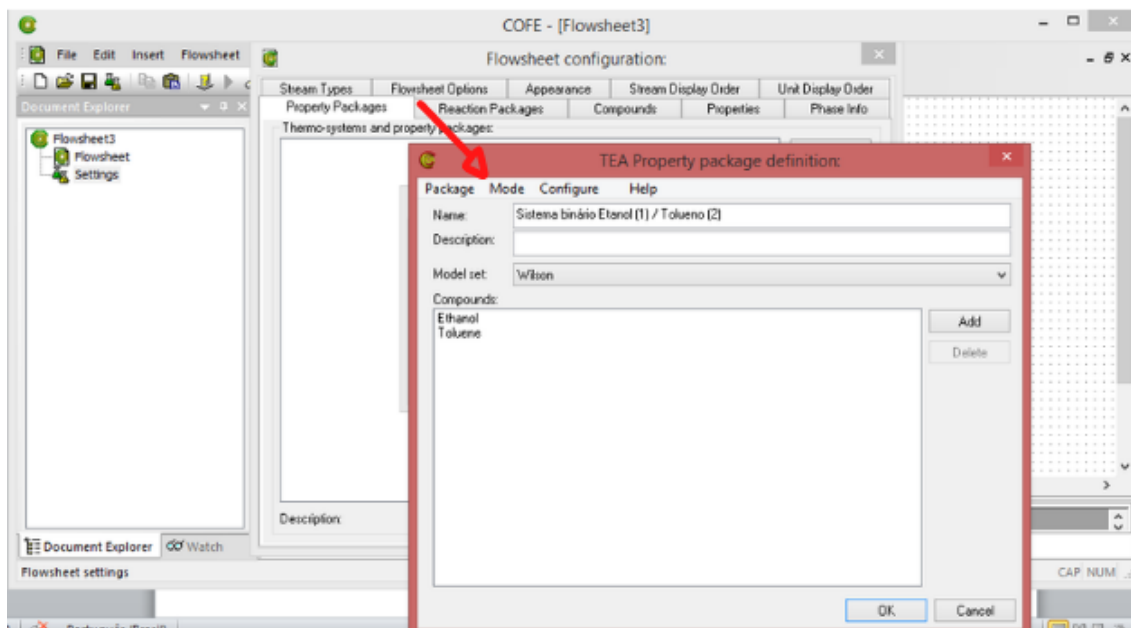
Para selecionar qualquer componente, escreva o nome dele em inglês no espaço disposto ao lado de “Filter by”, após isso procure ele na lista, ao encontrá-lo, clique nele e finalize a operação em “OK”.



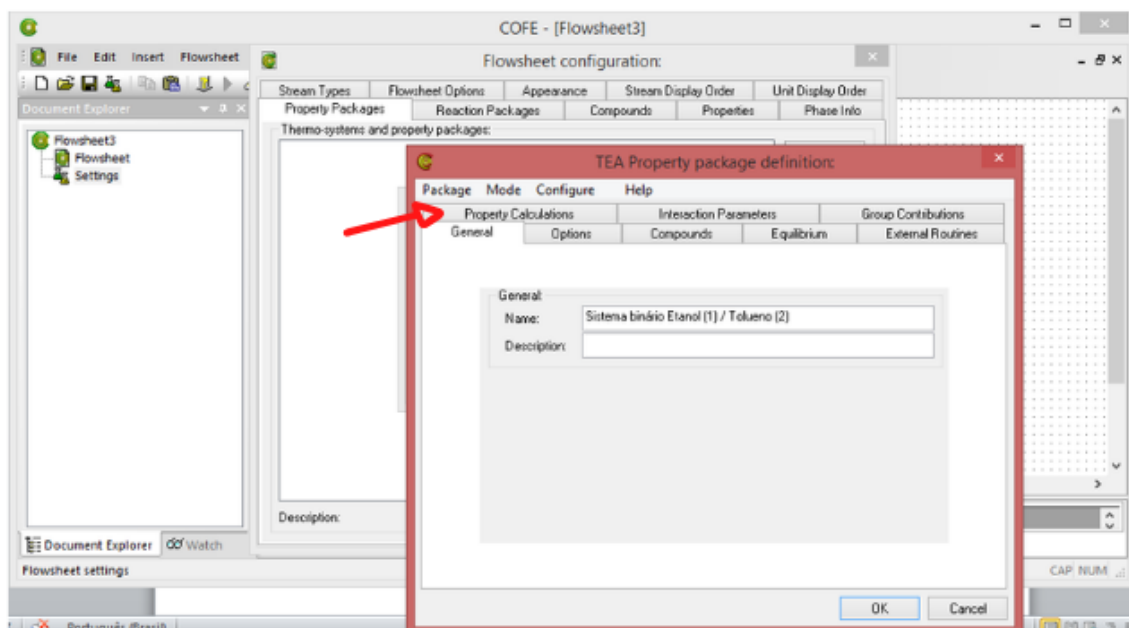
Repita o processo para outros componentes. Ao terminar, selecione o modelo que irá descrever o sistema clicando em “*Model set*”, esses modelos que aparecerão são pré determinados, para facilitar o processo de simulação. Caso você deseje usar alguma variação, selecione um deles e altere manualmente o que desejar.



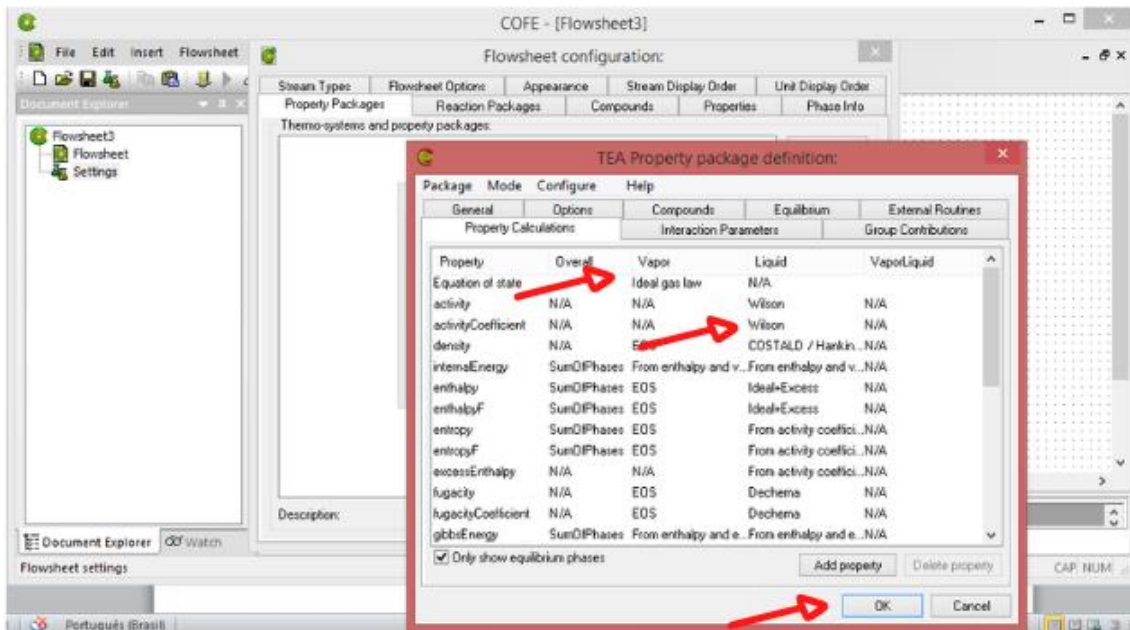
Para isso clique em “*Mode*” e vá para a parte “*Advanced*”, essa parte vai dar acesso a mais configurações.



Dentre as opções que apareceram, vá para a parte de “*Property Calculation*”.

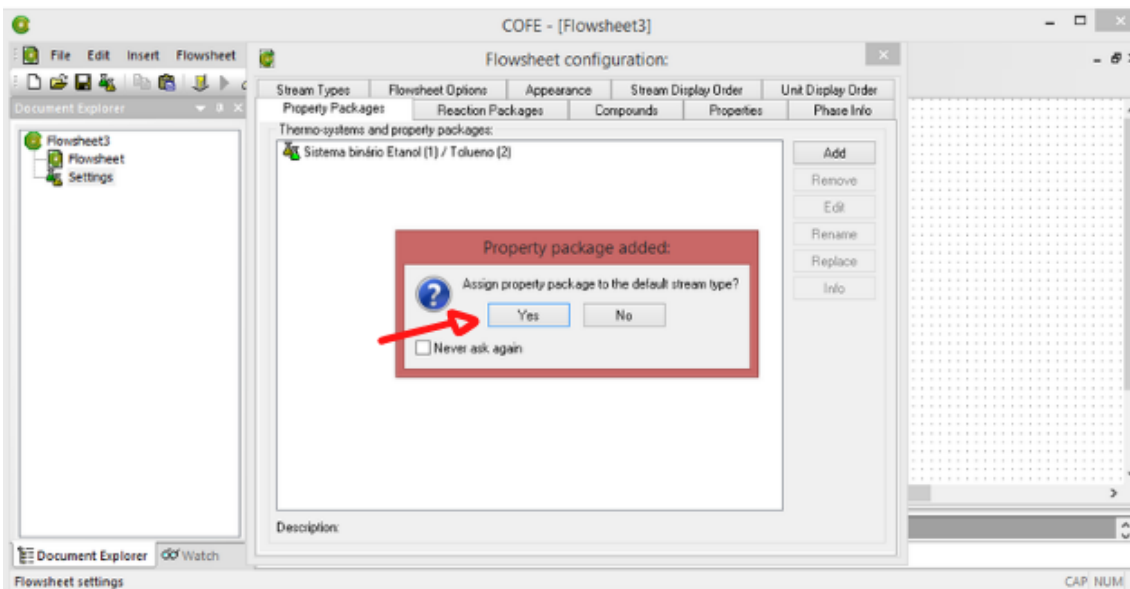


Aqui escolha as equações de estado para a fase vapor (gás ideal, Peng Robinson, etc), a atividade e coeficiente de atividade para a fase líquida (NRTL, Wilson, etc). Basta clicar em cima da opção (gás ideal ou outra) e selecionar o modelo que deseja clicando em cima do nome da opção desejada (Peng Robinson ou outro), após terminar clique em “OK” para finalizar. Caso dê uma travada, basta clicar em algum canto sem informações (espaço em branco) na janela que está aberta. No caso da lei de Raoult, a equação de estado da fase vapor é ideal, assim como a atividade e o coeficiente de atividade da fase líquida.

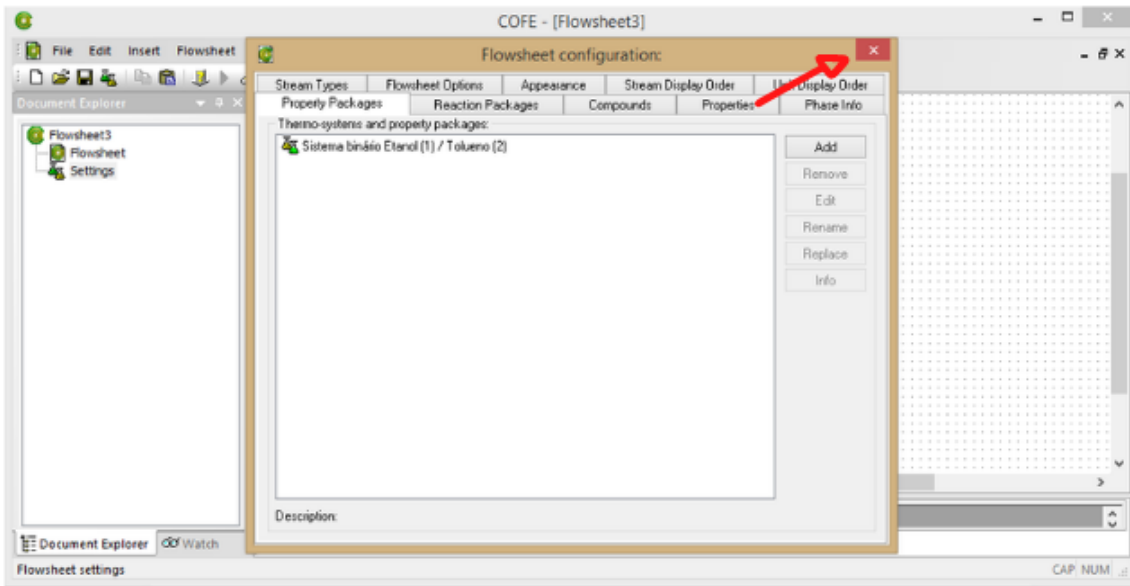


**Obs:** Os modelos de Wilson, NRTL, etc descrevem o coeficiente de atividade e a atividade. No caso de um modelo phi-phi é que iríamos colocar uma equação de estado para a fase líquida, que deve ser a mesma selecionada para a fase vapor e colocaríamos ideal na parte de atividade e coeficiente de atividade, já que nesse modelo eles não são considerados.

Ao terminar as configurações, clique em “Yes”.

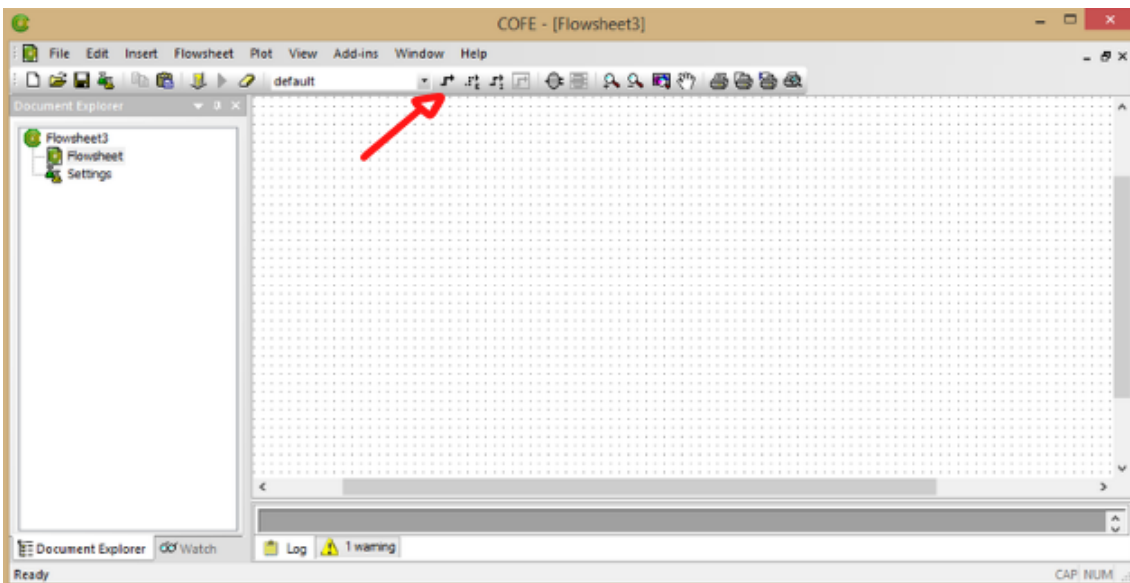


Após isso pode fechar essa guia.

