



UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS  
CÂMPUS DE PALMAS  
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE ALIMENTOS

**DHAYNA OLIVEIRA SOBRAL**

**SIMULAÇÃO E CONSTRUÇÃO DE UM PROTÓTIPO EM 3D  
DO EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR DE SUBSTÂNCIAS  
PURAS**

Palmas / TO

2020

**DHAYNA OLIVEIRA SOBRAL**

**SIMULAÇÃO E CONSTRUÇÃO DE UM PROTÓTIPO EM 3D  
DO EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR DE SUBSTÂNCIAS  
PURAS**

Monografia foi avaliada e apresentada à UFT – Universidade Federal do Tocantins – Câmpus Universitário de Palmas, Curso de Engenharia de Alimentos para obtenção do título de Bacharel e aprovação em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Orientadora: Professora Dra. Lina María Grajales Agudelo

Palmas / TO

2020

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**  
**Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Tocantins**

---

S677s Sobral, Dhayna Oliveira.  
SIMULAÇÃO E CONSTRUÇÃO DE UM PROTÓTIPO EM 3D DO  
EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR DE SUBSTÂNCIAS PURAS. / Dhayna  
Oliveira Sobral. – Palmas, TO, 2020.  
74 f.

Monografia Graduação - Universidade Federal do Tocantins – Câmpus  
Universitário de Palmas - Curso de Engenharia de Alimentos, 2020.  
Orientadora : Lina Maria Grajales Agudelo

1. Superfície PvT de substâncias puras. 2. Ensino de termodinâmica. 3.  
Equação de Estado de Peng-Robinson. 4. Variáveis de Estado. I. Título

**CDD 664**

---

TODOS OS DIREITOS RESERVADOS – A reprodução total ou parcial, de qualquer  
forma ou por qualquer meio deste documento é autorizado desde que citada a fonte.  
A violação dos direitos do autor (Lei nº 9.610/98) é crime estabelecido pelo artigo 184  
do Código Penal.

**Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFT com os  
dados fornecidos pelo(a) autor(a).**

# FOLHA DE APROVAÇÃO

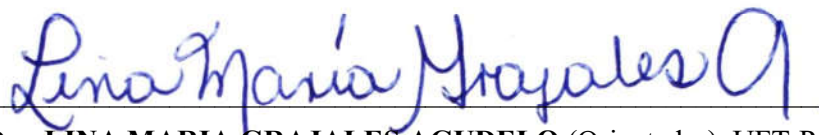
DHAYNA OLIVEIRA SOBRAL

## SIMULAÇÃO E CONSTRUÇÃO DE UM PROTÓTIPO EM 3D DO EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR DE SUBSTÂNCIAS PURAS

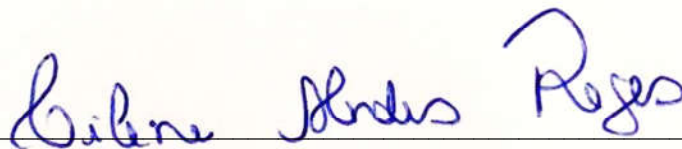
Monografia foi avaliada e apresentada à UFT – Universidade Federal do Tocantins – Câmpus Universitário de Palmas, Curso de Engenharia de Alimentos para obtenção do título de Engenheira de Alimentos e aprovada em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Data de aprovação: 17 de dezembro de 2020

Banca Examinadora,



Prof. Dra. **LINA MARIA GRAJALES AGUDELO** (Orientador), UFT-Palmas



Prof. Msc. **CILENE REGES MENDES** (Professor avaliador 1), UFT-Palmas



Prof. Dr. **DOUGLAS HENRIQUE PEREIRA** (Professor avaliador 2), UFT-Gurupi

*“A maior recompensa pelo trabalho não é o  
que a pessoa ganha, é o que ela se torna  
através dele” – John Ruskin*

## AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Adil e Railda, que me incentivaram nos momentos difíceis e compreenderam a minha ausência enquanto eu me dedicava à realização deste trabalho. Sem vocês, eu nada seria. Eu amo vocês!

Ao Professor Dr. Abraham Damian Giraldo Zuniga pela amizade e conselhos ao longo dessa trajetória. Obrigada por contribuir para o meu crescimento e acreditar no meu potencial.

A todos os membros do PET de Engenharia de Alimentos pelas experiências compartilhadas que com certeza levarei para vida.

Às minhas amigas Amanda Mellissa e Kamila Veloso por se mostrarem presentes nos meus melhores e piores momentos. Todas as nossas risadas, conversas e surtos estarão para sempre guardados comigo.

Às pessoas com quem convivi ao longo desses anos de curso, que atuaram direta ou indiretamente nessa caminhada e que certamente tiveram impacto na minha formação acadêmica.

Aos professores Dr. Douglas Henrique Pereira e Cilene Mendes Reges por aceitarem participar da banca examinadora deste trabalho e por contribuírem imensamente com suas correções e ensinamentos. Obrigada pela paciência!

E por fim, à Professora Dra. Lina María Grajales Agudelo por ter me orientado e desempenhado tal função com dedicação e amizade. Sou grata por ter acreditado em mim desde o princípio, por me incentivar a concluir essa etapa com sucesso e por me motivar a dar sempre a minha melhor versão. Você tem toda minha admiração não só como profissional, mas também como pessoa. Obrigada por tudo!

## RESUMO

A utilização de meios computacionais no ensino, para visualização dos diagramas de fases das substâncias puras é limitada a representações bidimensionais, restringindo a interpretação dos dados a duas variáveis (pressão e temperatura ou pressão e volume ou temperatura e volume). Isto dificulta o entendimento dos processos, uma vez que, por definição, a pressão pode ser determinada em função da temperatura e do volume relacionando as três variáveis simultaneamente. Assim, a análise de uma superfície  $PvT$  é útil para mostrar as relações gerais entre as três fases da matéria a partir do estudo das propriedades da substância no estado de saturação, ponto crítico, dentre outras. Neste trabalho, foi construído um protótipo e feita uma simulação do diagrama tridimensional correspondente à relação  $PvT$  das substâncias puras, aperfeiçoando a visualização e entendimento dos processos envolvidos para futura aplicação nas disciplinas de Termodinâmica I e II. Para isto, um protótipo foi esculpido sobre um cubo de gesso de 40cm de aresta com auxílio de um martelo e lâminas de aço. A superfície foi polida, lixada e pintada para dar os acabamentos similares aos do modelo 3D. Para a simulação da superfície  $PvT$  várias Equações de Estado foram analisadas e a Equação de Peng-Robinson foi a que melhor representou a relação entre as propriedades da água pura. O Microsoft Excel foi utilizado como ferramenta, com suporte de dois suplementos: XSEOS e OCTOPUS, mostrando-se como alternativa viável para representação dos dados. Tanto os gráficos bidimensionais quanto as superfícies tridimensionais foram analisados e comparados com informações encontradas na literatura. Além do anterior, as análises possibilitaram o estudo do comportamento volumétrico das isotermas sendo o protótipo um auxiliar à análise integral da superfície  $PvT$  esperada. Finalmente, foram realizadas algumas propostas para incorporar o protótipo e as rotinas de simulação desenvolvidas na metodologia de ensino das disciplinas de termodinâmica I e II do curso de engenharia de alimentos da UFT.

**Palavras-chave:** Superfície  $PvT$  de substâncias puras; Ensino de termodinâmica; Equação de Estado de Peng-Robinson; Variáveis de Estado.

## ABSTRACT

The use of computational means in teaching, to view the phase diagrams of pure substances is limited to two-dimensional representations, restricting the interpretation of the data to two variables (pressure and temperature or pressure and volume or temperature and volume). This makes it difficult to understand the processes, since, by definition, pressure can be determined as a function of temperature and volume by relating the three variables simultaneously. Thus, the analysis of a  $PvT$  surface is useful to show the general relationships between the three phases of matter from the study of the properties of the substance in the state of saturation, critical point, among others. In this work, a prototype was built and a simulation of the three-dimensional diagram corresponding to the  $PvT$  relationship of pure substances was made, improving the visualization and understanding of the processes involved for future application in the disciplines of Thermodynamics I and II. For this, a prototype was sculpted on a plaster cube of 40cm edge with the aid of a hammer and steel blades. The surface was polished, sanded and painted to give finishes like those of the 3D model. For the surface simulation  $PvT$  several State Equations were analyzed, and the Peng-Robinson Equation was the one that best represented the relationship between the properties of pure water. Microsoft Excel was used as a tool, with the support of two supplements: XSEOS and OCTOPUS, showing itself as a viable alternative for data representation. Both two-dimensional graphics and three-dimensional surfaces were analyzed and compared with information found in the literature. In addition to the previous one, the analyzes made it possible to study the volumetric behavior of the isotherms, the prototype being an aid to the integral analysis of the expected  $PvT$  surface. Finally, some proposals were made to incorporate the prototype and simulation routines developed in the teaching methodology of the thermodynamics I and II of the food engineering course at UFT.

