UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS - UFAL







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[®]. 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 <u>https://www.cocosimulator.org/</u>, lá você encontrará esse *"Layout"*:

cape open to cape open simulation environment
What is COCO Sample Flowsheets Change Log License Compliancy 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 and 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, a limited obtained at http://www.chemsep.com/ . ChemSep-LITE, a limited obtained at http://www.chemsep.com/ . ChemSep-LITE, a limited 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:

	······gg -······ ···p······,	COCO sectore lostallas	ks Contributors	
ile	size	description	platform	last update
COCOInstall v3.4.exe	54,615 KB	COCO version 3.4 installation file.	Windows XP or higher	May 29, 2020
Contributions				
Contributions	100. Cantributiana ann ba mada in tha f	form of stand along companying in the form of flought	at baselynade and testing desumants in the form a	f enline discussions, etc.
Contributions)CO. Contributions can be made in the f	form of stand-alone components, in the form of flowshe	eet benchmark and testing documents, in the form o	f online discussions, etc.
Contributions You can contribute to the development of CG If you define your own models (e.g. thermo	DCO. Contributions can be made in the f	form of stand-alone components, in the form of flowshe nt these to be part of COCO, or you feel that in any oth	eet benchmark and testing documents, in the form oner way you can contribute to the COCO simulation	f online discussions, etc. environment, please contact us
Contributions You can contribute to the development of CO if you define your own models (e.g. thermo o Or you can make a donation. Donation allo	CO. Contributions can be made in the f lynamics or unit operations) and you wa w us to spent more time on COCO deve	form of stand-alone components, in the form of flowshe nt these to be part of COCO, or you feel that in any oft alopment and research. If you find COCO useful, and v	eet benchmark and testing documents, in the form o ner way you can contribute to the COCO simulation vould like to show your appreciation, you can do so	f online discussions, etc. environment, please contact us in the form of a donation.

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 13.
Awiii Sempre abrir arquivos deste tipo
Mostrar na pasta
Cancelar
COCCInstall v3.4.exe Exibit todes

Lembre de permitir que o programa faça alterações no dispositivo:

Download

Thank you for downloading COCOInstall_v3.4.exe. Your download w	ill start automatically. If it does not start, please click <u>here</u> .				
If clicking the above link fails, try clicking with the right mouse butto If you continue to have trouble downloading the specified file, please	 Controle de Conta de Usuário × Deseja permitir que este aplicativo faça alterações no seu dispositivo? 				
	COCO Simulator Installer Fornecedor verificado: AmsterCHEM (Jasper van Baten) Origem do arquivo: Disco rígido deste computador Mostrar mais detalhes				
	Sim Não				

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

COCO Setup					\times
coco3	License Agreement Please review the license term	ns before install	ing CC	CO.	
Press Page Down to see th	e rest of the agreement.				
COCO LIC Version 3	CENSE 3.4				^
Copyright (C) 2	2020, cocosimulator.org				
 You can freely use and provided that the complete and the redistribution will be 	d distribute this Program and its o e distribution is copied without m pe free of charge.	components odifications			
2. You may not modify yo	our copy or copies of the Program	m and it compor	ients.		~
If you accept the terms of agreement to install COCO	the agreement, click I Agree to (continue. You m	iust ac	cept the	
COCO Simulator Version 3,4 –					
		I Agree		Cano	el

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":

	Choose Components Choose which features of COCO y	$ \square$ $ imes$ ou want to install.
Check the components yo install. Click Next to contin Select components to inst	all: COCO ChemSep LITE CosmoTHERM LITE OATS & COULIS Loggers EPA WAR and .NET Libs Excel Unit Operation	Description Position your mouse over a component to see its description,
Space required: 135.0 MB		
COCO Simulator Version 3,4 -	< Back	Next > Cancel

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

COCO Setup			_		
	Choose Start M	enu Folder			
3000_{X}	Choose a Start M	1enu folder for th	ne COCO shorta	uts.	
5					
elect the Start Menu fold	er in which you woul	d like to create t	he program's sh	ortcuts. Yo	
an also enter a name to c	reate a new folder.		ne programs an	oricuits. To	u
000					
7-Zip					٨
Accessibility					
Administrative Tools					
AMD Radeon Software					
Anaconda3 (64-bit)					
ChemSep 8.22 LITE					
ChemSep 8.25 LITE					
coco					
COSMOthermCO-LITE					~
Do not create shortcuts	S				
O Simulator Version 3,4 -					

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:

🞯 COCO Setup				_		\times
Coco3	Choose Install Choose the fold	Location er in which to inst	tall COCO.			
Setup will install COCO in t select another folder. Click	he following folder. (Install to start the	To install in a diff installation.	ferent folde	r, dick	Browse a	nd
Destination Folder						
C:\Program Files\COC	0			Brow	se	
Space required: 135.0 MB Space available: 185.4 GB						
COCO Simulator Version 3,4 -		< Back	Instal		Canc	el

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 tareas"

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.