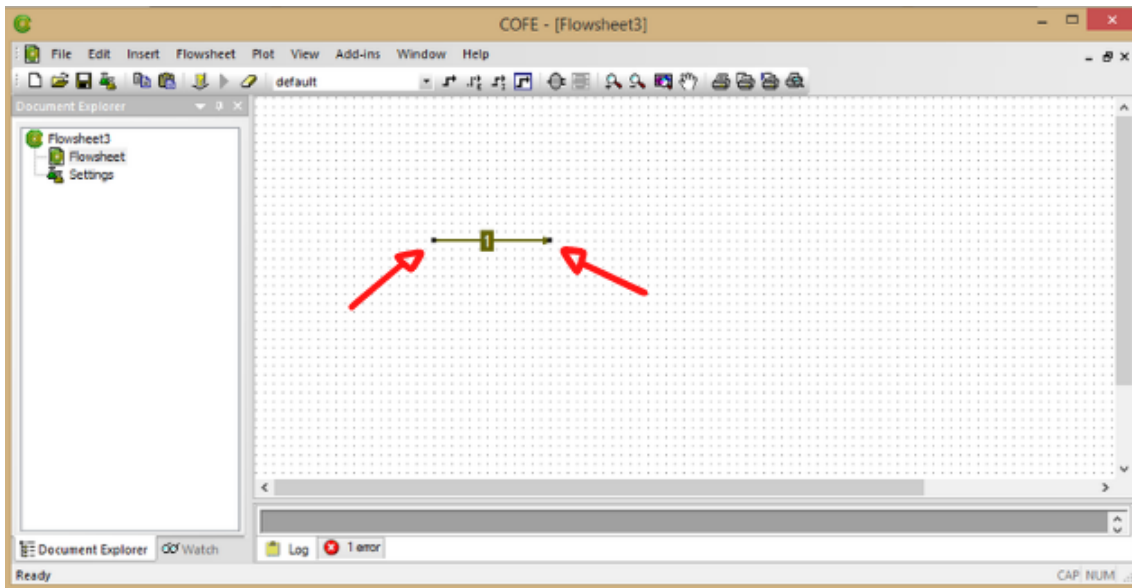


## 2.2 Adicionando uma corrente.

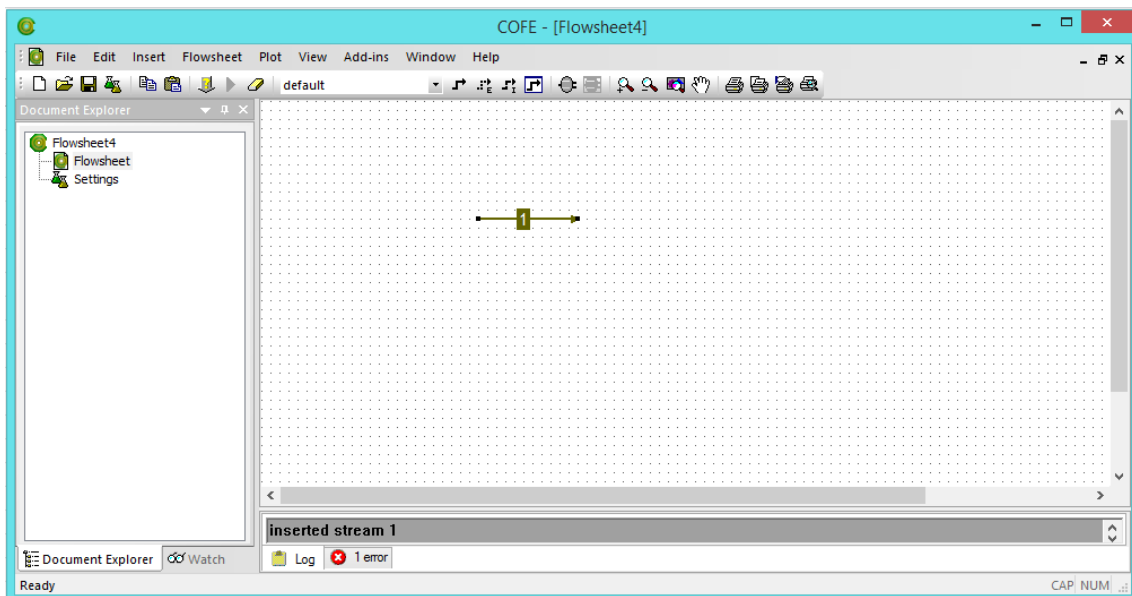
Para adicionar uma corrente clique na seta indicada na figura abaixo:



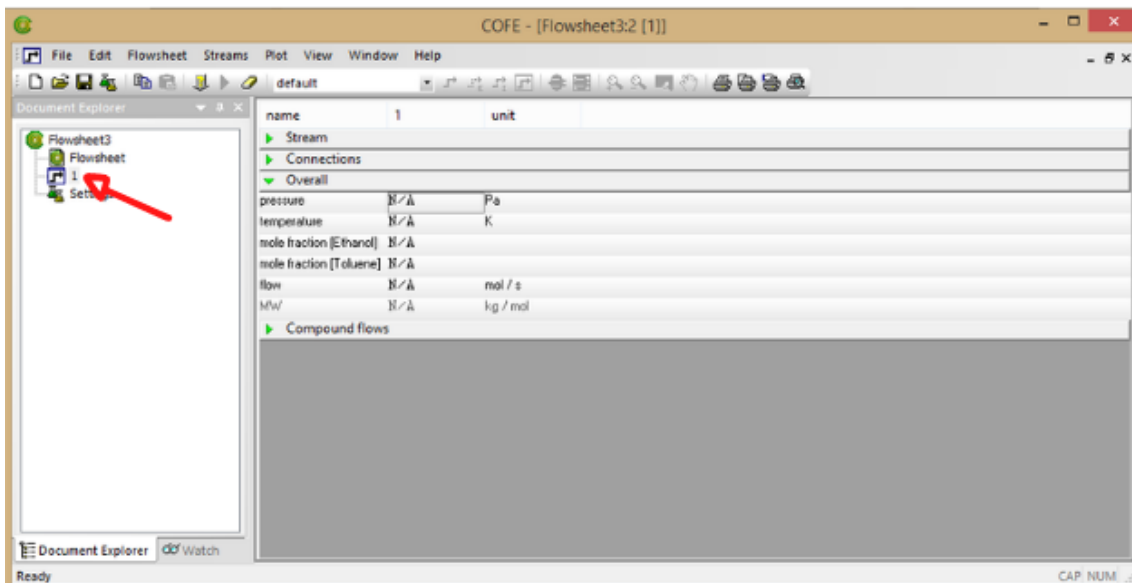
Clique na posição do quadro onde deseja começar sua corrente e posteriormente clique na posição onde deseja finalizá-la.



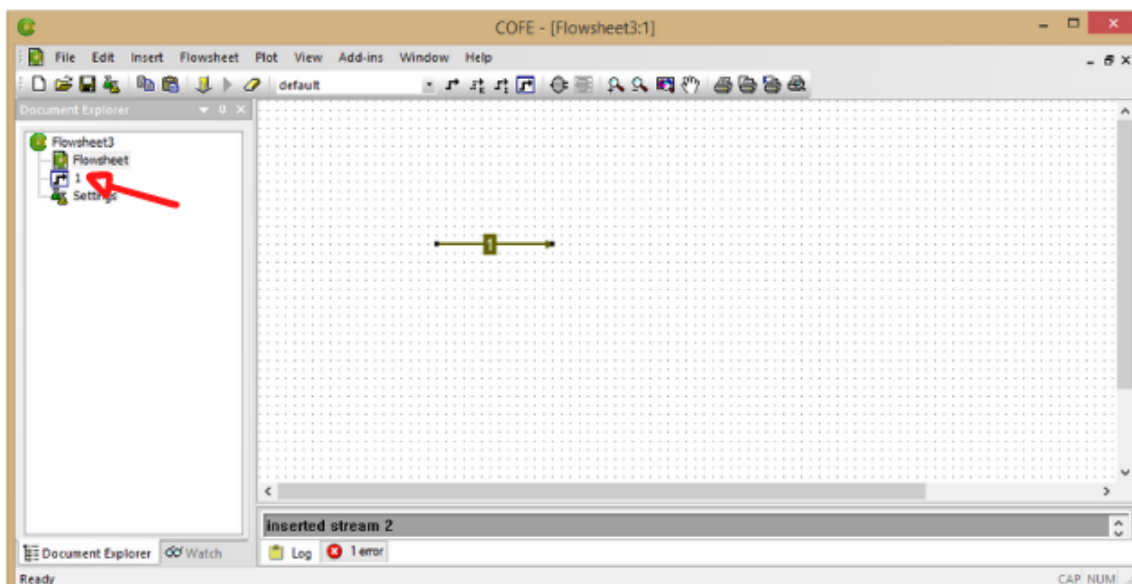
Após a criação desejada, clique duas vezes em cima do ícone dela para poder abrir as opções de caracterização da corrente, a qual terá um atalho criado na parte esquerda da tela.





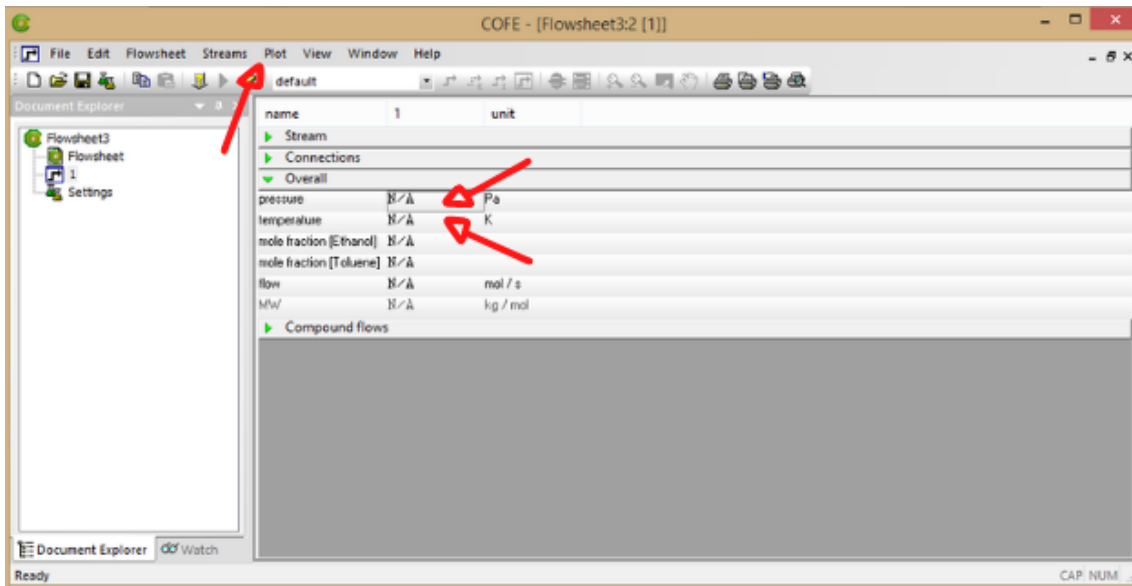


Quando desejar voltar para a tela de trabalho (onde aparecem os desenhos das correntes e equipamentos) clique em “Flowsheet”.

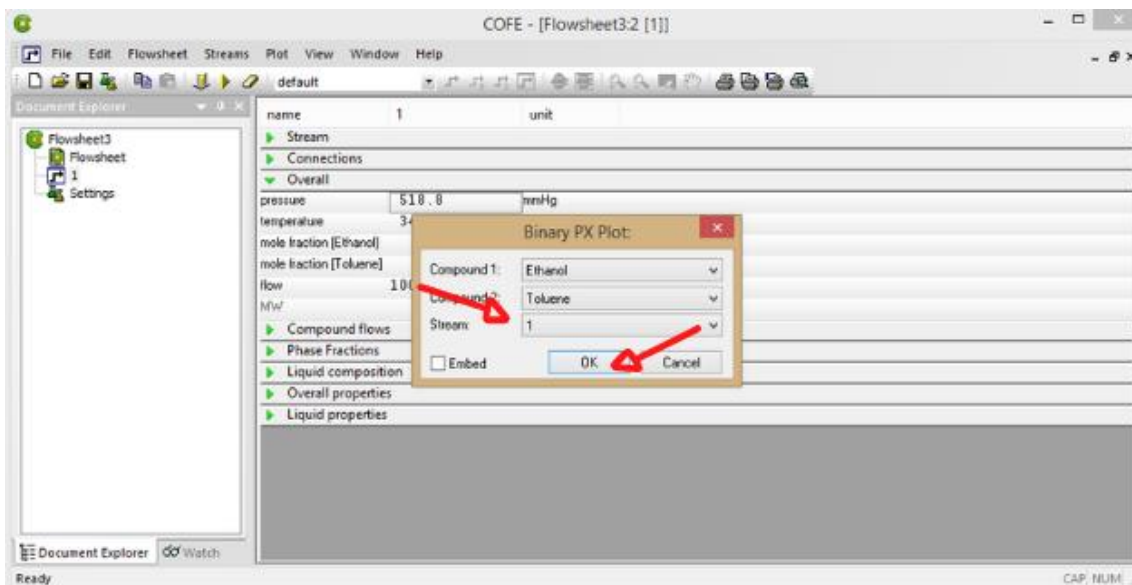


Para definir a temperatura e pressão da corrente clique primeiro na unidade desejada, ou então ele fará a conversão dos valores. Em seguida clique em “N/A” e insira os valores a serem utilizados, lembre que o simulador usa o sistema numérico americano, as outras propriedades da corrente também podem ser alteradas de maneira análoga. Para plotar o diagrama Txy ou Pxy, vá na parte superior em “Plot” e escolha o diagrama desejado.