**Keywords:**  $PvT$  surface of pure substances; Teaching of thermodynamics; Peng-Robinson equation of state; State variables.



## RESUMEN

El uso de medios computacionales en la enseñanza, para visualizar los diagramas de fase de sustancias puras se limita a representaciones bidimensionales, restringiendo la interpretación de los datos a dos variables (presión y temperatura o presión y volumen o temperatura y volumen). Esto dificulta la comprensión de los procesos, ya que, por definición, la presión se puede determinar en función de la temperatura y el volumen relacionando las tres variables simultáneamente. Así, el análisis de una superficie  $PvT$  es útil para mostrar las relaciones generales entre las tres fases de la materia a partir del estudio de las propiedades de la sustancia en estado de saturación, punto crítico, entre otras. En este trabajo se construyó un prototipo y se realizó una simulación del diagrama tridimensional correspondiente a la relación  $PvT$  de sustancias puras, mejorando la visualización y comprensión de los procesos involucrados para su futura aplicación en las disciplinas de Termodinámica I y II. Para ello, se esculpió un prototipo sobre un cubo de yeso de 40 cm de borde con la ayuda de un martillo y hojas de acero. La superficie fue pulida, lijada y pintada para dar acabados similares a los del modelo 3D. Para la simulación de superficie  $PvT$  se analizaron varias Ecuaciones de Estado y la Ecuación de Peng-Robinson fue la que mejor representó la relación entre las propiedades del agua pura. Se utilizó Microsoft Excel como herramienta, con el apoyo de dos complementos: XSEOS y OCTOPUS, mostrándose como una alternativa viable para la representación de datos. Se analizaron gráficos bidimensionales y superficies tridimensionales y se compararon con la información encontrada en la literatura. Además del anterior, los análisis permitieron estudiar el comportamiento volumétrico de las isothermas, siendo el prototipo una ayuda para el análisis integral de la superficie  $PvT$  esperada. Finalmente, se realizaron algunas propuestas para incorporar el prototipo y las rutinas de simulación desarrolladas en la metodología docente de las disciplinas de termodinámica I y II del curso de ingeniería de alimentos de la UFT.

**Palabras – clave:** superficie  $PvT$  de sustancias puras; Enseñanza de la termodinámica; Ecuación de estado de Peng-Robinson; Variables de estado.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

<b>Figura 1.</b> Diagrama T - v para substâncias puras. ....	11
<b>Figura 2.</b> Diagrama P - v para substâncias puras.....	12
<b>Figura 3.</b> Diagrama P - T para substâncias puras. ....	13
<b>Figura 4.</b> Diagramas P-v para substâncias que se contraem (a) e se expandem (b) na solidificação.....	14
<b>Figura 5.</b> Superfície PvT para uma substância pura. ....	15
<b>Figura 6.</b> Comportamento da isoterma subcrítica ( $T < T_c$ ) no plano "Pressão x Volume".....	19
<b>Figura 7.</b> Recortes iniciais do protótipo. ....	39
<b>Figura 8.</b> Acabamento do protótipo.....	39
<b>Figura 9.</b> Protótipo da superfície PvT .....	41
<b>Figura 10.</b> Identificação das regiões características da superfície PvT.....	41
<b>Figura 11.</b> Projeção do plano "Pressão x Volume". ....	41
<b>Figura 12.</b> Projeção do plano "Pressão x Temperatura".....	41
<b>Figura 13.</b> Fluxograma de construção das isotermas.....	44
<b>Figura 14.</b> Fluxograma de construção das curvas de saturação calculada .....	44
<b>Figura 15.</b> Representação do plano "Pressão x Volume" para os dados calculados .....	45
<b>Figura 16.</b> Representação dos dados no plano "Pressão x Volume"......	46
<b>Figura 17.</b> Simulação da superfície PvT a partir do equilíbrio líquido - vapor.....	48
<b>Quadro 1.</b> Resumo das equações de estado mais relevantes. ....	17
<b>Quadro 2.</b> Coeficiente de fugacidade nas condições de estado para substâncias puras. ....	26
<b>Quadro 3.</b> Descrição das metodologias de ensino.....	32
<b>Quadro 4.</b> Módulo PBL para complementação do ensino da termodinâmica.....	50

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	1
2	OBJETIVOS.....	3
2.1	Objetivo geral.....	3
2.2	Objetivos específicos.....	3
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	4
3.1	Termodinâmica na Indústria de Alimentos.....	4
3.1.1	Aplicação das propriedades termodinâmicas em processos de transformação de alimentos.....	4
3.1.2	Propriedades termodinâmicas.....	6
3.2	Propriedades volumétricas de fluidos.....	8
3.2.1	Regra de fases.....	9
3.2.2	Comportamento $PvT$ e diagramas termodinâmicos.....	10
3.2.3	Estado de gás ideal.....	15
3.2.4	Equações de Estado (EDE) e comportamento volumétrico das isotermas características.....	16
3.2.5	Tabulação de propriedades.....	20
3.2.6	Sistemas bifásicos e equilíbrio de fases.....	21
3.2.7	Equilíbrio líquido – vapor (ELV) a partir de uma EDE e da fugacidade ( $f$ ).....	22
3.3	Modelagem e simulação do equilíbrio líquido – vapor (ELV).....	24
3.3.1	Modelagem e cálculo de propriedades no ELV em sistemas monocomponente.....	25
3.3.2	<i>Softwares</i> e ferramentas para simulação.....	26
3.3.3	Excel e seus suplementos.....	28
3.4	Ensino da termodinâmica na Engenharia de Alimentos.....	30
3.4.1	Ensino da termodinâmica a nível universitário e problemáticas encontradas.....	30
3.4.2	Metodologias de ensino: breve histórico e metodologias emergentes.....	32
4	METODOLOGIA.....	36
4.1	Construção do protótipo.....	36
4.2	Modelagem e simulação.....	36
4.3	Proposta metodológica em complementação ao ensino da termodinâmica.....	38
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	39
5.1	Construção do protótipo.....	39
5.2	Modelagem e simulação.....	43

5.3	Proposta metodológica em complementação ao ensino da termodinâmica .....	49
6	CONCLUSÕES .....	51
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	52
	APÊNDICE A – TABELA DE SATURAÇÃO DA ÁGUA PURA (LITERATURA) .....	59
	ANEXO 1 – TABELA DE SATURAÇÃO DA ÁGUA PURA (CALCULADA) .....	61

## 1 INTRODUÇÃO

O estudo da termodinâmica vem, ao longo dos anos, se tornando cada vez mais importante para o melhor entendimento dos fenômenos ocorridos em processos de pequenas ou grandes escalas. De forma genérica, a termodinâmica do equilíbrio de fases procura estabelecer relações que permitam compreender o comportamento observado quando há duas ou mais fases em contato. Para a Engenharia de Alimentos, o conhecimento de como se comportam os parâmetros físico-químicos, em particular os três equilíbrios entre fases (líquido-líquido, sólido-líquido e líquido-vapor), são considerados essenciais para a compreensão das operações unitárias como destilação, extração líquido-líquido, extração sólido-líquido, calorimetria, cristalização, evaporação, entre outros, além de experimentos que relacionam propriedades de substâncias puras e de misturas (ALENCAR REIS *et al.*, 2017).