G	Flowsheet configuration:									
Stream Types Flow	am Types Flowsheet Options Appearance Stream Display Order U		Unit Display Order							
Property Packages	Reaction Packages	Co	mpounds	Properties	Phase Info					
Thermo-systems and pro	perty packages:									
					Add					
					Remove					
					Edit					
					Rename					
					Replace					
					Info					
Description:										

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*":

0	COFE - [Flowsheet3]	- • ×
Edit Insert Flowsheet	Flowsheet configuration: ×	- 8×
E D 📽 🖬 🐁 🗈 🔞 🔳 🕨 K	Stream Types Flowsheet Options Appearance Stream Display Order Unit Display Order Property Packages Select Package or Pack X bee Phase Info	
Flowsheet Settings	Thermo-systems and pro	
Document Explorer	Description:	•
Flowsheet settings		CAP NUM 🚊

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

2		3	COFE - [Flow	(sheet3)			
File Edit Insert Flowsheet	0	- 87					
	Stream Types Flowsheet Options Appearance Stream Display Order			isplay Order	Unit Display Order		
incument Explorer 🛛 👻 🖬 🗙	Property Package	Reaction Pa	ckages	Compounds	Properties	Phase Inio	
Riovsheet3	Thermo-systems a						
Flowsheet						Add	
Ag Settings		No.	Remove				
		29 Property	package from	n TEA Prope	ert *	Edit	
		alkanes	alkanes New			Rename	
		C1_C2 (E05)		Parkaner		Replace	
		HDA		Packages	anages	Into	
		Water-nButanol-UNIQUA		guac	Into		
					_		
				13	Select		
				1.00	Cancel		
		<u></u>					
							3
	Description						
E Document Explorer Of Watch							

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:

3			COFE - [Flows	heet3]			×
🚺 File Edit Insert Flowsheet	2	Flo	wsheet config	guration:	×		- 8×
🗅 🖨 🖬 🐐 🗈 🛍 🔳 🕨 c	Stream Types	Flowsheet Options	Appearance	Stream Display Order	Unit Display Order		
ocument Explorer 🔍 🕈 🗙	Property Packages	Reaction Pa	ckages Co	mpounds Properties	Phase Info		······································
S Flowsheet3		C	1	EA Property package	definition:	×	
- Ag Settings		Package Mo	de Configure	Help			
		Name:	Sistema binário E	tanol (1) / Tolueno (2)	8		
		Description	1				
		Model set:				v	
		Compounds:					
						Add	
						Delete	
							>
	Description:						0
Document Explorer Watch							
owsheet settings							CAP NUM
					OK	Cancel	
💋 Português (Brasil)					UK.	Saleer	00033

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".

		0	OFE - [Flowsheet3]						
File Edit inseit Flowsheet	đ	Flowsheet configuration:							
) 📽 🖬 🕸 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉 🖉	Stream Types Flor	Stream Types Flowsheet Options Appearance Stream Display Order Unit Display Order							
untent Explorer 🛛 👻 G 🛪	Property Packages	Property Packages Reaction Packages Compounds Properties Phase Info							
Flowsheet3	Thermo-systems and pro	perty packages:							
Rowsheet		0	TEA Prop	erty packa	e definit	ion:	*		
Settings		C	A	dd compo	nents:		×		
		PCD File:		Second Second					
		C/Users/Ma	syara T.VappData\Loca\COC	00Simulator\C0	C0\data\Ch	er PCD Manager	Browse		
		Connound or	dartino						
		Executo	Name	Mol Usbalaha	FAS	Delauiteame			
		CH40	Mathanal	32/0419	67.56.1	Methodol			
		02460	Ethanol	46.0684	64-17-5	Ethanol			
		C2H602	2-Hydroxyethanol	62.0678	107-21-1	Ethylene glycol			
	-	C2H65	Thioethanol	62.134	75-08-1	Ethyl meicaptan			
		C3H80	1-methylethanol	60.095	67-63-0	Isopropanol			
		C4H100	Propylmethanol	74.1216	71-38-3	1-butanol			
		C4H100	Trimethylmethanol	74.1216	75-65-0	2 methyl-2-propan	ol		
		C4H1003	2.2 oxybic ethanol	106.12	111-46-6	Diethylene glycol			
		C6H14O4	2.2-[1,2-ethanedylbis[o	150.173	112-27-6	Triethylene glycol	200 Co		
	8	C8H1805	2.2-logbis[2.1-ethanedi.	194.225	112-60-7	Tetraethylene glyr	> loc		
	Description	<					,		
Document Explorer dd Watch		Filter by: ef	hanol						
wsheet settings		-				~	Court	CAP NUN	