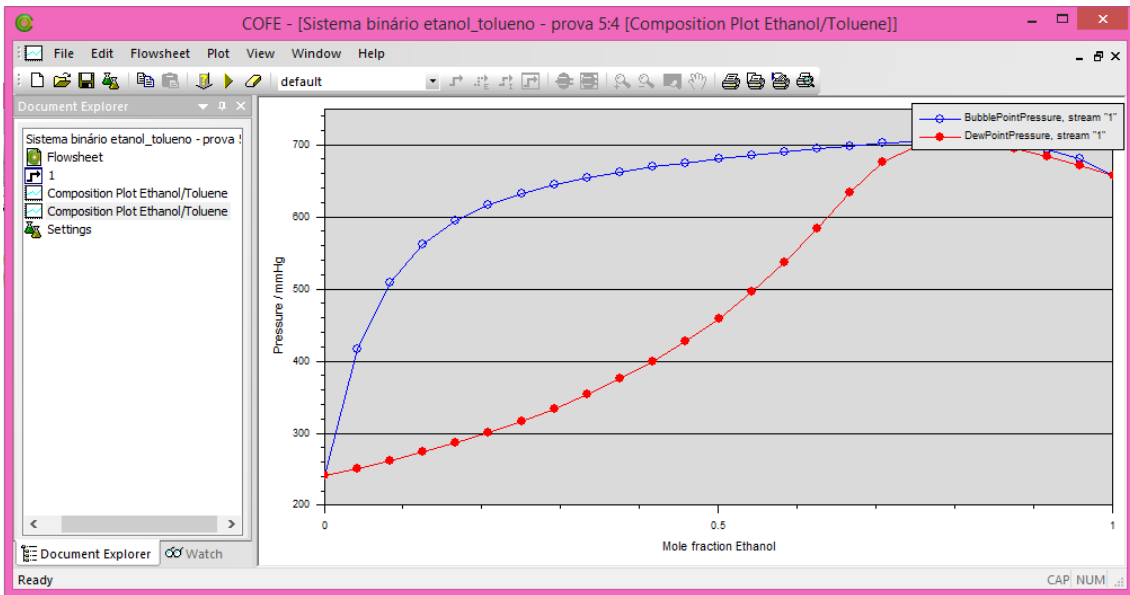
**Obs:** Para comparar a simulação com algum dado da temperatura, é necessário escolher temperatura e pressão no intervalo de temperatura e pressão dos dados a serem comparados. Se for um diagrama Pxy ou Txy, escolha o 3º valor (T e P) da tabela. A fração molar e vazão dos componentes não são tão relevantes para plotar o gráfico, então pode-se inserir valores aleatórios. Lembrando que Pxy é a T constante e Txy é a P constante.



Confira se a ordem dos componentes que serão plotados é a desejada em “*Compound 1*” (Composto 1) e “*Compound 2*” (Composto 2), em seguida confira em “*Stream*” se a corrente adequada será utilizada, clique em “OK” para finalizar.

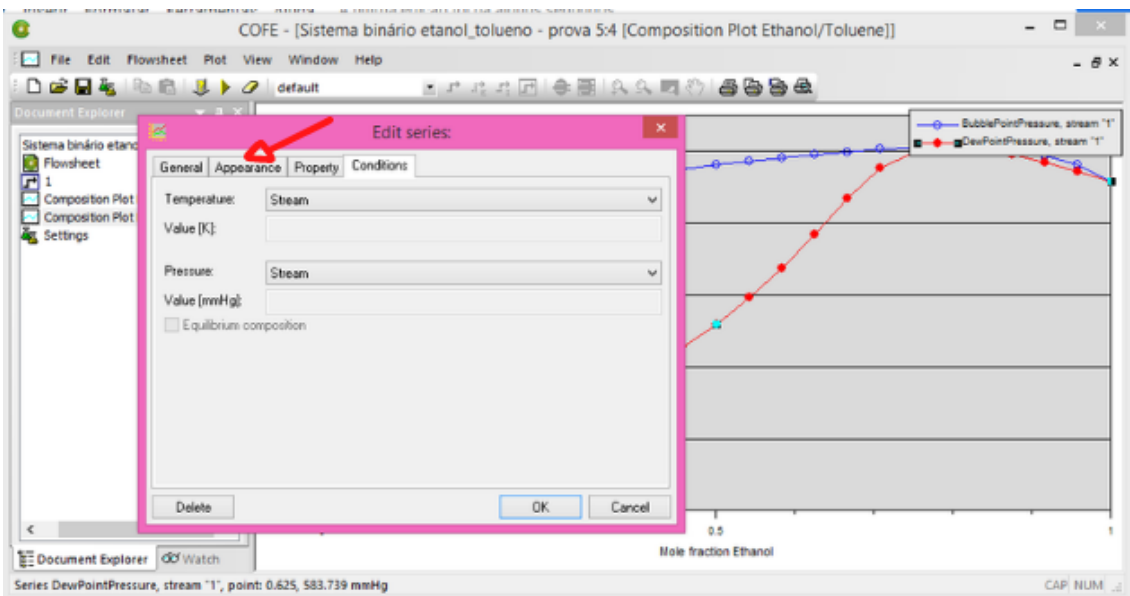


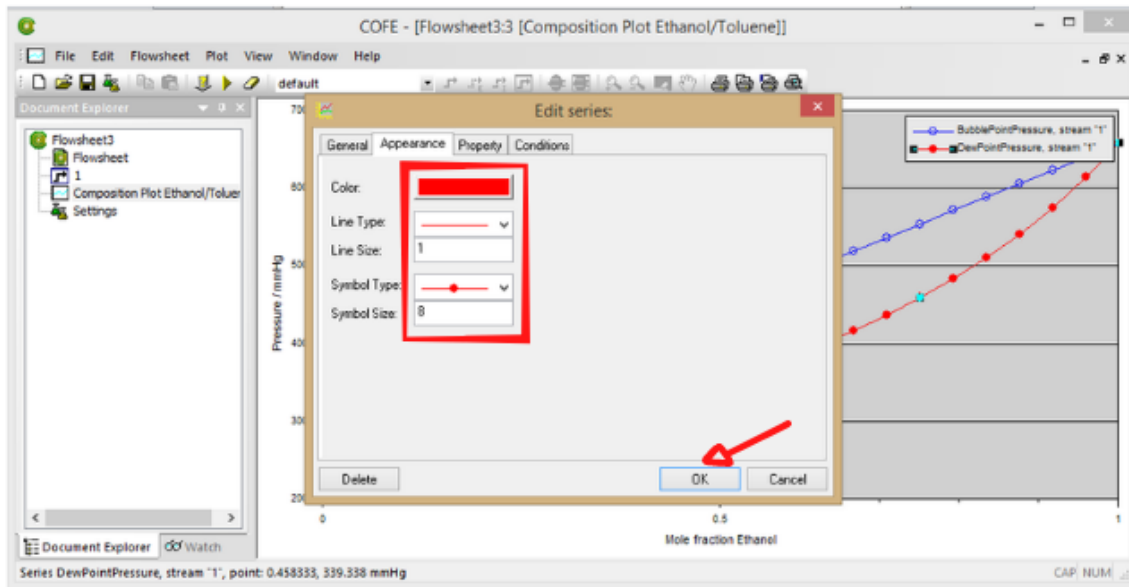
Em seguida o diagrama será apresentado com as abas localizadas à esquerda junto com a corrente.



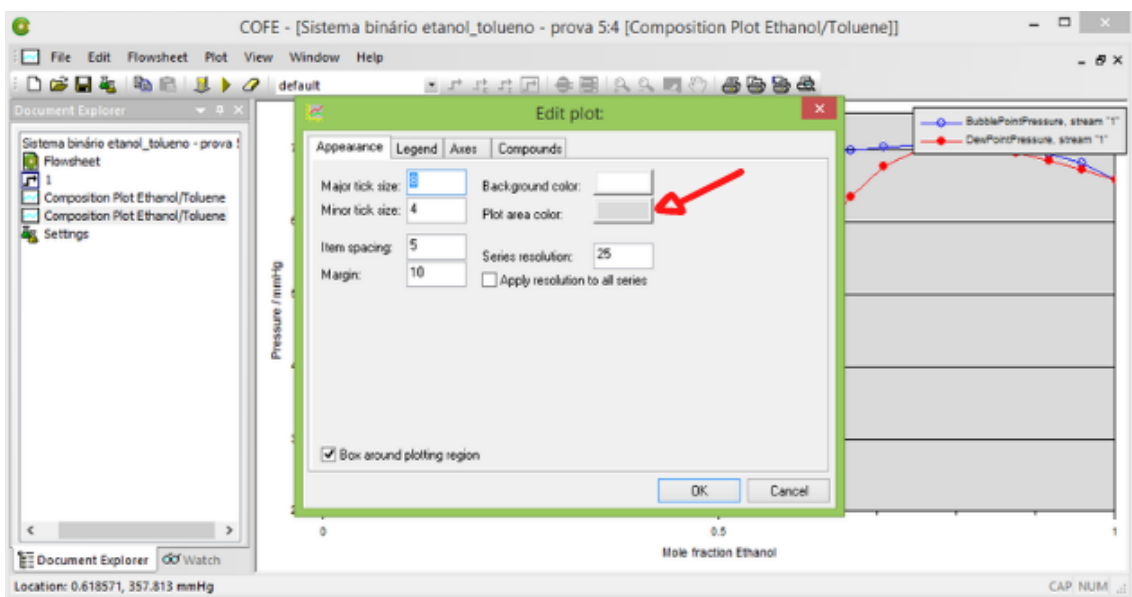
### 2.3 Opções de configuração do diagrama.

É possível alterar o estilo dos ícones da curva desejada, clicando duas vezes com o botão esquerdo sobre os pontos, seguindo para “*Appearance*” e escolhendo as opções em “*Symbol Type*”. Dentre outras configurações possíveis estão a cor “*Color*”, o tipo da linha “*Line type*”, os tamanhos da linha e símbolo, respectivamente com “*Line Size*” e “*Symbol Size*”. Após isso clique em “*OK*” para finalizar.

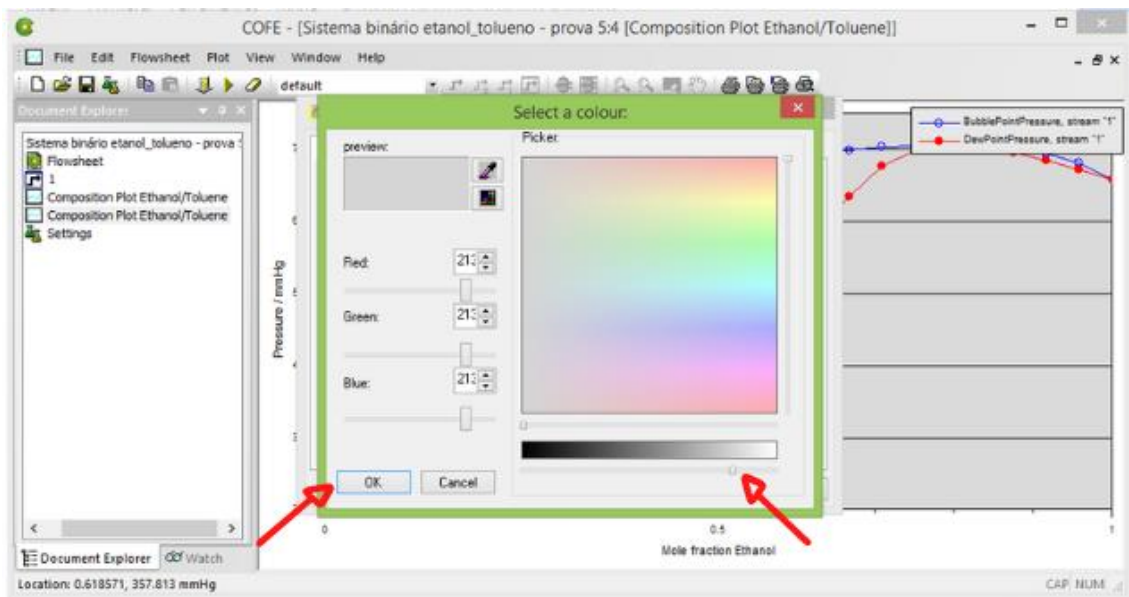




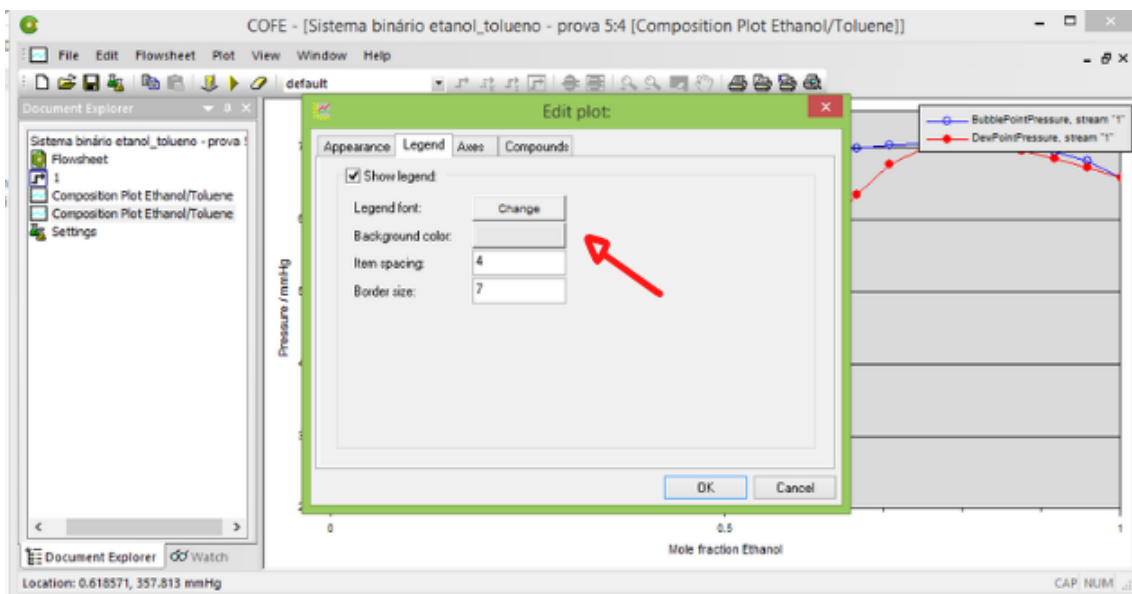
Clicando com o botão direito em cima da parte cinza do gráfico e escolhendo a opção “*Plot properties*” é possível adicionar novas configurações como a cor de fundo “*Background color*”, o espaçamento entre os índices “*Item spacing*”, a margem “*Margin*”, entre outras.