O estado de um sistema fechado em equilíbrio tem a sua condição definida pelos valores de suas propriedades termodinâmicas a partir de duas propriedades intensivas independentes; após a sua determinação, todas as outras se tornam dependentes. Por meio da regra das fases observa-se que o estado de um gás puro depende de duas das variáveis de estado intensivas independentes (SMITH e VAN NESS, 2007). Quando três destas variáveis de estado estão relacionadas, usualmente pressão (P), temperatura (T) e volume molar ( $v$ ), tem-se uma equação de estado (EDE). Dessa forma, uma EDE representa a expressão matemática que define a relação entre as propriedades pressão, temperatura e volume molar da substância a ser estudada. A partir dela é possível obter informações para qualquer uma das três grandezas  $PvT$  como função das outras duas em uma expressão do tipo  $v = f(T, p)$ .

As informações das propriedades termodinâmicas podem ser obtidas de várias formas, incluindo tabelas, gráficos, equações e programas de computador. Por meio da modelagem termodinâmica pode-se prever, através de uma equação de estado (EDE), o comportamento  $PvT$  da substância estudada.

De acordo com Staudt (2010), apesar da grande quantidade de equações disponíveis, as equações cúbicas de estado são, ainda, as mais utilizadas para previsões de equilíbrio e cálculo de propriedades em aplicações de engenharia como projeto, simulação e otimização de processos. A equação de van der Waals (vdW), que foi a primeira equação capaz de representar o equilíbrio de fases líquido-vapor, fornece valores mais precisos e realistas do que os resultados obtidos utilizando a equação dos gases ideais, porém seu uso correto se encontra no limite do gás ideal. Ou seja, a EDE de vdW não representa com precisão a curva de saturação

e o volume de líquidos (MATSOUKAS, 2016; SANDLER, 1999). Posteriormente, Redlich e Kwong (RK) apresentaram sua proposta. Nessa, através da inserção de novos parâmetros, a problemática encontrada na equação de vdW é resolvida. No entanto, predições de pressão de vapor de substâncias puras continuaram apresentando desvios consideráveis. Soave (1972), baseado em dados experimentais de pressão de saturação e por meio da inserção de um fator acêntrico, melhora a equação de RK. Peng e Robinson (PR) apresentaram uma nova equação permitindo uma melhor estimativa do volume molar das substâncias puras e uma melhor representação do equilíbrio líquido-vapor para sistemas binários e multicomponente.

O modelamento matemático destas equações de estado é uma importante ferramenta para o desenvolvimento ou otimização de processos (GARZÓN e TSCHIPTSCHIN, 2006). Geralmente, o modelamento matemático e a simulação das propriedades termodinâmicas através de meios computacionais são limitados, em sua maioria, a representações bidimensionais restringindo a interpretação dos dados a duas variáveis (pressão e temperatura ou pressão e volume ou temperatura e volume), dificultando o entendimento dos processos (TRINDADE, Jorge *et al.*, 2001).

## 2 OBJETIVOS

### 2.1 Objetivo geral

Simular o comportamento do Equilíbrio Líquido-Vapor para água e construir um protótipo em 3D da superfície que representa o comportamento da maioria das substâncias puras a fim de ser aplicado nas disciplinas de Termodinâmica I e II.

### 2.2 Objetivos específicos

- Construir um protótipo em três dimensões do diagrama que representa o comportamento  $PvT$  de uma substância pura;
- Analisar o comportamento volumétrico das equações de estado de Van der Waals, Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson na sua forma cúbica e determinar a que melhor se adequa ao estudo;
- Estimar as propriedades volumétricas da água a partir da equação de estado adotada com auxílio do suplemento XSEOS e OCTOPUS do *software Microsoft Excel*® e definir arbitrariamente algumas isotermas para o sistema analisado;
- Traçar o diagrama de fases a partir das informações obtidas nas simulações para o comportamento  $PvT$  e para as isotermas e, comparar com valores encontrados na literatura;
- Propor a incorporação do protótipo construído e das rotinas de simulação desenvolvidas na metodologia de ensino das disciplinas de termodinâmica I e II do curso de engenharia de alimentos da UFT.

### **3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

#### **3.1 Termodinâmica na Indústria de Alimentos**

O processamento de alimentos trata-se do conjunto de operações e processos usados para transformar matéria prima de origem vegetal, animal ou mineral em produto alimentício para consumo visando a garantia da qualidade, segurança e acesso (PEREIRA, 2019). De acordo com o Relatório Anual de 2019 da ABIA (Associação Brasileira de Indústrias de Alimentos) a indústria de alimentos e bebidas é a maior do Brasil: processa 58% de tudo o que é produzido no campo.

A disponibilidade para o consumo de alguns alimentos só é possível a partir do seu processamento, sem ele trariam riscos à saúde humana, não seriam palatáveis ou de fácil digestão. A industrialização dos alimentos permite o aumento da disponibilidade, fazendo com que pessoas possam ter acesso à comida de qualidade em qualquer momento do ano e em qualquer local (ABIA, 2019).

A revolução causada pela descoberta dos processamentos térmicos data do ano 1862, por meio do cientista francês Louis Pasteur, permitindo o combate das doenças transmitidas por alimentos (DTA), reduzindo suas taxas de mortalidade e melhorando a qualidade de vida da humanidade (ABIA, 2019). Isto permitiu relacionar diretamente a conservação dos alimentos aplicando os conceitos de termodinâmica ao seu processamento. Desde então, muitos outros processos foram sendo desenvolvidos e aperfeiçoados a fim de melhorar a qualidade dos alimentos processados. Algumas das aplicações mais relevantes analisadas nos últimos cinco anos são dispostas a seguir.

##### **3.1.1 Aplicação das propriedades termodinâmicas em processos de transformação de alimentos**

Em muitos processos de fabricação de alimentos uma série de trocas de energia ocorrem entre sistemas que acarretam efeitos térmicos. Essas trocas devido ao aquecimento ou resfriamento de tais sistemas tendem a alterar os componentes químicos envolvidos gerando ou parando qualquer reação (VALENTAS, ROTSTEIN e SINGH, 1997). Essas alterações podem ser descritas de forma macroscópica através dos conceitos básicos da termodinâmica.



Para o engenheiro de alimentos, o entendimento e controle das alterações que ocorrem durante o processamento de alimentos é essencial para otimização da sua fabricação. Quando mudanças são feitas no equipamento, condições de processamento, formulação ou características do produto alimentar, torna-se ainda mais fundamental conhecer e controlar as reações químicas envolvidas a partir das variáveis de processamento com ênfase nos efeitos térmicos (VALENTAS, ROTSTEIN e SINGH, 1997).

Alguns cientistas vêm pesquisando sobre aplicações diretas da termodinâmica ao processamento de alimentos. Kjelstrup e Magnanelli (2020) utilizam a abordagem da segunda lei da termodinâmica para analisar três ferramentas que podem ser usadas sistematicamente para avaliar e melhorar o uso de recursos utilizando conceito de exergia para mapear as perdas de qualidade de energia em um processo, incluindo o processamento de alimentos.

D'aertrycke *et al.* (2020) explora as particularidades da termodinâmica em estado sólido para identificar e caracterizar novas formas sólidas de L-lactato de cálcio. Nesse estudo, os autores também examinaram outras condições de temperatura e umidade relativa para descobrir três novas formas cristalinas que foram isoladas e caracterizadas com sucesso.

Almeida *et al.* (2020) investigou o efeito do tratamento térmico na atividade e termoestabilidade da nisina comercial de *Lactococcus lactis* de modo a compreender a inativação térmica de biopreservantes em matrizes de alimentos, essencial para seu uso adequado na indústria alimentícia, possibilitando redução do tempo de aquecimento e otimização da temperatura de aquecimento.

Liu *et al.* (2019) buscaram desenvolver um adsorvente econômico e eficiente para remoção de patulina (PAT) em suco de maçã sendo fabricado com sucesso por meio do uso de superfície de diatomita com nanofolhas de óxido de grafeno funcionalizado com enxofre (GO-SH), que exibiram excelente capacidade de adsorção seletiva para PAT. Nesse estudo, o comportamento de adsorção, mecanismo de adsorção, estabilidade e citotoxicidade foram investigados de forma sistemática.

Mintah *et al.* (2019) investigaram o impacto da ação sonoquímica e da reação da proteína do farelo de larvas de *Hermetia illucens* (HILMP) no que diz respeito à enzimólise sob variadas concentrações de enzimas e temperatura. A cinética da enzimólise revelou que o tratamento sonoquímico aumentou a constante de taxa. Na avaliação da energia livre de Gibbs, o tratamento sonoquímico reduziu a energia da reatividade dos reagentes, entalpia e entropia além de aumentar a atividade antioxidante mostrando-se benéfico na produção de proteínas de insetos comestíveis para diferentes aplicações alimentares e / ou farmacêuticas.