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.

0		(COFE - [Flowsheet3]		- 🗆 🛛
E File Edit Insert Flowsheet	đ	Flo	wsheet configuration:		- 8×
Document Explorer • 4 ×	Stream Types Pi Property Packages Thermo-systems and p	Reaction Pa roperty packages:	Appearance Stream Display Urder Unit Display Order ckages Compounds Properties Phase Info		^
Flowsheet		G	TEA Property package definition:	×	
- Secondo		Package Mo	ode Configure Help		
		Name: Description:	Sistema binário Etanol (1) / Toluano (2)		
		Model set: Compounds:	R	×	
		Ethanol Toluene		Add	
E Document Explorer do Watch	Description:			Defete	CAP NUM
				OK Carcel	
3 Português (Brasil)				00100	

Para isso clique em "*Mode*" e vá para a parte "*Ad*vanced", essa parte vai dar acesso a mais configurações.

File Edit Insert Flowsheet Document Explorer	Steam Types Flowsheet Options Property Packages Reaction	COFE - [Flowsheet3] Flowsheet configuration: Appearance Stream Display Order Packages Compounds Properties	X Unit Display Oxfer Phase Info	- 6 >
Flowsheet3	Themo-systems and properly ackage Package Name:	TEA Property package o Mode Configure Help Sistema binário Etanol (1) / Tolueno (2)	lefinition:	
	Model set Compoun Ethanol Toluene	Witton k	Add Delete	×
È≣ Document Explorer dd Watch Flowsheet settings	Description		OK. Canor	

Dentre as opções que apareceram, vá para a parte de "Property Calculation".

0		CO	FE - [Flowshe	et3]			×
😧 File Edit Insert Flowsheet	đ	Flows	heet configu	ration:		×	- 8×
D C Document Explorer V	Stream Types Flow Property Packages Thermo-systems and pro	Reaction Packa perty packages:	Appearance ges Comp	Stream Display Order ounds Propert	Unit Display C ies Phase I	Info	^
Forsheet Forsheet Settings		C	TE	A Property packa	ge definition:	2	
		Package Mode	Configure	Help			
		Property Ca	Cations	Interaction Para	meters	Group Contributions	
	-	General	Uptions	Lonpounds	Equitinan	External Housines	
Till Document Explorer do Watch	Description:	Gen Na De	eral ne: Sinten ceription:	a binário Etanol (1) / To	lueno (2)		*
E Document Explorer 00 Watch							
Flowsheet settings							CAP NUM
🔆 🔆 Português Brasili		-			[OK Cancel	

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.

File Edit Insert Flowsheet	đ	Flowshe	et configura	ation:			17 -
) 📽 🖬 🐁 🕅 🕲 😃 k o	Stream Type: Flo Property Packages Thermo-systems and pe	wisheet Options Ap Reaction Packages operty packages	pearance Compo	Stream Display Order unds Proper	Unit Display Or ties Phase In	der fo	
Plowsheet	1	C	TEA	Property packa	ge definition:		×
4 Settings		Package Mode	Configure	Heip			
		General	Options	Compounds	Equilbrum	External Rout	tines
		Property Calcu	lations	Interaction Par	amotors	Group Contribution	no
		Property Equation of state	Overal	Vapor Ideal gas law	Liquid N/A	VaporLiquid	^
		activity	N/A	N/A	Wilson	N/A	
		activityCoefficient	N/A	N/A	Wilson	N/A	a a company
		density	N/A	E	COSTALD / Hankin	N/A	
		internalEnergy	SumOlPhases	From enthapy and v	From enthalpy and v	U.N/A	1111111
		enthalty E	SunOPhates	EDS	Ideal+Excess	N/A	1 111111
		anianou	SurOPhases	FOS	From activity coeffici	N/A	
		entropy	SunOiPhases	EOS	From activity coeffic	. NZA	1010100
		excessEnthalpy	N/A	N/A	From activity coeffic	N/A	111111
		fugacity	N/A	EOS	Dechema	N/A	
	Description:	lugacityCoefficient	N/A	EOS	Dechema	N/A	
Document Explorer 00 watch		gbbsEnergy	SumOlPhases	From enthalpy and e	From enthalpy and e	N/A	~
wsheet settings		 Drily show equilit 	bium phases		Add pro	perty Delete p	cap r