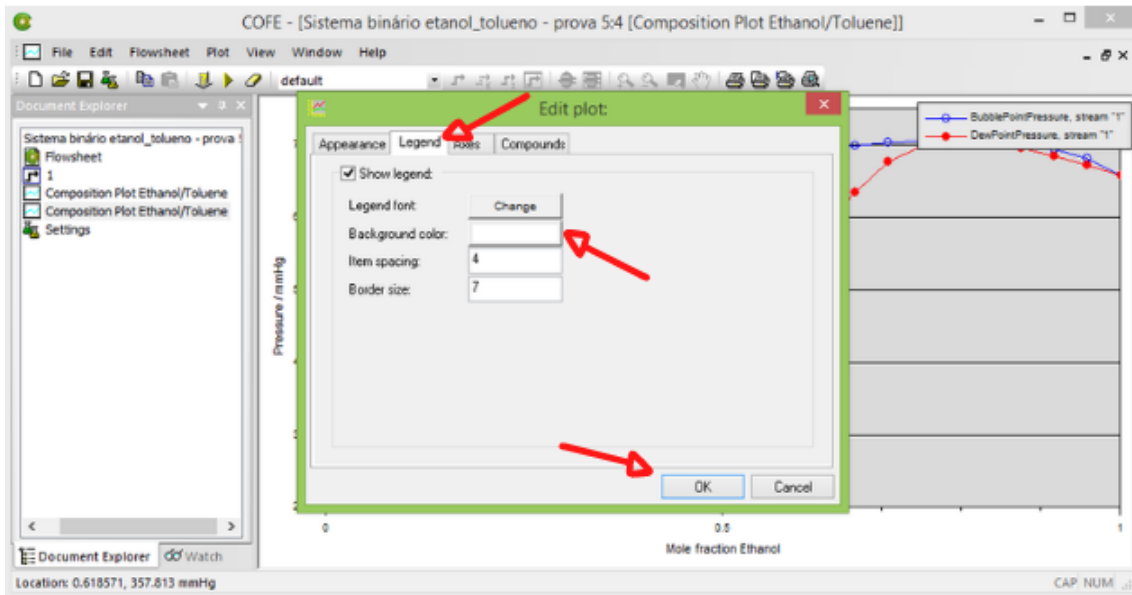


Para selecionar uma cor clique no botão da cor que deseja alterar, na janela que abrir clique em cima do tom desejado, e posteriormente regule a intensidade através da barra abaixo do quadro com as cores (no exemplo foi escolhida a cor branca). Também há a opção de selecionar a cor a partir de RGB (“*Red Green Blue*”), configurando a intensidade de cada um das três cores na parte esquerda da guia (onde aparecem os números e botões de rolagens). Após escolher a cor ela será mostrada no “*preview*”, em seguida, clique em “*OK*” para finalizar.

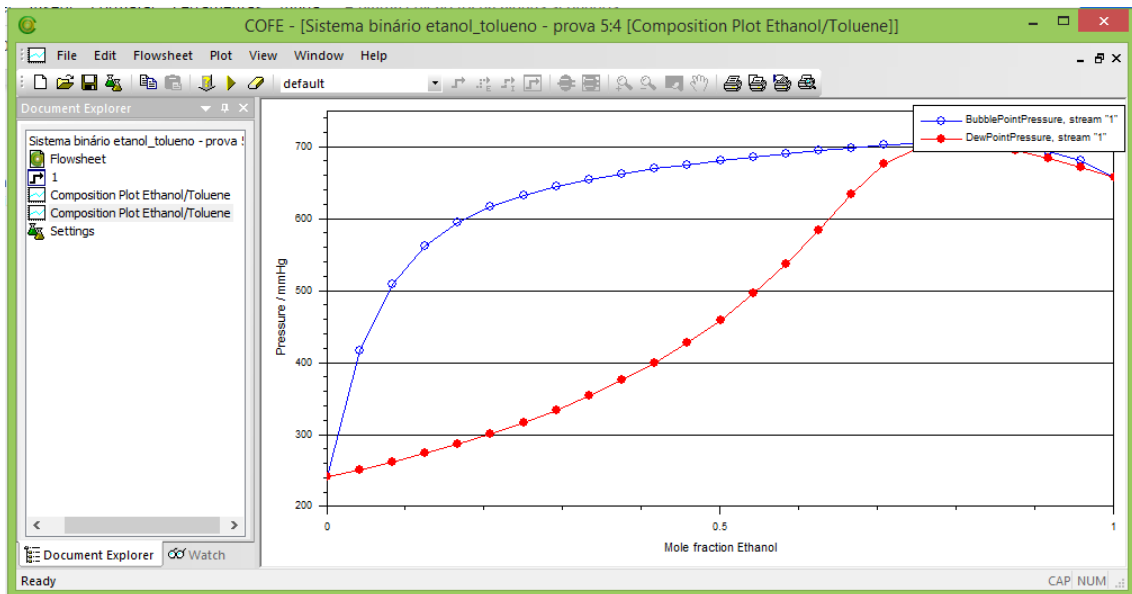


Ao clicar duas vezes em “*Legend*”, pode-se customizar a legenda do gráfico, a troca da cor de fundo do quadro de legenda tem um procedimento análogo ao apresentado anteriormente.

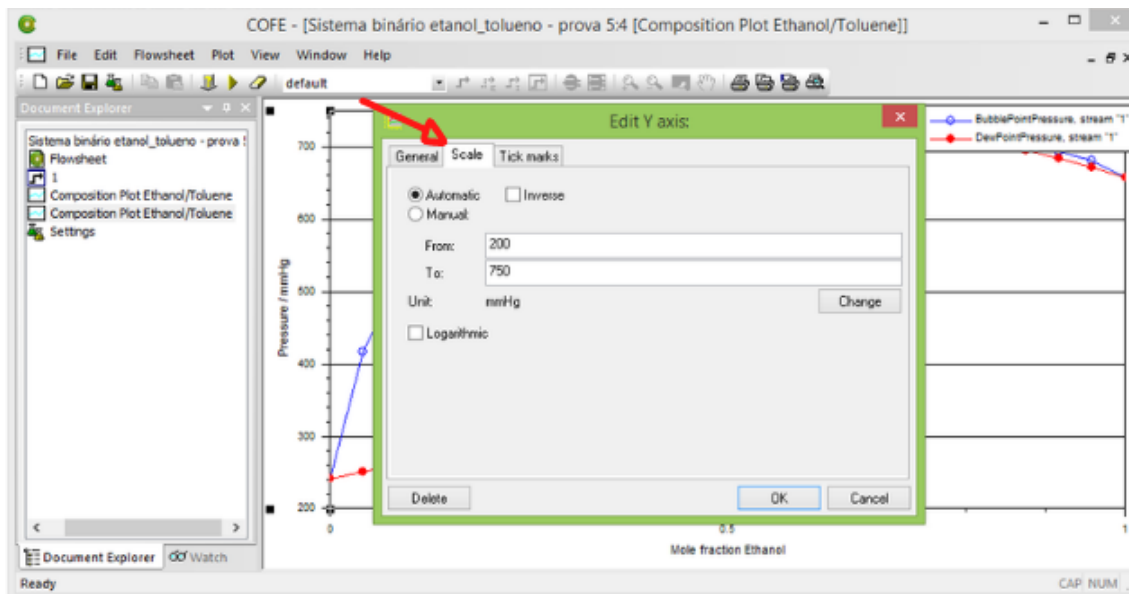




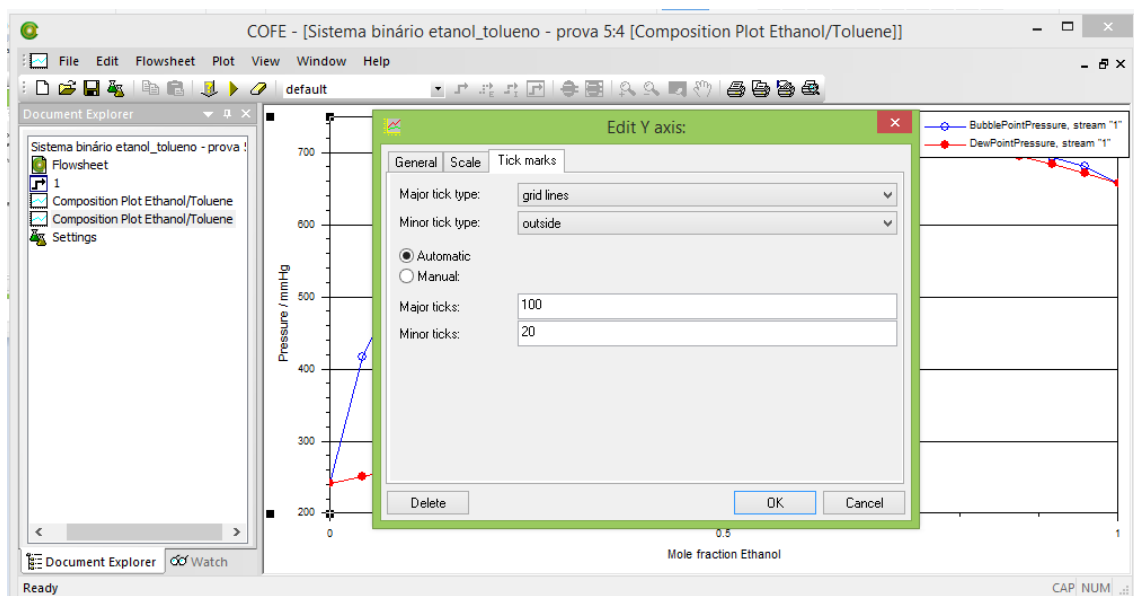
Ao terminar as configurações seu novo diagrama será mostrado.



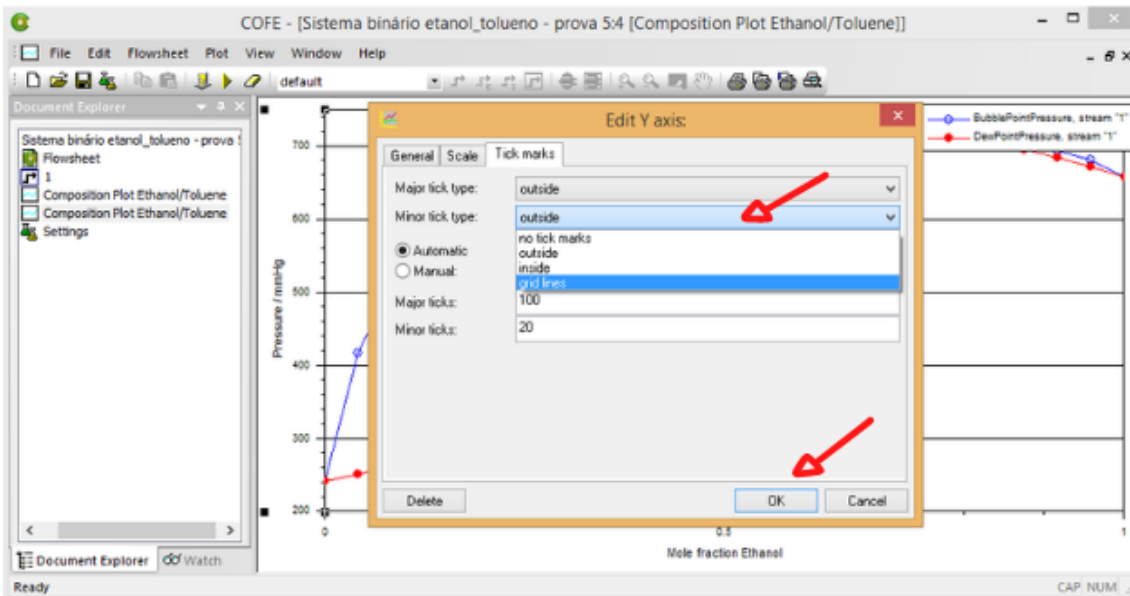
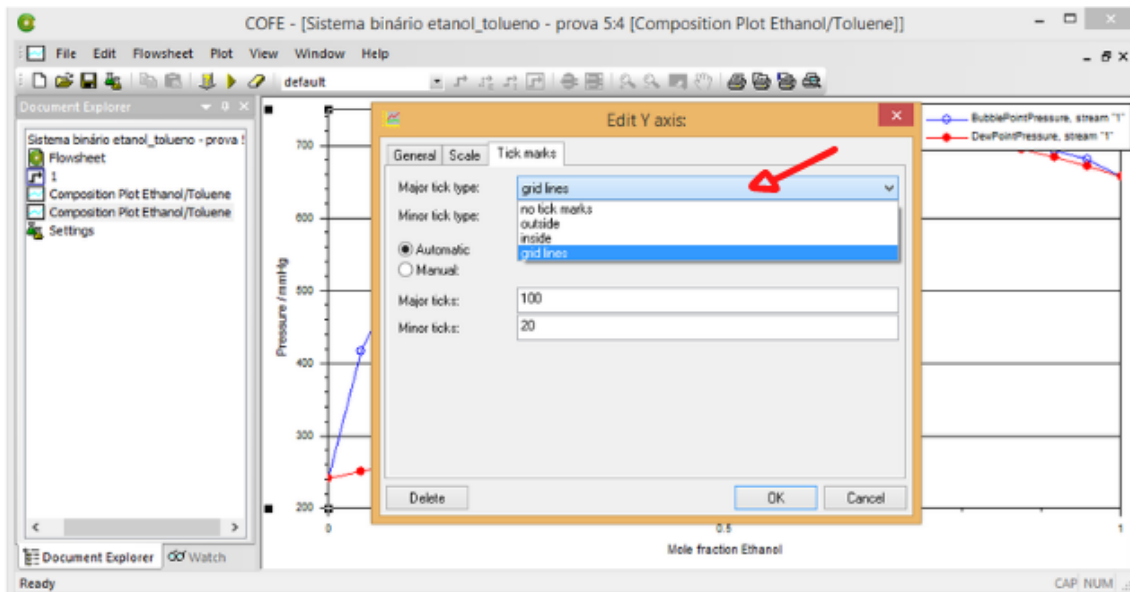
Para editar as configurações do eixo vertical, clique duas vezes em cima do eixo com o botão esquerdo.