Powell-Palm e Rubinsky (2019) fizeram uso de análises termodinâmicas fundamentais para demonstrar que o processo de congelamento em um sistema isocórico (volume constante) requer até 70% menos energia em comparação com o congelamento convencional e a partir disso desenvolveram novos modelos de mudança de fase para demonstrar os efeitos térmicos recém-descobertos. Por meio desse estudo, foi possível concluir que uma simples mudança no estado termodinâmico em que os alimentos são congelados e armazenados, de isobárico para isocórico, tem o potencial de reduzir substancialmente o consumo de energia da indústria global de armazenamento de alimentos, sem a necessidade de fazer grandes mudanças na infraestrutura existente.

Grilo (2017) utilizou a plataforma *Engineering Equation Solver* (EES) para quantificar os fluxos de calor e massa de uma bomba de calor determinando os coeficientes de desempenho a fim de controlar as condições de secagem para obtenção de um produto de boa qualidade a partir do uso de sistemas que requeiram baixo consumo de energia, possuam alto coeficiente de desempenho e eficiência térmica, e que utilizem energia limpa.

O conhecimento de grandezas como entalpia, entropia, exergia, adsorção, energia livre de Gibbs, equilíbrio e entre outras que foram citadas, é necessário para a descrição dos tratamentos térmicos em processos de conservação de alimentos, funcionamento dos equipamentos, características de deterioração ou reações de preservação apresentadas nos alimentos e muitos outros fatores que aparecem na Engenharia de Alimentos (VALENTAS, ROTSTEIN e SINGH, 1997).

### 3.1.2 Propriedades termodinâmicas

Uma propriedade termodinâmica pode ser definida como qualquer variável que descreva o estado de um sistema, conseqüentemente uma propriedade será qualquer variável cujo valor depende apenas do estado do sistema em estudo. As propriedades são convenientemente divididas em duas categorias: extensivas e intensivas. A primeira contém aquelas propriedades cujos valores são uma função da quantidade de massa contida no sistema em um determinado estado. Já a segunda categoria diz respeito às propriedades que independem da massa do sistema. Dividindo duas propriedades extensivas se obtém uma propriedade intensiva como é o caso das propriedades específicas, obtidas dividindo qualquer propriedade extensiva pela massa do sistema (ÇENGEL e BOLES, 2015; HOWELL e BUCKIUS, 1990).

A determinação das propriedades termodinâmicas, em especial dos fluidos, é essencial para a realização de projetos, avaliação e otimização de processos. Na ausência de dados experimentais acerca dessas propriedades, faz-se necessário estimá-las através de modelos matemáticos, conhecidos como equações de estado (EDE), que serão estudados adiante, e a partir dos resultados encontrados é possível descrever quaisquer funções de estado compreendidas no sistema estudado (SMITH e VAN NESS, 2007).

As funções de estado características, como energia interna e entalpia, não são diretamente mensuráveis e é a partir delas que se calculam as necessidades de calor e trabalho nos processos industriais. Apesar disto, no caso de fluidos em estados de equilíbrio, são funções de parâmetros acessíveis à medição como a temperatura, a pressão e o volume específico.

- Pressão (P)

Trata-se de uma grandeza derivada da razão entre a força normal (F) exercida por um fluido e a unidade de área (A) da superfície, conforme a Equação (1), cuja unidade no Sistema Internacional (SI) é Pa.

$$P = \frac{F}{A} = \frac{N}{m^2} = Pa \quad (1)$$

No estudo da termodinâmica, a pressão normalmente é avaliada para sistemas contendo gases ou líquidos (ÇENGEL e BOLES, 2015). A pressão real em uma determinada posição é chamada de pressão absoluta, e é medido em relação ao vácuo absoluto.

- Volume específico ( $v$ )

O volume é uma grandeza derivada que representa o produto de três comprimentos cuja unidade no Sistema Internacional (SI) é o m<sup>3</sup>. Trata-se de uma propriedade termodinâmica extensiva pois depende da quantidade de material considerada. No entanto, o volume específico é definido como a razão entre o volume e a unidade de massa conforme demonstrado na Equação 2 relacionando-se à densidade, ou massa específica,

$$v = \frac{V}{m} = \frac{1}{\rho} \quad (2)$$

Geralmente, o volume específico de uma substância varia em função da temperatura e pressão. A densidade da maioria dos gases é proporcional à pressão e inversamente proporcional à temperatura. No entanto, líquidos e sólidos são substâncias essencialmente incompressíveis, e a variação de sua densidade com a pressão pode ser desprezível (SMITH e VAN NESS, 2007).

- Temperatura (T)

Trata-se de uma grandeza fundamental definida pela Lei Zero da Termodinâmica. A lei zero foi formulada e rotulada pela primeira vez por R. H. Fowler em 1931 e a partir de seu estudo, afirma que se dois corpos estiverem em equilíbrio térmico com um terceiro, estarão em equilíbrio térmico entre si. Este enunciado torna válido o conceito de temperatura e sua medição (SMITH e VAN NESS, 2007; ÇENGEL e BOLES, 2015).

O método mais comum para efetuar a medição de temperatura é baseado na mudança de propriedades de alguns materiais de modo previsível e perceptível. Ao longo da história foram introduzidas várias escalas de temperatura que nos permitem usar uma base comum para medições de temperatura. Cada escala de temperatura possui uma unidade de medida utilizada para representá-la dentro do sistema escolhido para análise (ÇENGEL e BOLES, 2015).

No estudo da termodinâmica, é necessário que essa escala seja independente das propriedades de qualquer substância. Dessa forma, é possível definir uma escala ideal baseada no comportamento de um gás ideal a baixas pressões onde a temperatura é proporcional à sua pressão em volume constante dando origem ao limite inferior de temperatura ou zero absoluto, cuja unidade é o Kelvin. Para a termodinâmica, quando se faz referência à temperatura sem outra qualificação, entende-se que se trata da temperatura absoluta (SMITH e VAN NESS, 2007; ÇENGEL e BOLES, 2015).

### **3.2 Propriedades volumétricas de fluidos**

A termodinâmica trata as transferências de energia quando um sistema passa de um estado de equilíbrio para outro. Um sistema é definido como uma quantidade de matéria ou

uma região no espaço escolhida para estudo. Quando consideramos um sistema que não sofre nenhuma mudança, todas as propriedades podem ser medidas ou calculadas descrevendo a condição, ou o estado, do sistema. Em um determinado estado, todas as propriedades de um sistema têm valores fixos podendo ser completamente descrito quando são fixadas duas propriedades intensivas independentes (SMITH e VAN NESS, 2007).

Caracteriza-se como substância pura aquela que possui composição química fixa, não necessitando ser originada de um único composto, desde que o sistema seja homogêneo. Dessa forma, é possível considerar que todas as substâncias puras exibem o mesmo comportamento geral e apenas os valores das análises serão alterados (ÇENGEL e BOLES, 2015).

O estudo dos fluidos puros homogêneos divide-se em duas classes, os líquidos e os gases. Todavia, a distinção entre elas nem sempre é nítida, uma vez que as duas fases se tornam indistinguíveis no ponto crítico. A determinação do estado em que se encontra um determinado fluido é dada pela Regra de Fases de Gibbs que será estudada a seguir assim como as particularidades do comportamento nas regiões de equilíbrio de fases e mecanismos de predição para estudo de suas propriedades termodinâmicas (SMITH e VAN NESS, 2007; ÇENGEL e BOLES, 2015).

### 3.2.1 Regra de fases

A Regra de Fases foi deduzida em 1875 por J. Willard Gibbs. A partir dela é possível definir o número de variáveis independentes, ou graus de liberdade ( $F$ ), capaz de estabelecer o estado intensivo de qualquer sistema. A Equação 3 demonstra a relação dada regra:

$$F = 2 - \pi + N \quad (3)$$

Em que  $F$  é o número de graus de liberdade,  $\pi$  é o número de fases e  $N$  é o número de espécies químicas. O estado intensivo de um sistema em equilíbrio é estabelecido quando são definidas a temperatura, pressão e as composições de todas as suas fases. As variáveis da regra de fase são propriedades intensivas, independentes da extensão do sistema e fases individuais (ÇENGEL e BOLES, 2015).