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".

8	COFE - [Flowsheet3]	×
Ele Edit Insert Flowsheet	Flowsheet configuration:	× _ #×
) 🗅 🖨 🖬 🐐 🗈 🔞 🔳 🕨 🦉	Stream Types Flowsheet Options Appearance Stream Display Order Unit Display	Order
Document Explorer 🛛 👻 🖲 🗙	Property Packages Reaction Packages Compounds Properties Phase	Info
Carabast?	Thermo-systems and property packages:	
- D Flowsheet	a Sistema binário Etanol (1) / Tolueno (2) Add	
- Settings	Reno	10
	Edit	
	Benar	e
	Property package added: Repla	
	Assign property package to the default stream type? Info	
	Yes No	
	Never ask again	
		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
		>
	Description:	0
E Document Explorer Watch		
Flowsheet settings		CAP NUM .

Após isso pode fechar essa guia.

0	COFE - [Flowsheet3]	- • ×
File Edit Insert Flowsheet	C Flowsheet configuration:	- #×
Document Explorer 🔹 🔍 🗙	Stream Types Flowsheet Options Appearance Stream Display Order Up of op Property Packages Reaction Packages Compounds Properties Pho Teamonistere and monetun ackages	ay Order ase Info
Flowsheet3	Thinks dystanti allo populy package.	dd
- Settings	Ber	10/0
-		dt
	Ber	ame
	Be	lace
		to
#= Document Explorer dor Watch	Description:	0
Flowsheet settings		CAP NUM

2.2 Adicionando uma corrente.

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

File Edit Insert Flowsheet Flowsheet Flowsheet Flowsheet Flowsheet Settings	- • ×	COFE - [Flowsheet3]
Image: Section of the section of t	- 8×	🗄 🔀 File Edit Insert Flowsheet Plot View Add-ins Window Help
Document Explorer		- D 2 日 4 1 1 2 4 1 2 4 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
		Oscument Explorer • 0 × Flowsheet3 Plowsheet Settings • • • • • • • • • • • • • • • • • • •
< state of the sta	*	C C

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.



0			COFE - [Flowsheet3:2 [1]]		×
File Edit Flowsheet Streams	Plot View Winds	w Help		-	5 ×
i D 😂 🖬 🗞 i 🗞 🕄 🗼 🧷	default	■ I ⁺ Z	::::::::::::::::::::::::::::::::::::::		
Document Explorer 🛛 👻 🕸 🗙	name	1	unit		
G Flowsheet3	Stream				
- E Flowsheet	Connections				
	 Overall 				
Setter	pressure	B-V	Pa		
	temperature	N/A	ĸ		
	mole fraction (Ethanol)	N/A			
	mole fraction [Toluene]	N/A			
	flow	N/A	mai / s		
	MW	N/A	kg / mal		
	Compound flow	5			
E Document Explorer dd Watch					
Ready				CAP NU	M

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



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.

0			COFE - [Flowsheet3:2 [1]]		×
File Edit Flowsheet Streams	Plot View Windo	w Help			- 8 ×
i D 🚅 🖬 🗞 i 🗈 🖻 💷 🕨 🎸	default	• I* Z	:::::::::::::::::::::::::::::::::::::		
Document Explorer 🛛 👻 🕸 🤉	name	1	unit		
C Flowsheet3	Stream				
Flowsheet	Connections		A		_
- F 1	 Overall 				
Settings	pressure	B-A 🔼	Pa		
	temperature	RVA 🔽	к		
	mole fraction (Ethanol)	R-V			
	mole fraction [Toluene]	N/A			
	flow	B/A	mol / =		
	MW	B/A	kg / mol		
	Compound flow:	1			
E Document Explorer do Watch					
Ready				CAP	NUM

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.