Em “*Tick marks*”, configure (se necessário) a distância entre cada marcação principal e secundária com “*Major ticks*” e “*Minor ticks*” respectivamente.

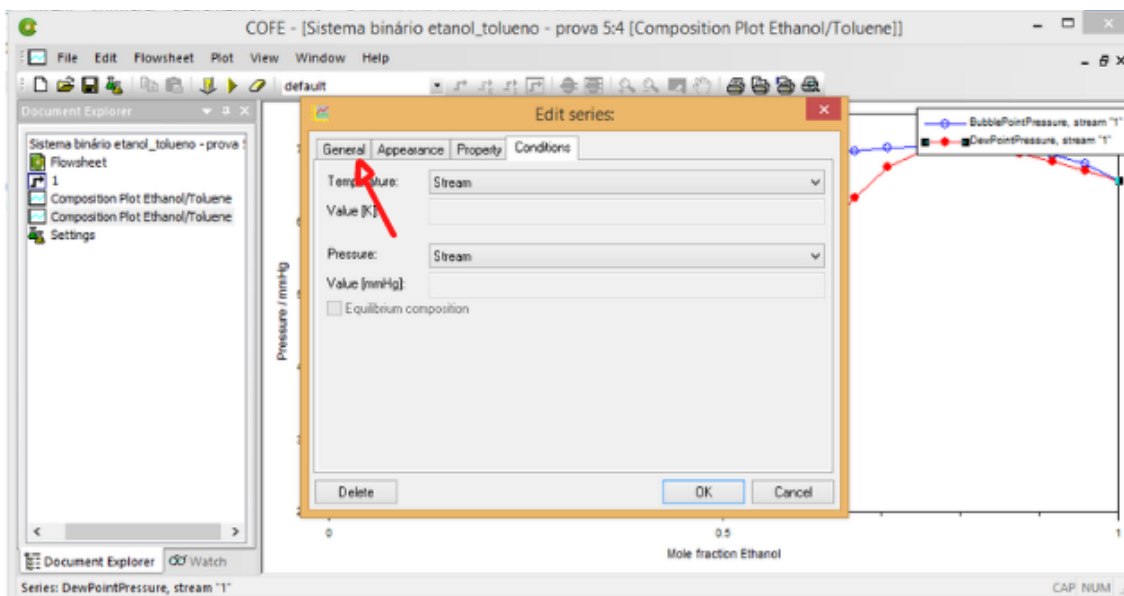
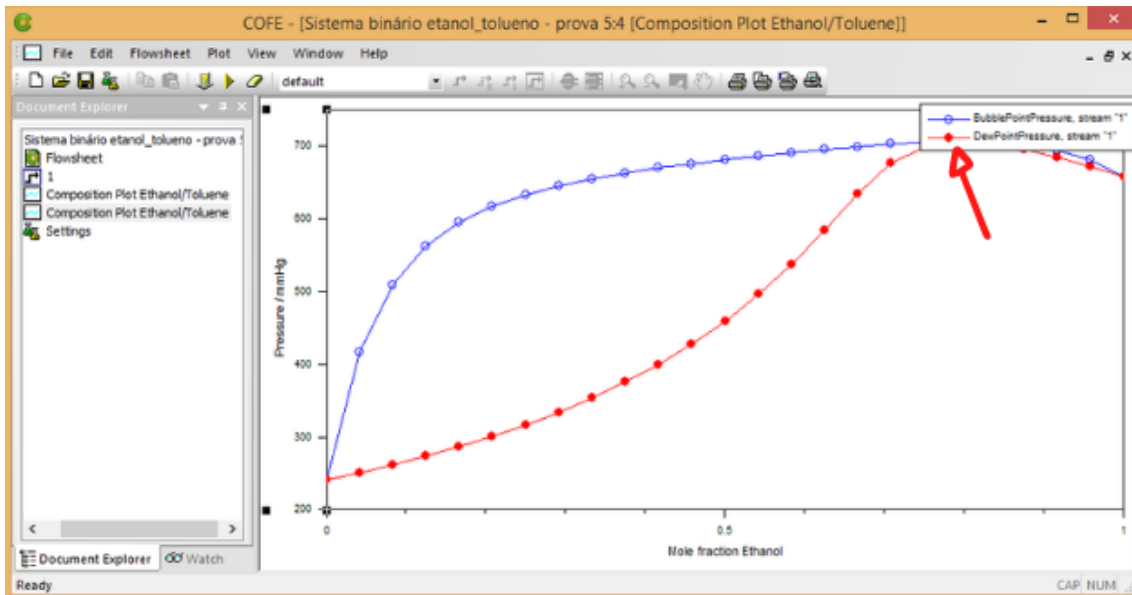


Além disso pode-se customizar o tipo das marcações principais e secundárias com “*Major tick type*” e “*Minor tick type*” respectivamente, como mostrado nas figuras abaixo. Após o término da configuração do eixo vertical clique em “*OK*” para confirmar.

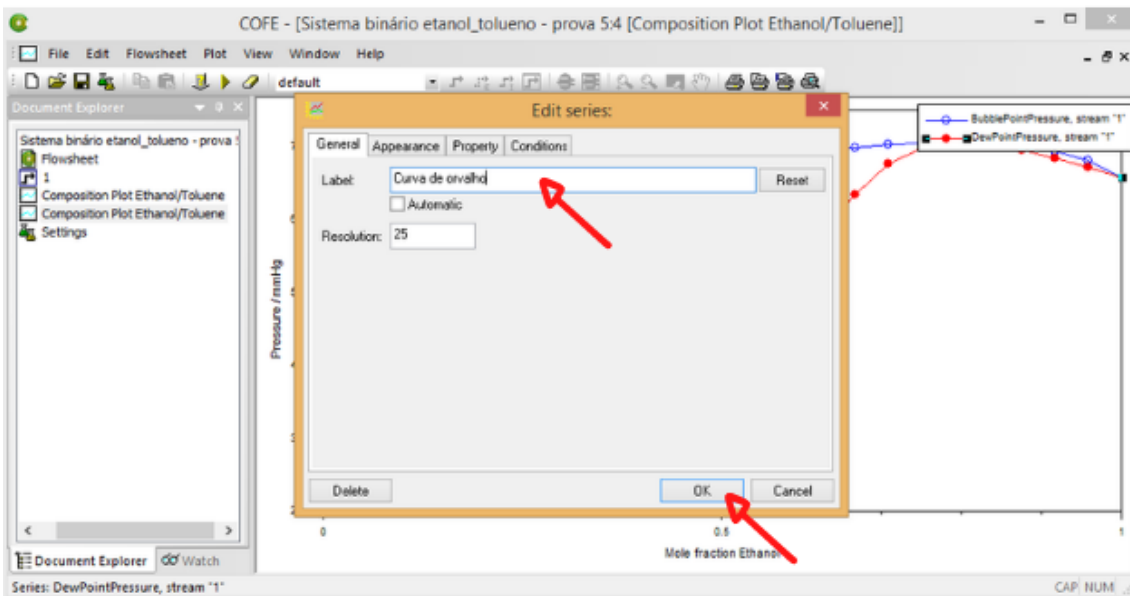
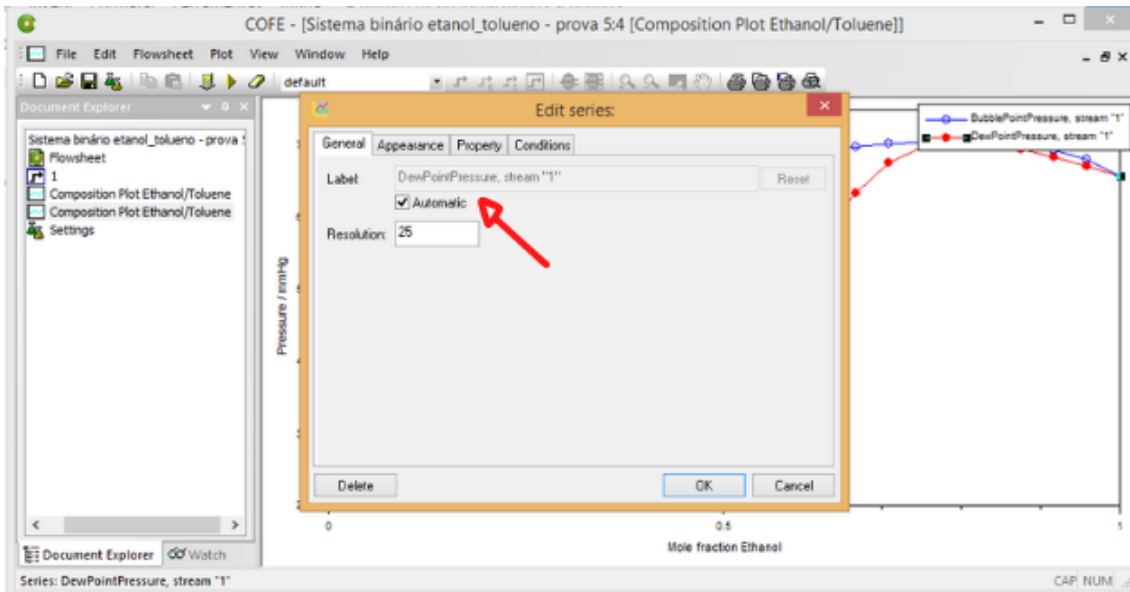


Para editar as legendas do seu gráfico clique duas vezes sobre a legenda, após isso vá até a parte “General”, como mostrado nas figuras abaixo.

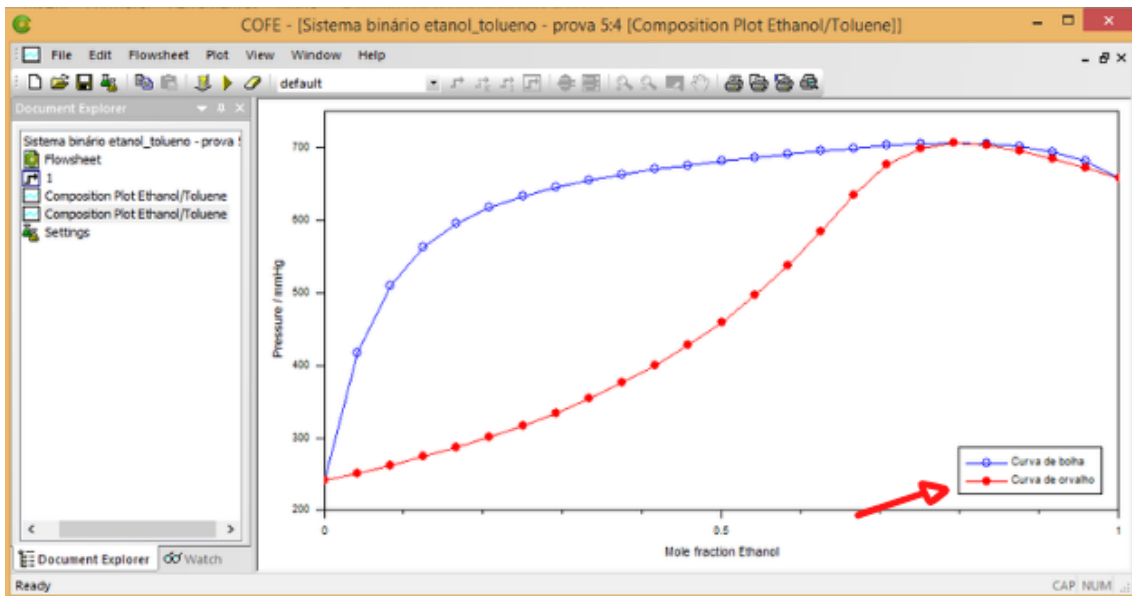
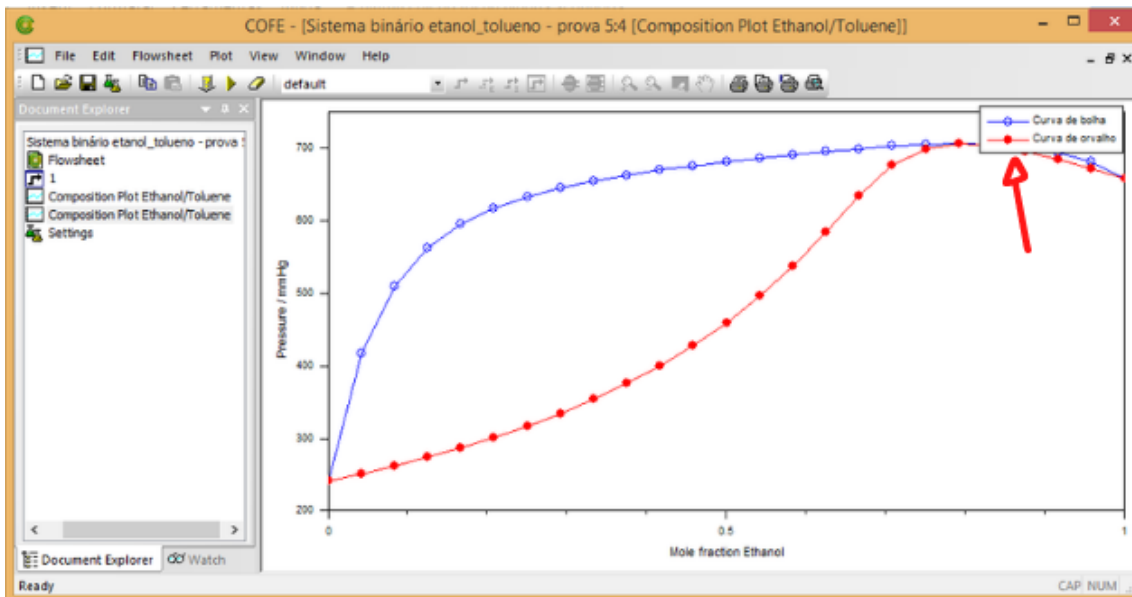