O número mínimo de graus de liberdade para qualquer sistema é zero. Quando  $F = 0$ , o sistema é invariante, e a Equação 3 torna-se  $\pi = 2 + N$  que representa o número máximo de

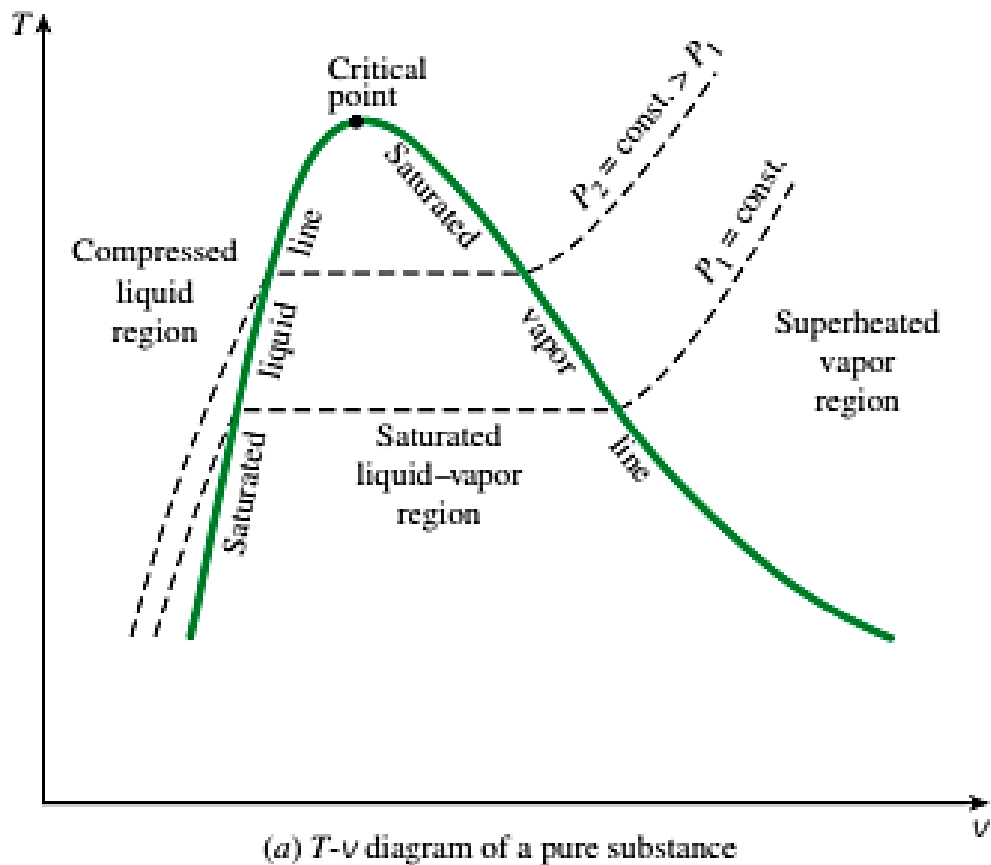
fases que podem coexistir em equilíbrio em um sistema contendo  $N$  espécies químicas. Quando  $N = 1$ , considerando um sistema contendo água pura,  $\pi = 3$  caracterizando o ponto triplo da substância em que as três fases coexistem em equilíbrio (SMITH e VAN NESS, 2007; ÇENGEL e BOLES, 2015).

### 3.2.2 Comportamento $PvT$ e diagramas termodinâmicos

Quando os dados sobre as propriedades termodinâmicas obtidas pelas substâncias são vinculados, uma linha que caracteriza o estado de equilíbrio existente será obtida. A temperatura na qual uma substância pura passa por uma mudança de fase sob uma determinada pressão é chamada de temperatura de saturação ( $T_{sat}$ ). Da mesma forma, a pressão na qual uma substância pura sofre uma mudança de fase em uma determinada temperatura é chamada de pressão de saturação ( $P_{sat}$ ), pressão de equilíbrio ou pressão de vapor. A pressão de vapor depende da temperatura do sistema, quanto mais alta a temperatura, mais alta a pressão de vapor da substância. Isso é consistente com nosso conceito de mudança de fase, pois quanto mais alta a temperatura, maior a possibilidade de a substância tender para a fase gasosa (SMITH, VAN NESS E ABBOTT, 2007; ÇENGEL e BOLES, 2015).

Correlacionando-se as variáveis temperatura e volume específico obtém-se um gráfico correspondente ao mostrado na Figura 1. Nele, são traçadas retas isobáricas onde a pressão se mantém constante. A partir dele é possível identificar os pontos de saturação da substância. Conforme a temperatura do sistema é aumentada menor é a distância entre eles até chegar um ponto em que se igualam. Nesse momento e somente nessas condições as duas fases coexistem em equilíbrio. Esse ponto característico é definido como ponto crítico cujas coordenadas correspondem a pressão crítica ( $P_c$ ), temperatura crítica ( $T_c$ ) e volume crítico ( $V_c$ ). Os pontos que definem a região de líquido saturado e vapor saturado podem ser conectados por uma linha denominada linha de líquido saturado e linha de vapor saturado, respectivamente. O encontro dessas linhas ocorre no ponto crítico e toda a região abaixo do ponto é delimitada pelas linhas de saturação é intitulada região de mistura líquido – vapor (ÇENGEL e BOLES, 2015).

Figura 1. Diagrama T - v para substâncias puras.



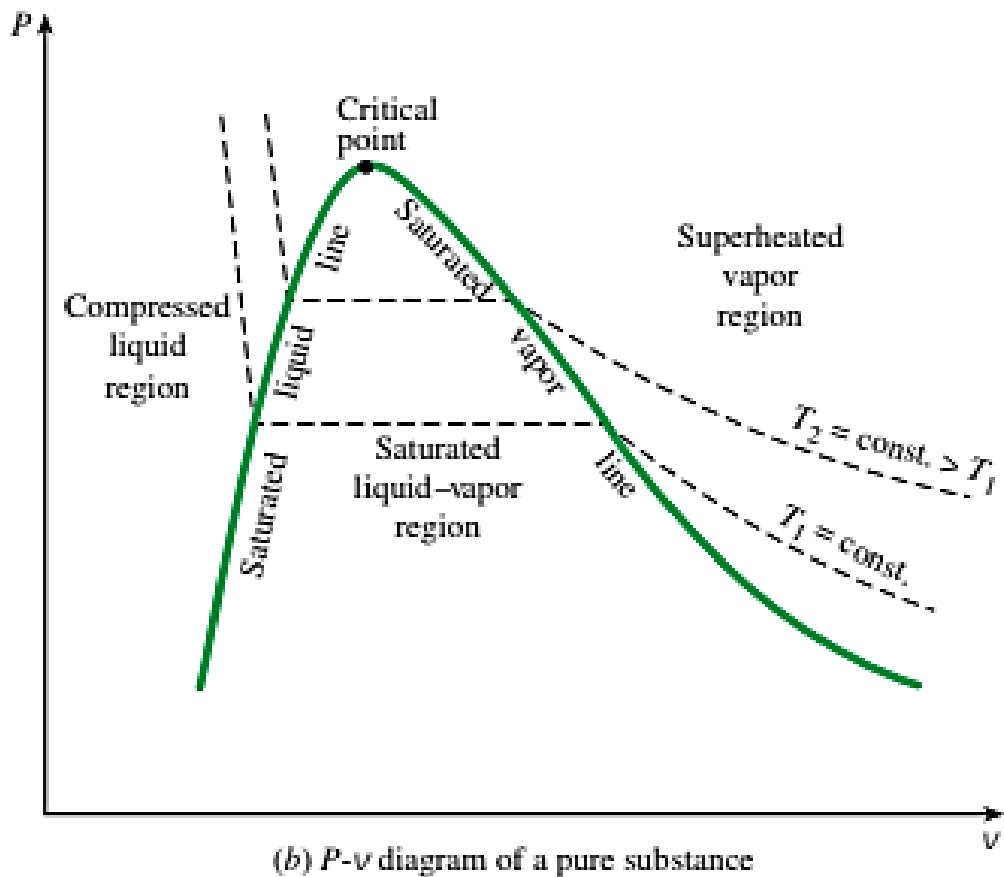
Fonte: Çengel e Boles (2015).