C	COFE - [Flowsheet3:2 [1]]	- D ×
File Edit Flowsheet Stree	ans Pot View Window Help 2/ default ・アススロー会悪 みんのだ 鼻母音の	- 8×
Document Explorer • 0 Flowsheet3 Flowsheet • 1 • Settings	name 1 unit Stream Connections Overall	
	Instruction [Ethanol] Instruction [Ethanol] Instruction [Ethanol] Instruction [Toluene] Ifow Iou Compound flows Prises Fractions Liquid composition Liquid composition Embed OK Cancel	
E Document Explorer	Overall properties Liquid properties	
Ready	10. 	CAP, NUM

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.

0	CO	FE - [Sistema bin	ário etanol_toluen	o - prova 5:4 [0	Composition	Plot Ethanol/Toluene	9) – 🗆 🛛
File Edit Flow	vsheet Plot Vie	ew Window Help default	■ I [*] I [*] ₂ I [*] ₂	ele ela	s व १) é	3 6 6 £	- 8×
Composition Plot	General Appeara Temperature: Value (K): Pressure: Value (mmHg): Equilibrium con	Ed Stream Stream	it series:	OK Car			BubblePointPressure, stream ""
Series DewPointPressur	e, stream "1", point	: 0.625, 583.739 mmHg					CAP NUM .d

0	COFE	- [Flowsheet3:3 [Composition Plot Ethanol/Toluene]]	- 🗆 ×
File Edit Flowsheet Plot Vie	w Window Help		- 6×
🗄 🗅 🚅 🖬 🍇 🗈 🛍 🔍 🕨 🧷	default	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
Document Explorer 🔷 🔍 🗙	70 📈	Edit series: ×	
Flowsheet3 Flowsheet 1 Composition Plot Ethanol/Toluer	60 General Acc Color: Line Type: Line Size: Symbol Size: 30 Delete 20 0	earance Property Conditions	BuddePortPressure, stream 'T'
El occases choses on sarry			
Series DewPointPressure, stream '1', point	: 0.458555, 559.558 mmH)	CAP NUM

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.

0	COFE -	Sistema binário etanol_tolueno - prova 5:4 [Composition Plot Ethanol/Toluene]]	- 🗆 🗡
File Edit Flowsheet Plot	View V	indow Help aut ・エエエエローキョンムロの一番ならぬ	- 8×
Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Settings Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethan	Pressure / mnhg	Compounds Appearance Legend Axes Compounds Major tick size: Background color: Minor tick size: Plot area color: Item spacing: Series resolution: 28 Margin: 10 Apply resolution to all series 0 0 0 0 0 0 0 0	BubblePoinPressure, stream "T" DexPortPressure, stream "T"
Location: 0.618571, 357.813 mmHg			CAP NUM

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.

File Edit Flowsheet Flot	View Wind	w Help	- 8×
	2 default	・ エ エ コ 田 令 間 久 日 心 ● ● ●) dt
bocument Explores 🔍 🔻 🔍 🗙		Select a colour:	-O-ButtlePointPressure, stream '1'
Sstema bindrio etanol_tolueno - prova 5 Forusheet 1 Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Settings	Pressure / mmHg	Preview: Picke: Pick	DevPenPresure, straam **
< >>	-	OK Cancel	

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.

0	COFE - [Sistema binário etanol_tolueno - prova 5:4 [Composition Plot Ethanol/Toluene]]	- 🗆 🗡
File Edit Flowsheet Plot	t View Window Help	- 8×
Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Estimate EDocument Explorer Composition Plot Ethanol/Toluene Comp	default Edit plot: Edit plot: Appearance Legend Awee Compounds Legend font: Descing: Background color: Hen spacing: Border size: O OK Cancel O OK Cancel	BubblePointPressure, stream "t" DevPointPressure, stream "t"
Location: 0.618571, 357.813 mmHg		CAP NUM

0	COFE -	[Sistema binário etanol_tolueno - prova 5:4 [Composition Plot Ethanol/Toluene]] – 🗖 🛛
Edit Flowsheet Plot	View V	Vindow Help _ @×
🗄 🗅 🚅 🖬 🍇 🛍 🛍 🔳 🕨	0 de	fault · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
Document Explorer 🔷 🛡	×	Edit plot:
Sistema binário etanol_tolueno - prova		Appearance Legend avec Compounds
Plowsheet		Show legend:
Composition Plot Ethanol/Toluene		Legend font Change
a Settings	1	Background color:
	2	Item spacing: 4
	u e	Border size: 7
	ane l	
	E.	
	4	
		OK Cancel
< >>	11 '	0.5
Document Explorer do Watch	_	Mole fraction Ethanol
Location: 0.618571, 357.813 mmHg		CAP NUM

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.