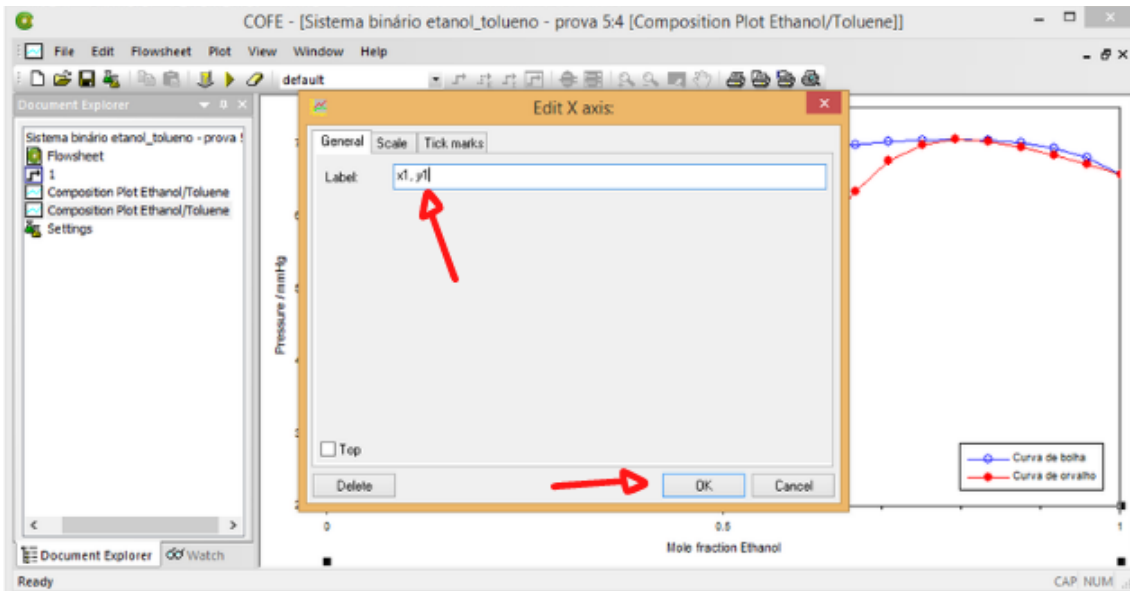
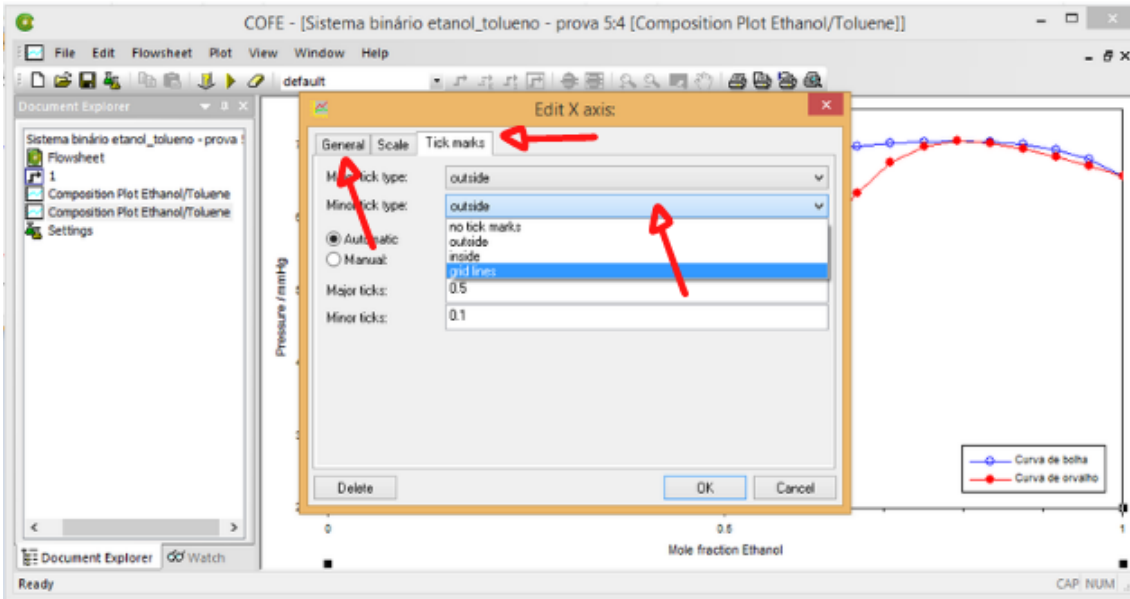
Para editar o texto da legenda, clique no botão indicado para desmarcar a opção “Automatic”. Após isso altere para o texto desejado e finalize o processo clicando em “OK”, como nas figuras abaixo.



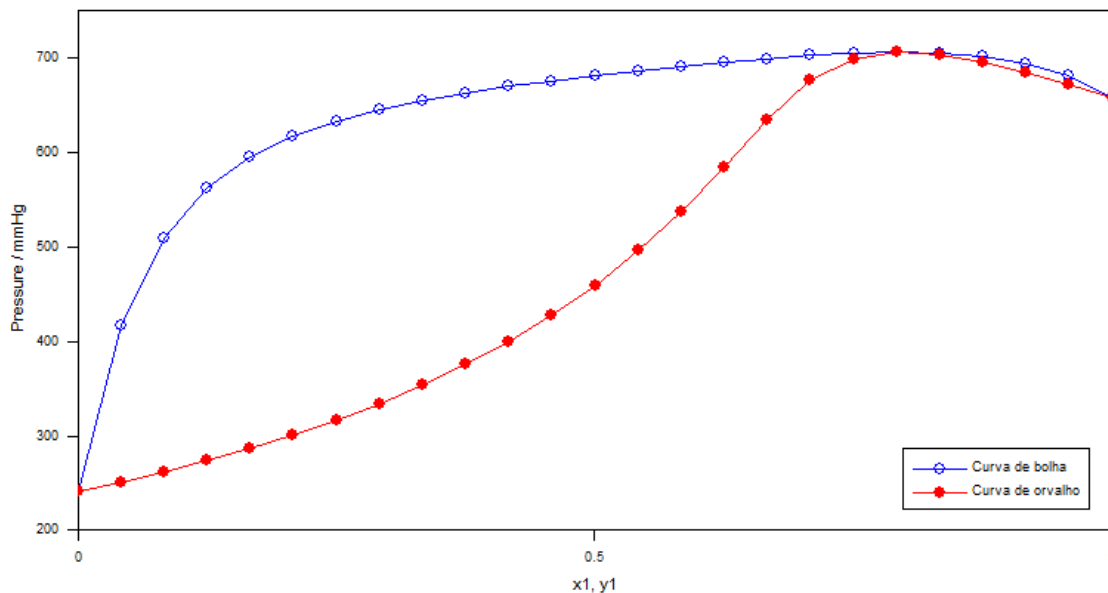
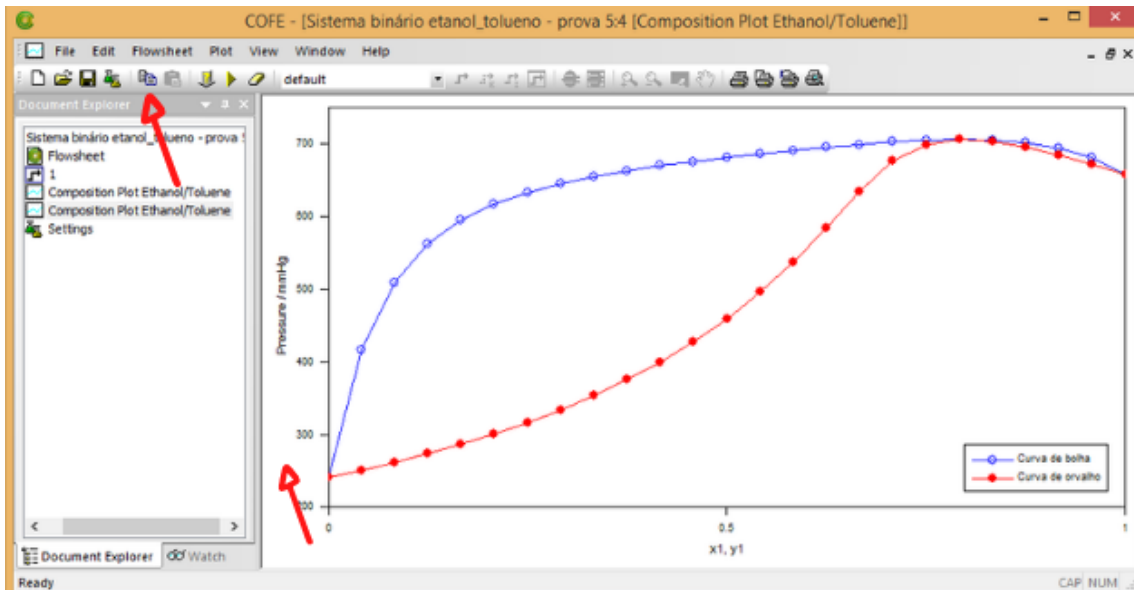
Para edição da outra parte da legenda, repita as mesmas etapas. A configuração da posição da legenda pode ser feita ao clicar nela e arrastar para o local desejado, assim como mostrado abaixo.



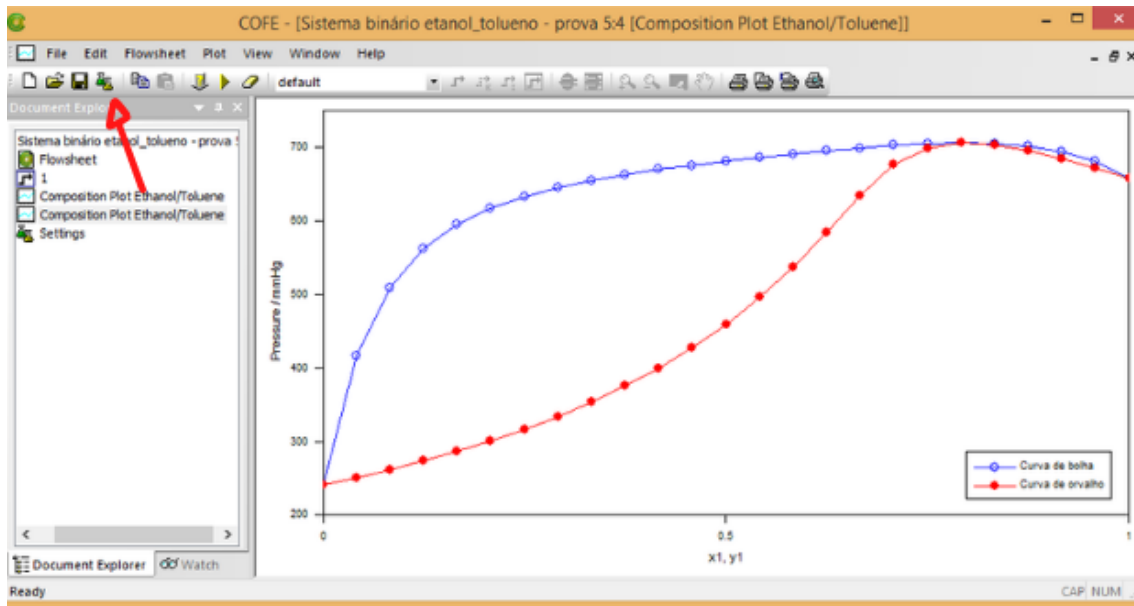
Para configurar o eixo horizontal, repita os mesmos procedimentos citados para o eixo vertical. Indo em “General” pode-se alterar a legenda do eixo, após terminar o processo clique em “OK” para confirmar, como nos passos abaixo.



Para copiar o gráfico basta clicar na parte branca, para garantir que nada esteja selecionado, clicar no botão indicado pela seta na parte superior para copiar e usar *ctrl+v* onde se deseja colar.

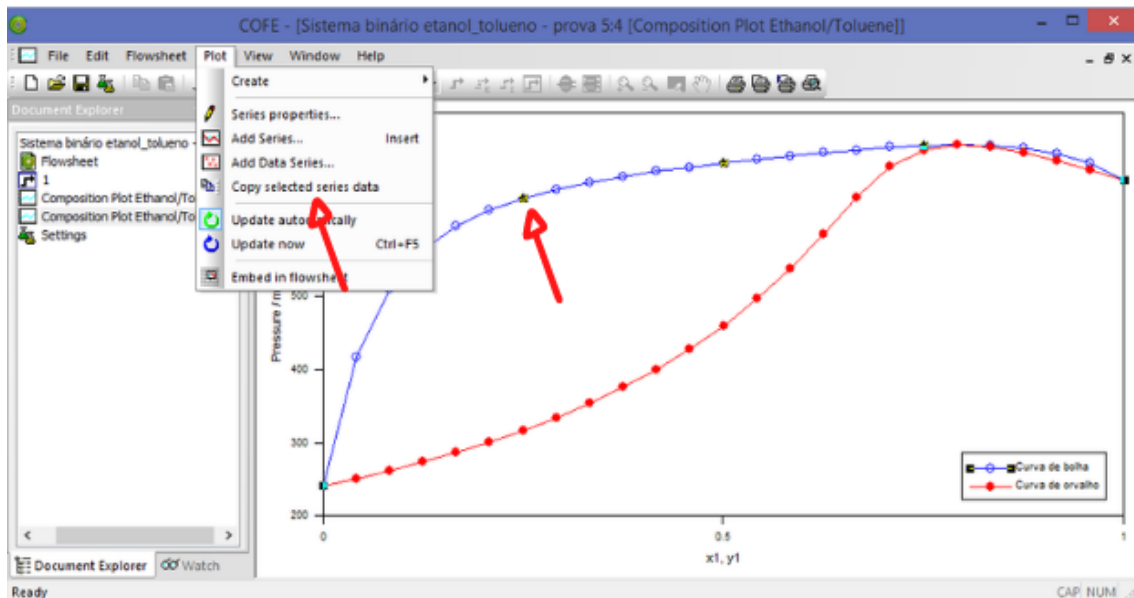


Caso você deseje usar outro modelo, basta clicar duas vezes em “*setings*”, duas vezes no sistema que está sendo utilizado e escolher outro modelo. Automaticamente o gráfico será atualizado.