Em pressões acima da pressão crítica, não é possível fazer a distinção entre as fases líquida e vapor caracterizando a região de fluido. Para regiões localizadas à esquerda da linha de líquido saturado nomeia-se região de líquido comprimido. Já para regiões localizadas à direita, região de vapor super aquecido. Nessas duas regiões, a substância existe em uma única fase, um líquido ou um vapor (ÇENGEL e BOLES, 2015).

Relacionando-se as variáveis pressão e volume específico obtém-se um gráfico com comportamento semelhante ao da Figura 1, com linhas constantes de temperatura (isotermas). Levando em conta uma substância pura na região de líquido comprimido, a temperatura constante, à medida que a pressão diminui o volume aumenta ligeiramente. Quando a pressão atinge o valor de pressão de saturação na temperatura fixada inicia-se o processo de vaporização. O critério de equilíbrio líquido – vapor estabelece que a mudança de fase deve ocorrer a temperatura e a pressão constantes havendo aumento considerável do volume específico (ÇENGEL e BOLES, 2015). Assim que a última gota de líquido for vaporizada ao

continuar reduzindo a pressão do sistema haverá um aumento adicional no volume específico. O gráfico correspondente ao processo descrito está presente na Figura 2.

Figura 2. Diagrama P - v para substâncias puras

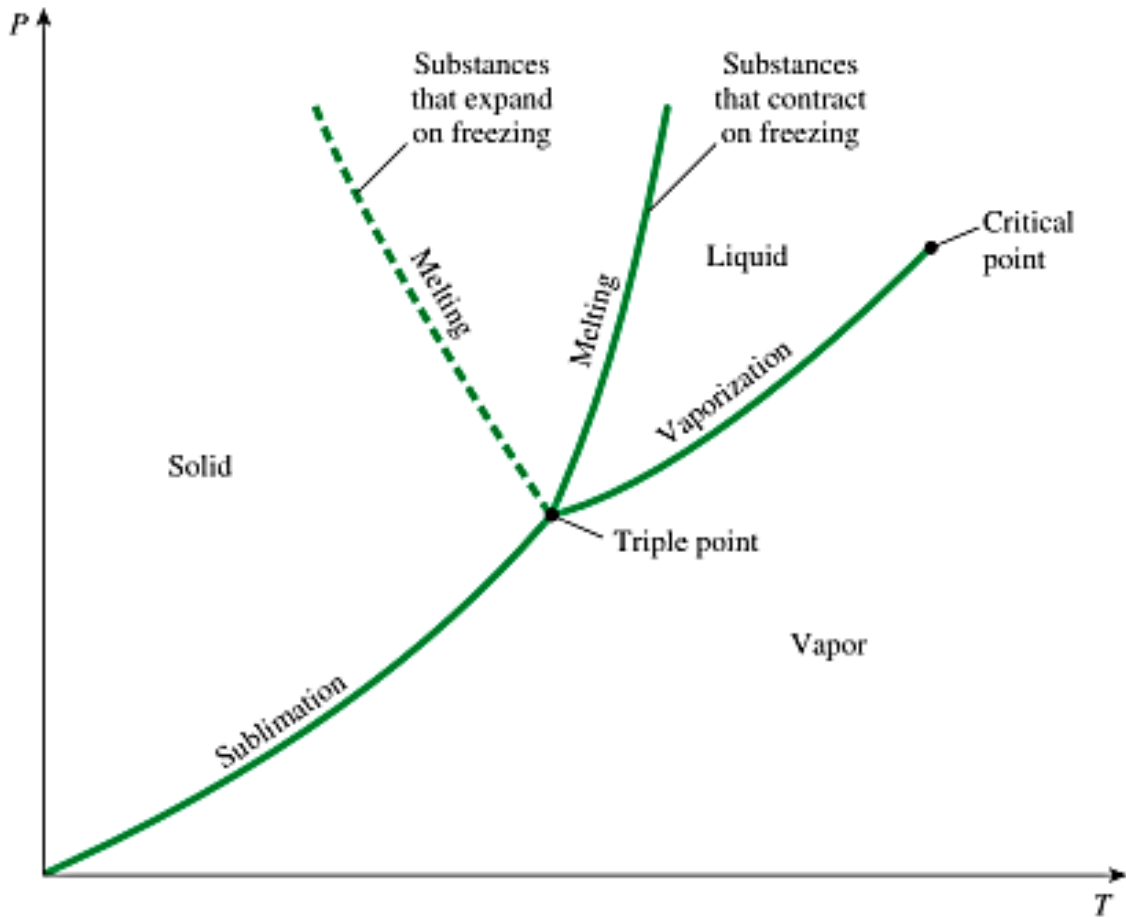


Fonte: Çengel e Boles (2015).

Ao relacionar as variáveis pressão e temperatura em um mesmo gráfico obtêm-se o que conhecemos por diagrama de fases. Nele estão presentes as linhas características dos processos de mudança de fases (sublimação, vaporização e fusão) que se encontram em um único ponto, ponto triplo. O gráfico correspondente está representado a seguir.



Figura 3. Diagrama P - T para substâncias puras.



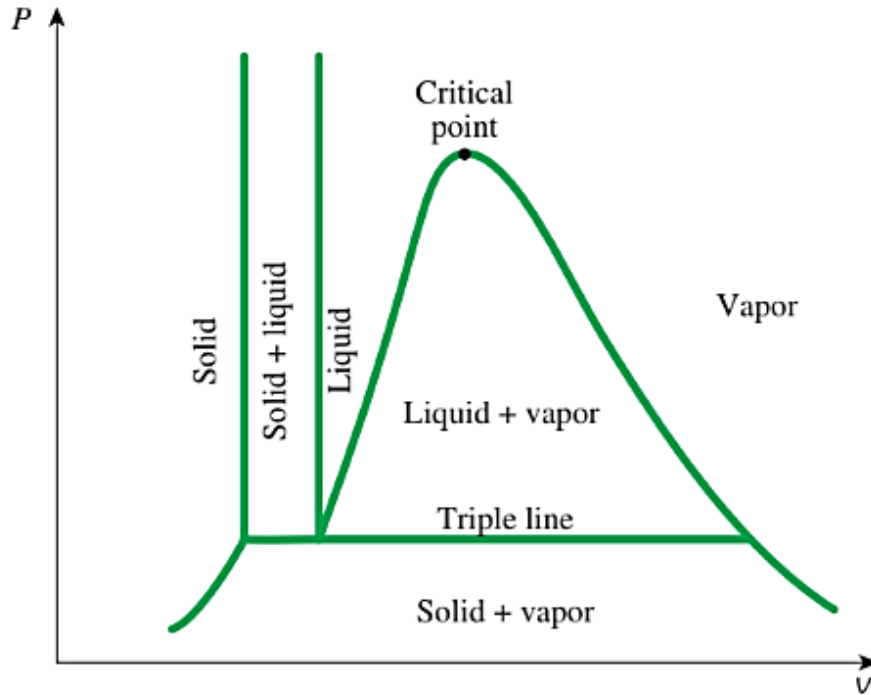
Fonte: Çengel e Boles (2015).

Os diagramas representados pelas figuras 2 e 3 descrevem o comportamento considerando a região e equilíbrio líquido – vapor. A Figura 4 apresenta o comportamento do sistema quando a fase sólida é incluída. Nele, os processos de mudança de fases nas regiões de equilíbrio sólido- líquido e sólido – vapor podem ser analisados de maneira análoga à região líquido – vapor.