0	COFE - [Sistema	binário etanol_	tolueno - prova 5:4 [Composition Plot Etha	nol/Toluene]]	- 🗆 ×
File Edit Flowsheet Plot	View Window H	elp ≝r°.	tr E & E A A E & 8 8 8 8	æ	- 8×
Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene Settings Composition Plot Ethanol/Toluene Settings Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene	Too T	General Scale Automatic Manuat Fron: To: Unit: Logarithmi Delote	Edit Y axis: Tick marks Invesse 200 750 mmHg 6 OK 6.5 Mele fraction Ethanel	Change	BubbisPontPressure, stream "1" DevPontPressure, stream "1"
Ready					CAP NUM

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

	0	COFE - [Sistem	a binário etanol_t	olueno - prova 5:4 [Composition Plot Ethanol/Tolu	ene]]	_ 🗆 🛛
1	File Edit Flowsheet Plot	View Window	Help			- 8×
	E 🖸 😅 🖬 🍇 I 🖻 🖪 I 🔍 🕨	default	• I* 3	:::[][우림 옷 오 티 (?) 즐 [알 섬]		
	Gistana kiafaia atarak tahuna arawa			Edit Y axis:	×	BubblePointPressure, stream "1" DewPointPressure stream "1"
	Flowsheet	700	General Scale	Tick marks		
	Composition Plot Ethanol/Toluene	-	Major tick type:	grid lines	~	
	Composition Plot Ethanol/Toluene	600	Minor tick type:	outside	~	
	Secondo		Automatic			
		E 500	O Manual:	100		
		anne -	Major ticks:	20	-11	
1		La contraction de la contracti	Minor ucks.			
		400				
]]]/				
		300	-			
		1	•			
		200	Delete	OK Can	icel	
ļ	< >	°		0.5 Mole fraction Ethanol		1
	Beach					CAD MUNA
	Reduy					CAP NUM .::

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.

1	CO CO	OFE - [Sistema binário etanol_tolueno - prova 5:4 [Composition Plot Ethanol/Toluene]]	_ 🗆 🗡
1	File Edit Flowsheet Plot Vie	liew Window Help	- 8×
	i 🗅 📽 🖬 🍇 i 🗞 🖄 📕 🤌	2 default 🔹 가 가 가 가 🖂 🖨 🗃 🗛 🔍 🧠 🖉 🗟	
	Document Explorer 🔍 🔍 🗙	🗠 Edit series: 💌	O BubblePointPressure, stream '1'
	Sistema binário etanol_tolueno - prova :	General Appearance Property Conditions	DexPointPressure, stream "1"
	1	Labet DewPointPressure, stream "1" Reset	
	Composition Plot Ethanol/Toluene	Automatic D	
	K Settings	Resolution 25	
		2 2	
		ε.	
		Dalate OK Carcel	
		0 0.5 Mole fraction Ethanol	'
	E: Document Explorer 00 Watch		CAD MUNA
	series: Dewrointeressure, stream 1		CAP NOM .a
1	COF	DFE - [Sistema binário etanol_tolueno - prova 5:4 [Composition Plot Ethanol/Toluene]]	
	File Edit Flowsheet Plot View		- @ ×
ł	Document Evolucier 🛛 🙂 🕈 🗸		
ľ	Cetama biofeia atonal takana , areus i	Edit senes:	BubblePointPressure, stream "1" DevPointPressure, stream "1"
l	Flowsheet	General Appearance Property Conditions	
	1 Composition Plot Ethanol/Toluene	Labet Curva de orvalho Reset	
	Composition Plot Ethanol/Toluene		
	Settings	Resolution: 25	
		2	
		<i>د</i> .	
		Delete OK Cancel	
Į		0 0.5 Mela fraction Ethanol	1
ļ	E Document Explorer OF Watch		CAR HURL
			Lar NUM 3

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 provindos 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 x1 ou y1 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.