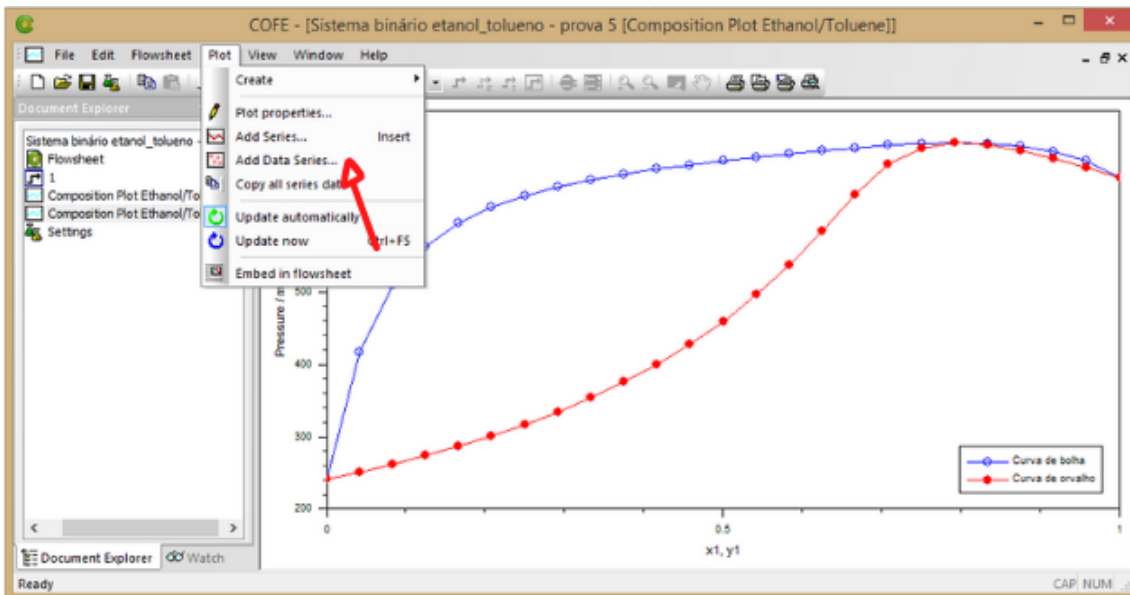
## 2.4 Copiando e inserindo dados.

Para copiar os valores calculados no gráfico, clique na curva e depois vá na opção “*Copy selected series data*”, assim como indicado:

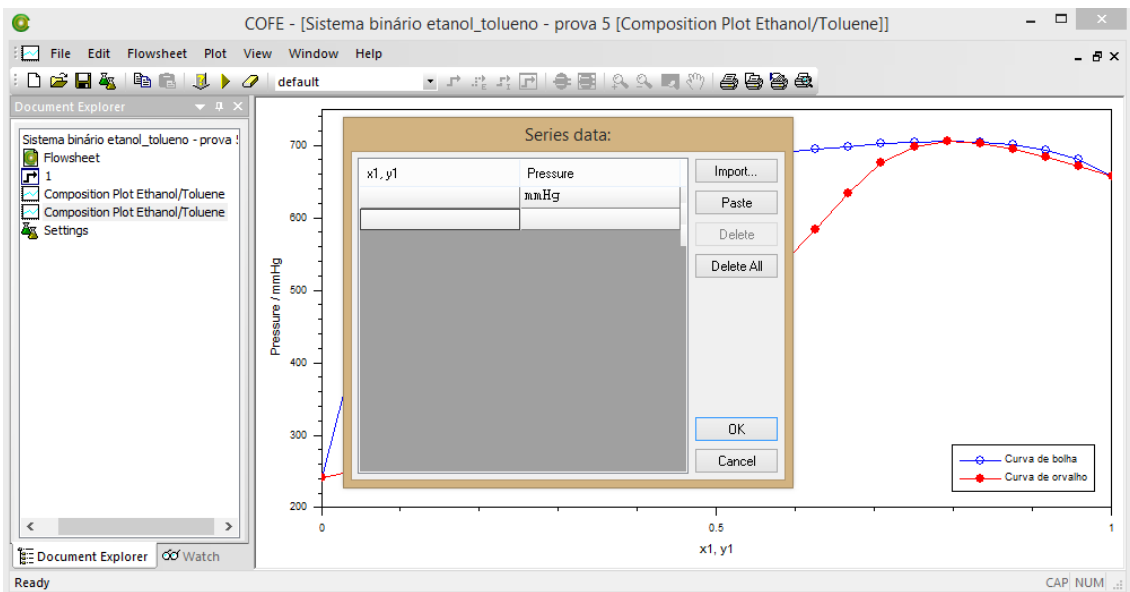


**Obs:** Os valores deverão ser copiados com ponto, pois o COFE usa a notação americana.

Para adicionar dados providos de artigos científicos, vá em “*Add Data Series...*”, como indicado:



Ao clicar lá uma nova janela aparecerá e nela terão duas colunas, uma para o valor de  $x_1$  ou  $y_1$  e outra para a pressão em mmHg. Além da opção de importar arquivos “Import”, a de colar “Paste” (que será utilizada a seguir), deletar e deletar tudo “Delete” e “Delete All” respectivamente.



Para inserir os dados vá no artigo que contém os dados desejados.

TABLE 4

Vapor-liquid equilibria in the system ethanol(1)-toluene(2)

$P(\text{torr})$	$x_1$	$y_1$	$P(\text{torr})$	$x_1$	$y_1$
$T = 333.15 \text{ K}$			$T = 338.15 \text{ K}$		
139.8	0.000	0.000	169.3	0.000	0.000
268.8	0.080	0.504	272.4	0.052	0.394
314.0	0.158	0.589	368.4	0.145	0.576
354.9	0.324	0.656	426.0	0.294	0.652
374.8	0.519	0.699	450.3	0.412	0.689
382.1	0.625	0.725	472.0	0.635	0.732
385.8	0.758	0.766	476.1	0.708	0.756
385.9	0.778	0.778 *	478.1	0.761	0.774
385.1	0.793	0.782	478.4	0.784	0.784 *
384.4	0.826	0.800	478.0	0.804	0.794
373.5	0.934	0.885	474.2	0.874	0.840
360.4	0.980	0.962	458.4	0.958	0.926
350.8	1.000	1.000	436.6	1.000	1.000
$T = 343.15 \text{ K}$			$T = 348.15 \text{ K}$		
204.6	0.000	0.000	245.0	0.000	0.000
242.8	0.012	0.164	331.9	0.028	0.280
394.4	0.096	0.508	518.8	0.130	0.568
542.0	0.376	0.679	631.4	0.300	0.664
557.4	0.456	0.700	673.4	0.464	0.705
569.9	0.560	0.720	691.9	0.564	0.728
585.7	0.724	0.766	705.2	0.681	0.759
588.1	0.775	0.788	712.9	0.762	0.789
588.4	0.793	0.793 *	714.6	0.805	0.805 *
586.2	0.825	0.811	714.2	0.828	0.820
571.6	0.932	0.896	713.1	0.850	0.833
554.2	0.982	0.966	690.6	0.958	0.934
540.7	1.000	1.000	665.3	1.000	1.000

\* Azeotrope.

Página 7 / 9

Digite os dados (lembre-se de usar a notação inglesa) de cada curva separados, em um bloco de notas ou no excel, para facilitar a coleta.

A	B	C	D	E
$x_1$	$P[\text{torr}]$		$y_1$	$P[\text{torr}]$
0.000	245.0		0.000	245.0
0.028	331.9		0.280	331.9
0.130	518.8		0.568	518.8
0.300	631.4		0.664	631.4
0.464	673.4		0.705	673.4
0.564	691.9		0.728	691.9
0.681	705.2		0.759	705.2
0.762	712.9		0.789	712.9
0.805	714.6		0.805	714.6
0.828	714.2		0.820	714.2
0.850	713.1		0.833	713.1
0.958	690.6		0.934	690.6
1.000	665.3		1.000	665.3

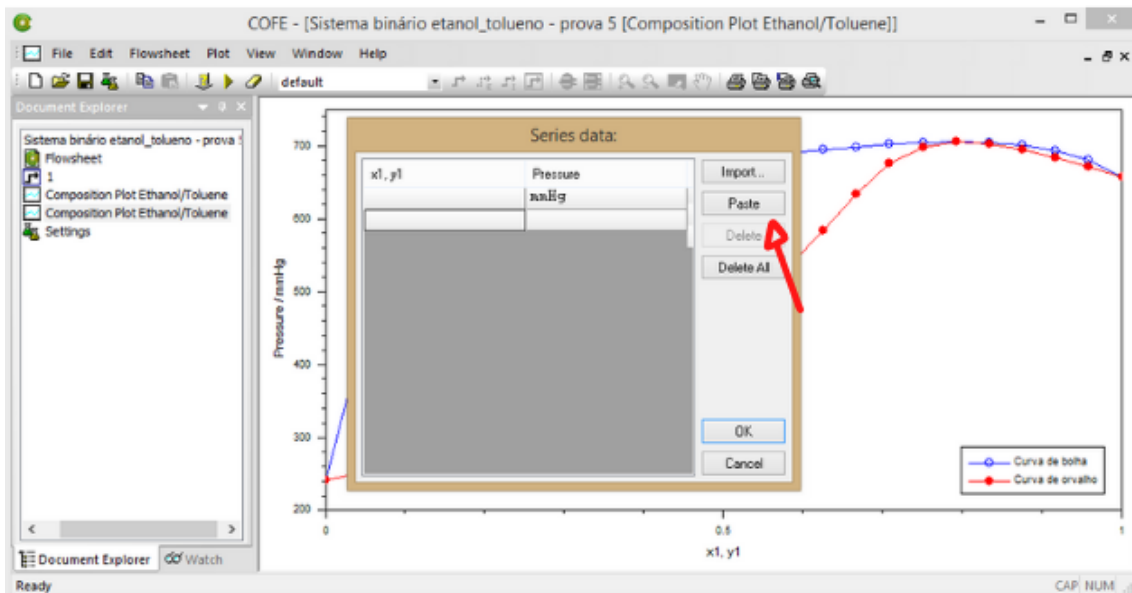
Em seguida, selecione os valores de uma das curvas e copie, utilizando botão direito e escolhendo "Copy" ou "Copiar", ou use  $ctrl + c$ .



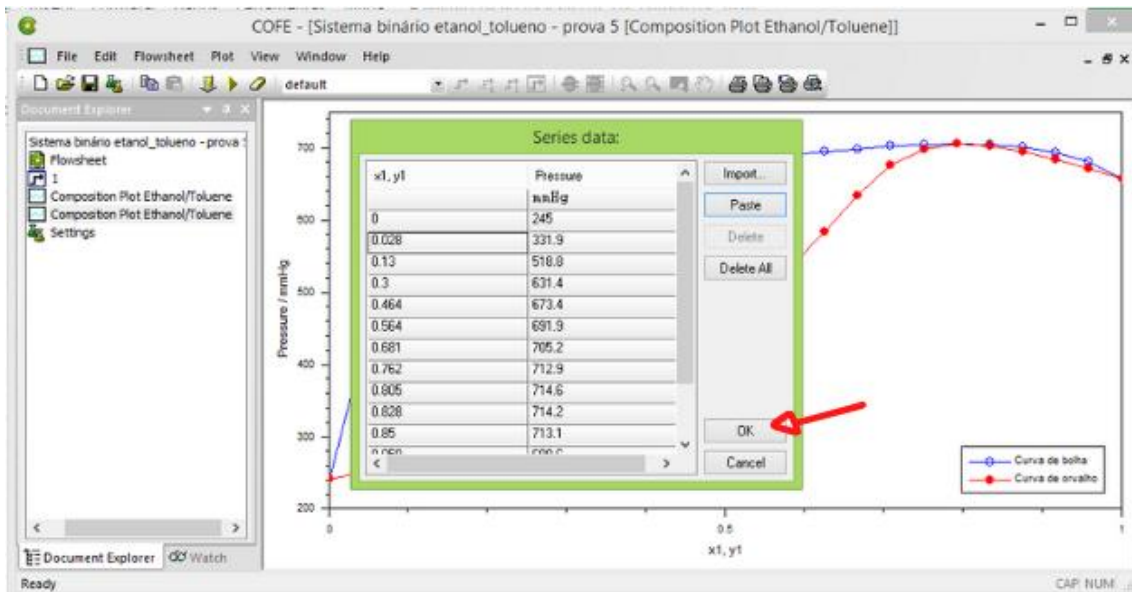
4     $f_x$  | 0.000

A	B	C	D	E
x1	P[torr]		y1	P[torr]
0.000	245.0		0.000	245.0
0.028	331.9		0.280	331.9
0.130	518.8		0.568	518.8
0.300	631.4		0.664	631.4
0.464	673.4		0.705	673.4
0.564	691.9		0.728	691.9
0.681	705.2		0.759	705.2
0.762	712.9		0.789	712.9
0.805	714.6		0.805	714.6
0.828	714.2		0.820	714.2
0.850	713.1		0.833	713.1
0.958	690.6		0.934	690.6
1.000	665.3		1.000	665.3

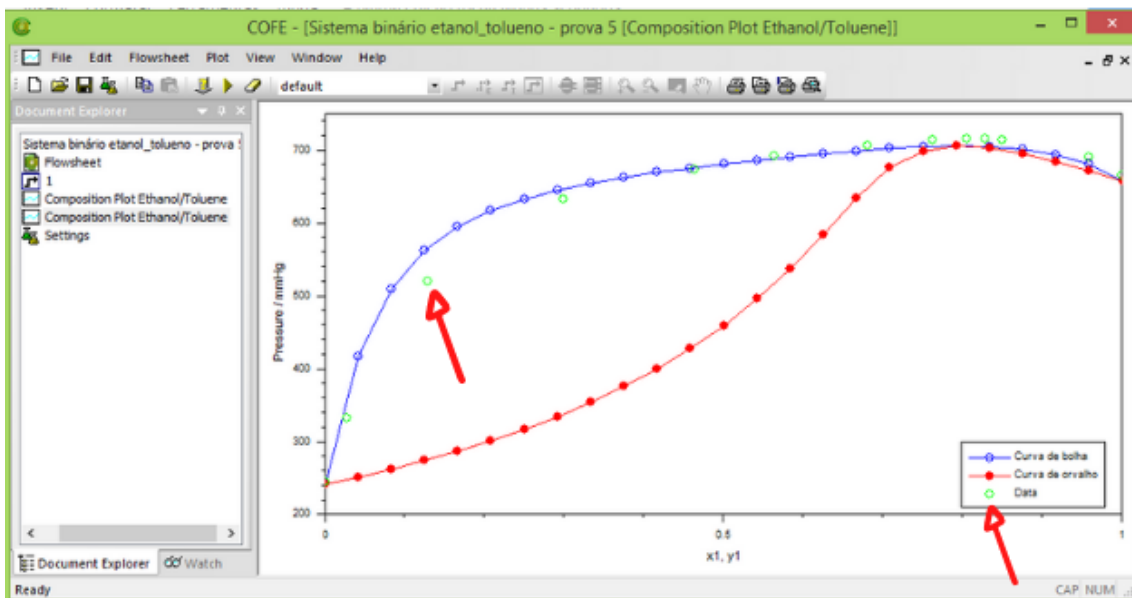
Após essa etapa, retorne para a janela do COCO-COFE e clique em “Paste” como indicado:



Para finalizar clique em “OK”.