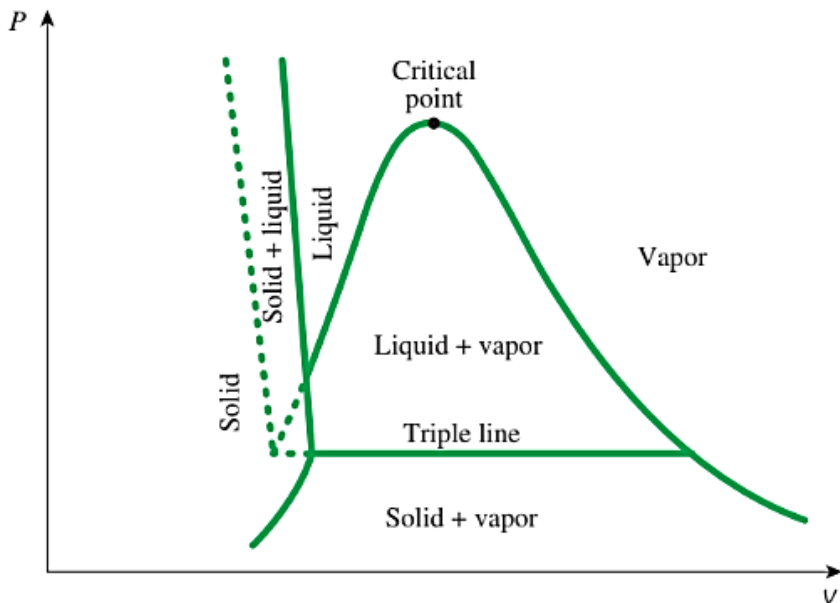
É possível observar que durante o processo de solidificação, para a maioria das substâncias puras, há uma contração da substância fazendo com que seu volume específico diminua e, conseqüentemente, aumente sua densidade. No entanto, a água apresenta comportamento diferente, uma vez que, durante a solidificação há uma expansão, aumentando o volume específico e diminuindo sua densidade fato que explica o porquê os cubos de gelo boiam em um como contendo água líquida. A partir da análise da figura 4 é possível identificar

também a linha tripla onde ao fixar a pressão e temperatura os três estados coexistem em equilíbrio variando os volumes específicos.

**Figura 4.** Diagramas P-v para substâncias que se contraem (a) e se expandem (b) na solidificação.



(a) P-v diagram of a substance that contracts on freezing

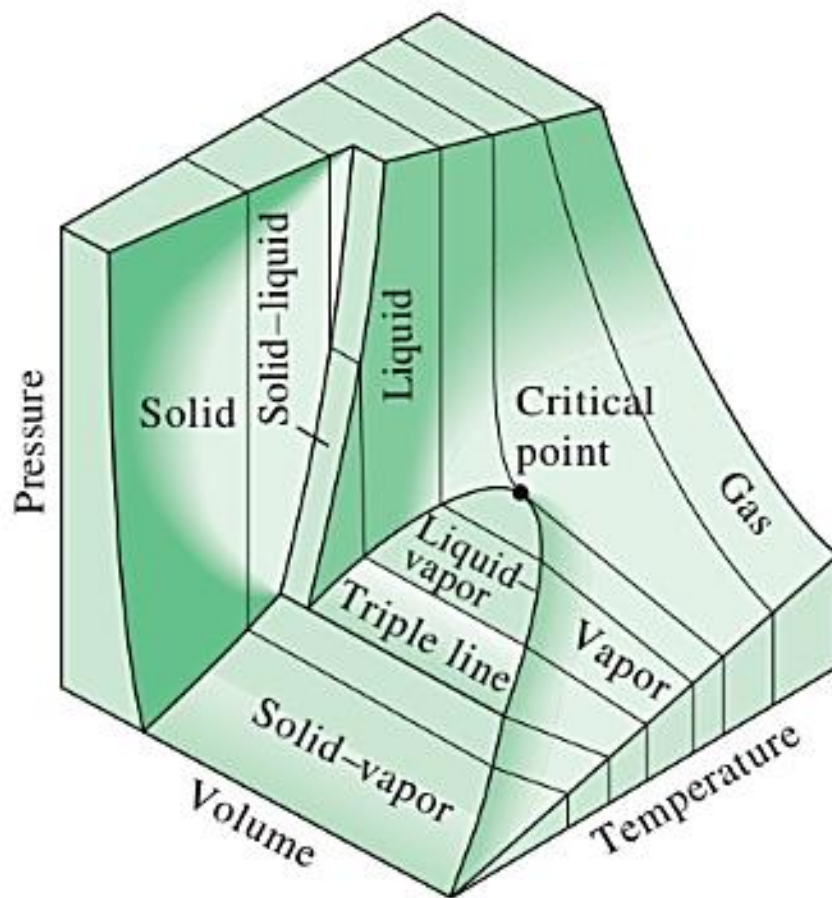


(b) P-v diagram of a substance that expands on freezing (such as water)

Fonte: Çengel e Boles (2015).

Avaliando as três variáveis de estado (pressão, volume específico e temperatura) em um único gráfico obtêm-se uma superfície tridimensional, cujos pontos da superfície representam todos os estados de equilíbrio vistos. A Figura 5 mostra uma superfície genérica e a partir dela é possível analisar qualquer uma das três grandezas  $PvT$  como função das outras duas numa expressão do tipo  $v = f(T, p)$  relacionada através de uma Equação de Estado (ÇENGEL e BOLES, 2015).

**Figura 5.** Superfície  $PvT$  para uma substância pura.



Fonte: Çengel e Boles (2015).

### 3.2.3 Estado de gás ideal

A fase de vapor de uma substância costuma ser chamada de gás quando está acima da temperatura crítica. Robert Boyle observou em 1662 que, em condições ideais, a pressão dos gases é inversamente proporcional ao seu volume. Em 1802, J. Charles e J. Gay-Lussac, concluíram experimentalmente que em baixas pressões o volume de um gás é proporcional à sua temperatura (ÇENGEL e BOLES, 2015). Assim, chegou-se à equação:

$$P \cdot v = R \cdot T \quad (4)$$

Em que  $R$  representa a constante dos gases no estado de gás ideal,  $P$  é a pressão absoluta,  $T$  é a temperatura absoluta e  $v$  é o volume específico. A constante  $R$  específica é diferente para cada substância e pode ser calculada a partir da relação:

$$R = \frac{R_u}{M} \left( \frac{kJ}{kg \cdot K} \text{ ou } \frac{kPa \cdot m^3}{kg \cdot K} \right) \quad (5)$$

Em que  $R_u$  é a constante universal dos gases equivalente à  $8,31447 \frac{kJ}{kg \cdot K}$  e  $M$  é a massa molar do gás definida pela relação entre a massa por unidade de mol. Assim, torna-se conveniente que, ao utilizar a equação, o volume utilizado seja o volume específico molar ( $\frac{m^3}{kmol}$  ou  $\frac{ft^3}{lbmol}$ ) a fim de simplificar os cálculos.

Uma equação de estado é definida como qualquer relação entre propriedades termodinâmicas de uma substância em condições de equilíbrio. Dessa forma, a Equação (4) representa a equação de estado mais simples conhecida como equação dos gases ideais. Essa equação é capaz de descrever o comportamento de gases reais somente em baixas pressões e altas temperaturas onde há redução da densidade do gás comportando-se como ideal. Quando aplicada em quaisquer outras situações, a equação de gases ideais apresenta grandes desvios (SMITH e VAN NESS, 2007; ÇENGEL e BOLES, 2015).

### 3.2.4 Equações de Estado (EDE) e comportamento volumétrico das isotermas características

As informações das propriedades termodinâmicas podem ser obtidas de várias formas, incluindo tabelas, gráficos, equações e programas computacionais. Por meio da modelagem termodinâmica pode-se representar, através de uma equação de estado (EDE), a predição do comportamento  $PvT$  da substância estudada. As equações cúbicas são as mais usadas para representar o comportamento  $PVT$  de líquidos e gases (SMITH, VAN NESS E ABBOTT, 2007).

De acordo com Staudt (2010), apesar da grande quantidade de equações disponíveis, as equações cúbicas de estado são, ainda, as mais utilizadas para predições de equilíbrio e cálculo de propriedades em aplicações de engenharia como projeto, simulação e otimização de

processos. A equação de van der Waals (vdW), proposta em 1873, foi a primeira equação capaz de representar o equilíbrio de fases líquido-vapor, apresentando a representação mais adequada de dados  $PvT$ , originando valores calculados mais precisos e realistas do que os resultados obtidos utilizando a equação dos gases ideais. Isso só foi possível a partir da adição de duas constantes “a” e “b” que são determinadas a partir do comportamento de uma substância na fase crítica levando em consideração as forças de atração intermolecular e o volume ocupado pelas próprias moléculas respectivamente. Porém, a EDE de vdW não representa com precisão a curva de saturação e o volume de líquidos uma vez que os valores das constantes representam o comportamento real de um gás em apenas um ponto apresentando uma pequena inflexão na isoterma do ponto crítico (ÇENGEL E BOLES, 2015; SANDLER, 1999).