P(torr)	<i>x</i> ₁	y1	P(torr)	<i>x</i> ₁	y ₁
T = 333.1	15 K		T = 338.1	15 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 = 343.1	5 K		T = 348.1	5 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
Azeotro	ope.	Página 7	/ / 9	– €	+

TABLE 4 Vapor—liquid equilibria in the system ethanol(1)—toluene(2)

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.

*	jx ∣			
A	В	С	D	E
×1	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

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

4 -	fx 0.	000		
A	В	С	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.

0	COFE - [Flowsheet3]			
Edit Insert Flowsheet	C Flowsheet configuration:	- #×		
E 🖉 🖬 🐐 🖻 🛍 🔳 🕨 🧃	Stream Types Flowsheet Options Appearance Stream Display Order Uni	Display Order		
Document Explorer	Property Packages Reaction Packages Compounds Properties	Phase Info		
E Flowsheet3	Thermo-systems and property packages:			
- D Flowsheet	4 Sistema binário Etanol (1) / Tolueno (2)	Add		
Settings	A	Remove		
	K (Edit		
		Rename		
	\	Replace		
		Info		
		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		
		>		
	Description:	0		
E Document Explorer Watch				
Flowsheet settings		CAP NUM		

Após isso vá em "Mode".

0	COFE - [Flowsheet3]	- 🗆 🛛
Elle Edit Insert Flowsheet	Flowsheet configuration:	- 8×
Document Explorer 0 X Flowsheet 3 Document Explorer 00 Watch Flowsheet settings	Steam Linske Under Und Display Dider Propetly Packages Reaction Packages Compounds Properties Phase Info Themosystems and propetly packages: TEA Property package definition:	CAP NUM
A Destruction (Bread)	UK Califor	

Selecione as opções avançadas em "Advanced" e vá em "Interaction Parameters".

0	COFE - [Flowsheet3] -				- 🗆 🛛		
🔯 File Edit Insert Flowsheet	Flowsheet configuration:			×	- 8×		
Document Explorer + a ×	Stream Types Flowshi Property Packages	eet Options A Reaction Packag	ppearance es Conip	Stream Display Order ounds Propertie	Unit Display (s Phase	Info	^
Flowsheet		y packages.	TE/	A Property packag	e definition:		
	5	ackage Mode	Configure	Help			
		General General	Options	Compounds	EDorium	External Routines	
EE Document Explorer ddd Watch Flowsheet settings	Description:	Gene Nan Dep	at Sisten	ia binário Etanol (1) / Tol	ueno (2)		CAP NUM
A Batanta Barth						OK Cancel	

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

0	COFE - [Sistema binário etanol_tolueno -	prova 5 [Composition Plot Eth	nanol/Toluene]] -
File Edit Flowsheet Plot	Flowsheet	configuration:	×
5 🗅 🥔 🖬 🍇 🖻 🛍 🧶 🕨 Document Explorer 💿 0	C TEA Property p	ackage definition:	×
Sistema binário etanol_tolueno - prova	Package Mode Configure Help General Options Compound Property Calculations Interaction	s Equilibrium Externo n Parameters Group Cont	I Routines
Composition Plot Ethanol/Toluene	Interaction parameter set: Peng Robinson	×	Defaults
Composition Plot Ethanol/Toluene	Dimension	R ~	Edit
	Compound Ethanol Toluene		Import
	Ethanol N/A N/A Toluene N/A N/A		Import al
			Erase
		[Erase all
< >> ₩ Document Explorer ØØ Watch		OK	Cancel
Flowsheet settings			

0	COFE - [Sistema binário etanol_tolueno - prova 5 [Composition Plot Ethanol/Toluene]] – 🗆 🗙
File Edit Flowsheet Plot	Flowsheet configuration:	- 8×
] 🗋 🚔 🛄 🍇 🖻 💼 📕 🕨 Document Explorer 🛛 👻 🖡 2	C TEA Property package definition:	
Sistema binário etanol_tolueno - prova Flowsheet	Package Mode Configure Help General Options Compounds Equilibrium External Routines Property Calculations Interaction Parameters Group Contributions	
Composition Plot Ethanol/Toluene Composition Plot Ethanol/Toluene	Interaction parameter set: Wilson Dimension: K Edit	
	Compound Ethanol Toluene Import Ethanol N/A 783,757650083 Import Toluene 106.009460798 N/A Import all	
	Erase all	
		Curva de bolha
t → Comment Explorer	OK Cancel .	1
Flowsheet settings		CAP NUM:

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.