Observe que foram inseridos novos pontos no seu diagrama:

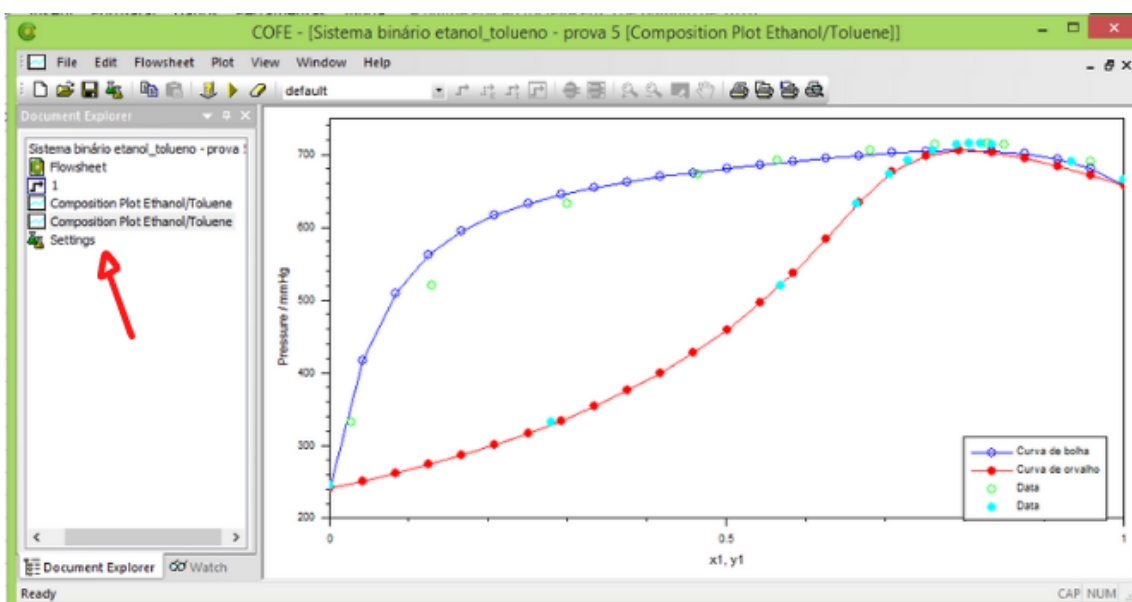


Repita o procedimento para a outra curva

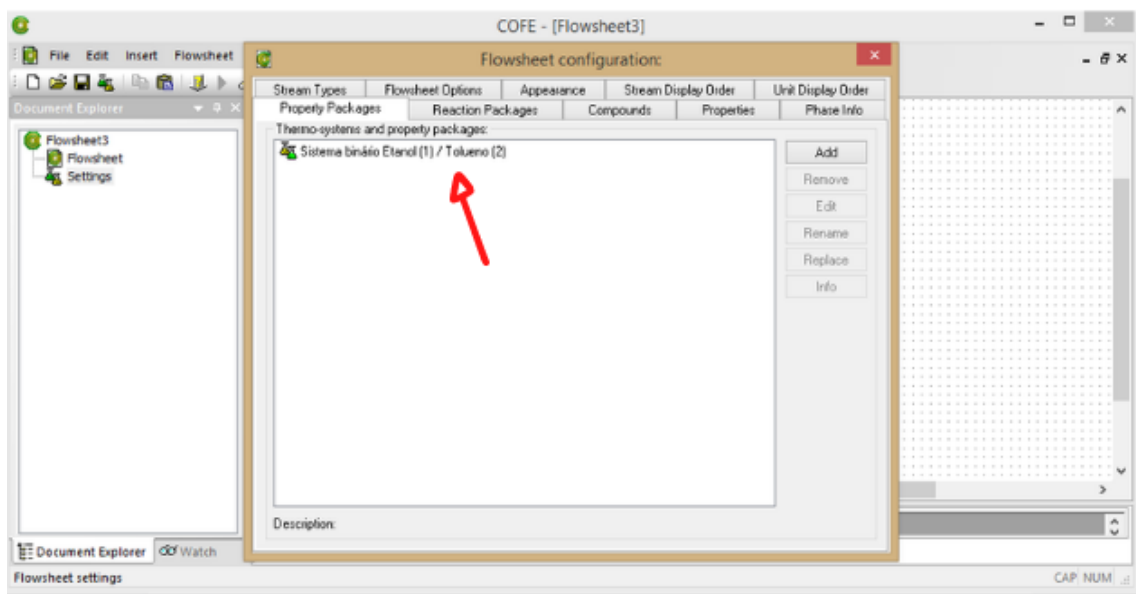
**Obs:** Esses pontos não ficam salvos ao abrir o arquivo da simulação novamente, mesmo salvando o arquivo, portanto deixe o arquivo com os dados fácil caso precise novamente no futuro.

## 2.5 Encontrando os valores dos parâmetros wilson, nrtl, entre outros no simulador.

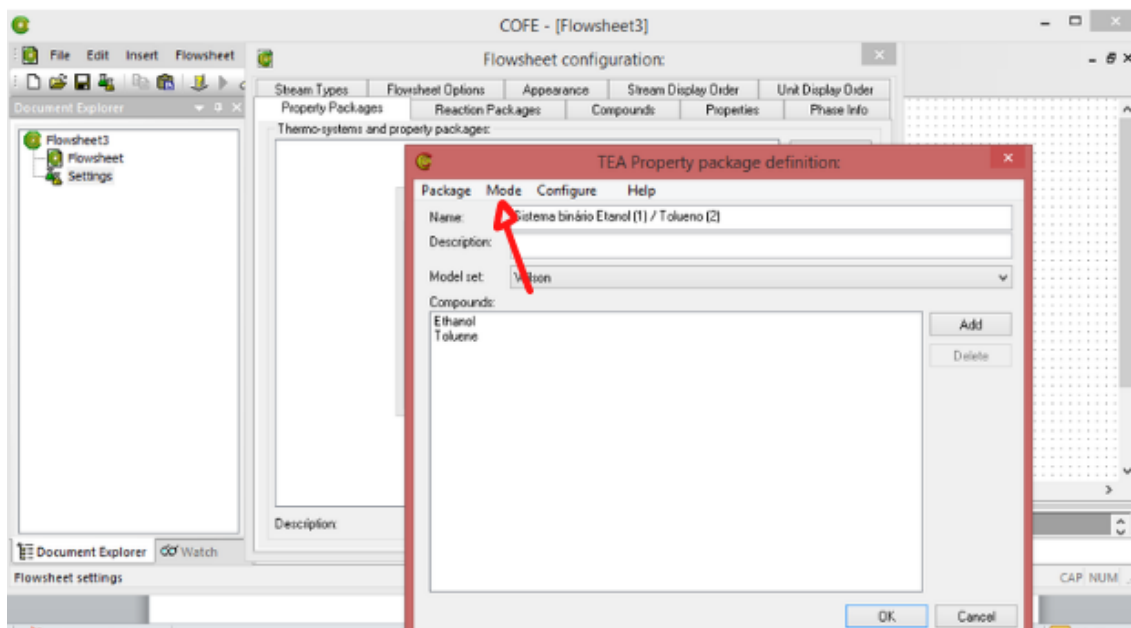
Primeiro clique em “Settings” como indicado na figura abaixo.



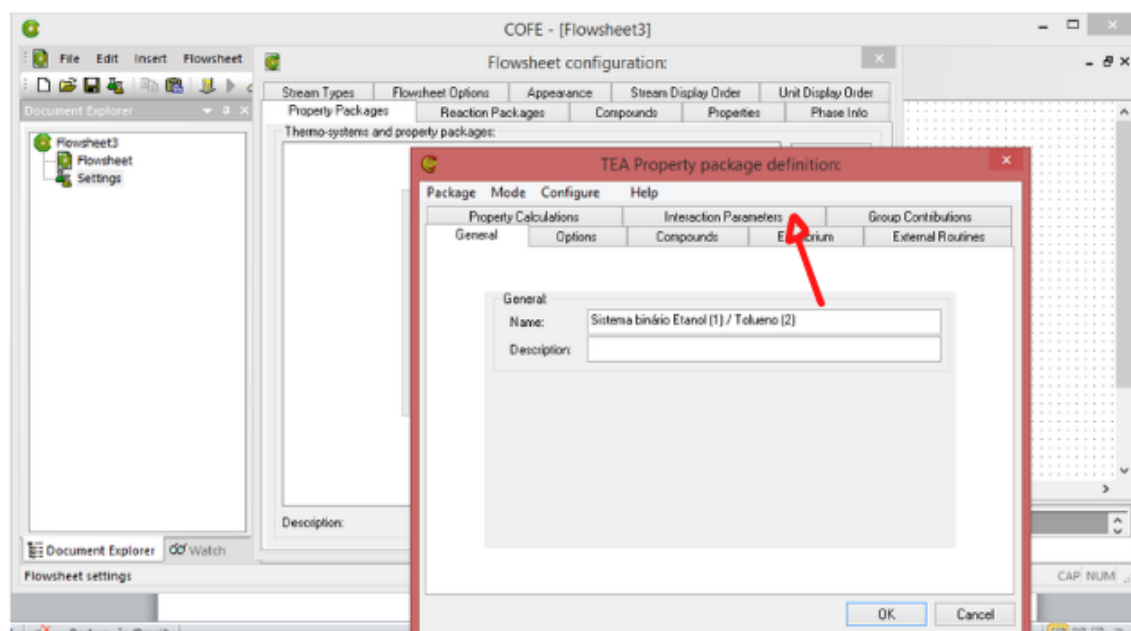
Após isso vá em “*Property Packages*” e selecione o pacote que você criou.



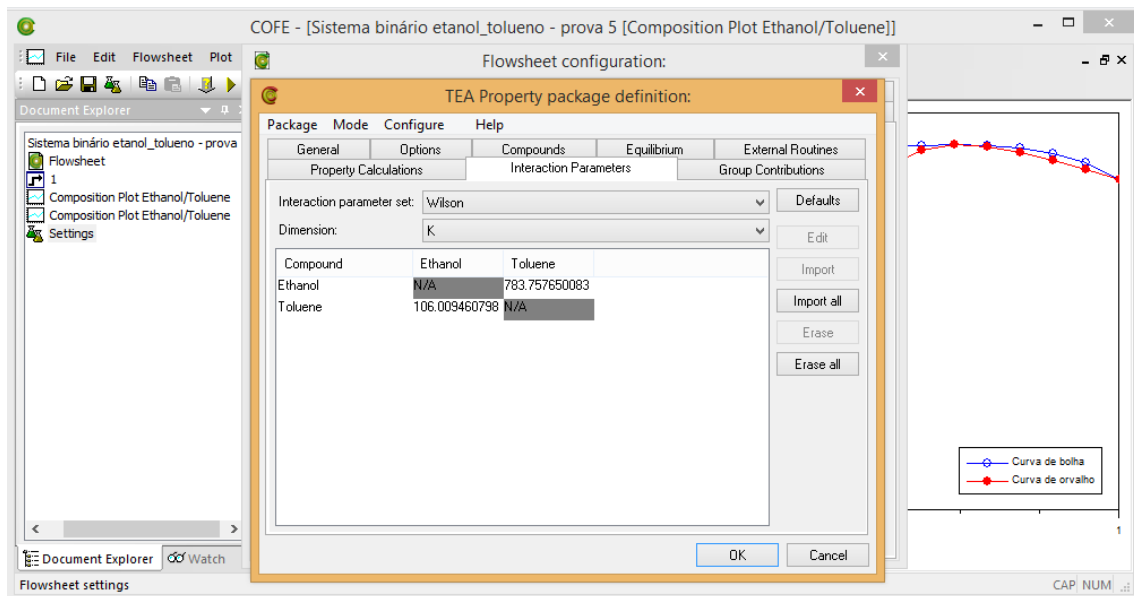
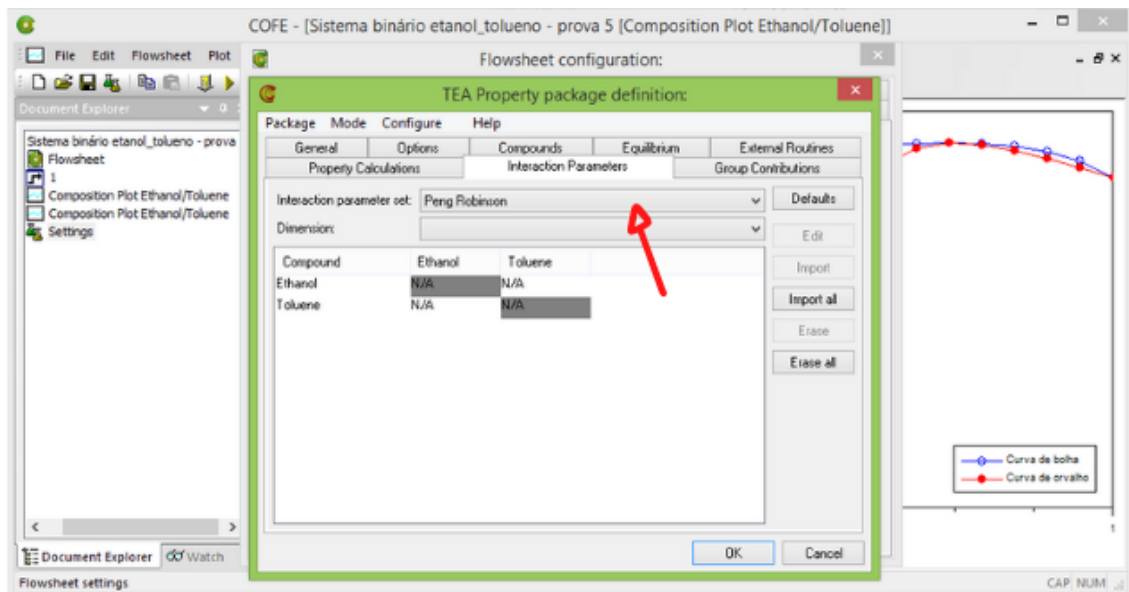
Após isso vá em “*Mode*”.



Selecione as opções avançadas em “Advanced” e vá em “Interaction Parameters”.



Escolha o modelo que deseja saber quais são os parâmetros em “Interaction parameters set” indicado na figura abaixo:



Em seguida copie os valores para fazer os devidos cálculos no excel, observe as unidades quando for utilizá-los para saber se há a necessidade de alguma conversão.