Posteriormente, em 1949, Redlich e Kwong (RK) apresentaram sua proposta. Nessa, através da inserção de dependência da temperatura para o termo atraente, a problemática encontrada na equação de vdW é resolvida. No entanto, predições de pressão de vapor de substâncias puras continuaram apresentando desvios consideráveis. Soave (1972), baseado em dados experimentais de pressão de saturação e por meio da inserção de um fator acêntrico, melhora a equação de RK. Peng e Robinson (PR) em 1976 apresentaram uma nova equação permitindo uma melhor estimativa do volume molar das substâncias puras e uma melhor representação do equilíbrio líquido-vapor para muitas misturas de modo a ser aplicável a todos os cálculos de todas as propriedades de fluidos em processos reais. O Quadro 1 a seguir apresenta o resumo das equações de estado avaliadas para o presente estudo.

**Quadro 1.** Resumo das equações de estado mais relevantes.

Modelo	Fórmulas	Parâmetro a	Parâmetro b
<b>Gás ideal</b>	$Pv = RT$	( - )	( - )
<b>Eq. vdW</b>	$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2}$	$\frac{27 (RT_c)^2}{64 P_c}$	$\frac{RT_c}{8P_c}$
<b>Eq. RK</b>	$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{T^{0,5}v(v + b)}$	$0,42748 \frac{R^2 T_c^{2,5}}{P_c}$	$0,08664 \frac{RT_c}{P_c}$
<b>Eq. PR</b>	$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{v(v + b) + b(v - b)}$	$0,45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha(T)$	$0,0778 \frac{RT_c}{P_c}$

Fonte: Autor (2020).

Em que,

$$\alpha(T) = [1 + f(\omega)(1 - Tr^{0,5})]^2 \quad (6)$$

$$f(\omega) = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2 \quad (7)$$

$$a(T) = a \cdot \alpha(T) \quad (8)$$

$$Tr = \frac{T}{Tc} \quad (9)$$

Em que o objetivo da inclusão do termo Equação 6 é melhorar a previsão da pressão de vapor para componentes puros da equação de estado. O valor de  $Tr$  refere-se à temperatura reduzida da substância no sistema em estudo, ou seja, é a temperatura normalizada em relação a temperatura crítica. Os valores das pressões e temperaturas críticas ( $Tc$  e  $Pc$ ) e do fator acêntrico ( $\omega$ ) estão tabelados para várias substâncias (SMITH, VAN NESS E ABBOTT, 2007; REID, PRAUNSNITZ E SHERWWOD, 1977). O fator acêntrico é uma propriedade que descreve a não-esfericidade das moléculas e no estudo de substâncias puras é definido pela expressão:

$$\omega = -\log_{10}Pr^{sat} - 1 \quad (10)$$

Em que  $Pr^{sat}$  é a pressão de vapor (ou saturação) reduzida, ou seja, de maneira análoga à temperatura reduzida, representa a pressão de saturação normalizada em relação à pressão crítica ( $Pc$ ) quando  $Tr$  é igual a 0,7. Quando  $Tr$  apresenta valor diferente, o fator acêntrico pode ser estimado a partir da correlação proposta por Lee e Kesler,

$$\omega = \frac{-\ln Pc - 5,92714 + 6,09648 Tr^{sat-1} + 1,28862 \ln Tr^{sat} - 0,169347 Tr^{sat6}}{15,2518 - 15,6875 Tr^{sat-1} - 13,4721 \ln Tr^{sat} + 0,43577 Tr^{sat6}} \quad (11)$$

Em que  $Tr^{sat}$  é a temperatura de saturação reduzida que representa a temperatura de saturação normalizada em relação a temperatura crítica (PERRY, GREEN E MALONEY, 1984; REID, PRAUNSNITZ E SHERWWOD, 1977).

As equações de Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong e PengRobinson podem ser escritas na forma de uma equação de terceiro grau (equação 12) e por isso também são conhecidas como equações cúbicas.

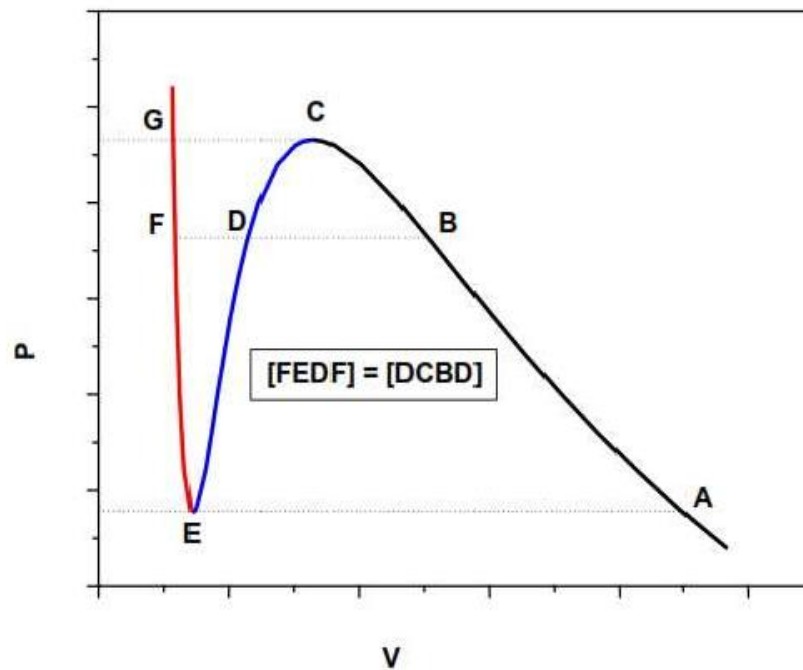
$$Z^3 + A.Z^2 + B.Z + C = 0 \quad (12)$$

$$Z = \frac{P.V}{R.T} \quad (13)$$

Sendo Z o fator de compressibilidade responsável por mensurar o desvio (afastamento) das equações cúbicas de estado da idealidade (FERNANDES, PIZO e MORAES JR., 2006).

De acordo com Costa (2017) apud Santos (2019), o comportamento de uma isoterma inferior a temperatura crítica dado por uma equação cúbica de estado é representado a seguir.

**Figura 6.** Comportamento da isoterma subcrítica ( $T < T_c$ ) no plano "Pressão x Volume".



Fonte: COSTA (2017)

O autor observa que para pressões inferiores a pressão do ponto A, as equações cúbicas fornecem uma raiz real e duas raízes complexas conjugadas sendo a raiz real o volume molar o vapor. Para pressões no intervalo  $[P^A = P^E, P^C = P^G]$  as equações fornecem três raízes reais e para pressões acima do ponto G até próximo à pressão crítica, as equações cúbicas fornecem uma raiz real e duas raízes complexas conjugadas sendo a raiz real o volume molar do líquido.

Na região de equilíbrio entre líquido e vapor, o comportamento do fluido não segue a equação cúbica, pois sabemos que a pressão e a temperatura permanecem constantes durante mudanças de fase. Portanto, os valores indicados pelas equações cúbicas nesta região não têm significado físico (SMITH, VAN NESS E ABBOTT, 2007; SANDLER, 1999).

Recentemente, algumas aplicações das EDE estão sendo realizadas. Jaubert et al. (2020) descreveram que, nos últimos dois séculos, as equações de estado (EDE) se tornaram uma ferramenta chave para a correlação e previsão das propriedades termodinâmicas dos fluidos. Nos últimos 20 anos, milhares de publicações foram dedicadas ao desenvolvimento de modelos sofisticados ou ao aprimoramento de EE já existentes. Em uma avaliação dos trabalhos mais relevantes nos últimos 5 anos foi possível perceber que as equações de PR e Soave RK são preferíveis em simulações e cálculos de equilíbrio uma vez que possuem fácil implementação e baixo recurso computacional exigido, são adequadas para sistemas binários e multicomponente e requerem somente propriedades críticas e fator acêntrico das substâncias.

Sun e Li (2020) utilizam uma aprimoração da equação de PR a partir da equação de Young-Laplace modificada proposta por Tan e Piri (2015), a fim de estudar o efeito da pressão capilar no cálculo de equilíbrio de duas fases em nanoporos confinados.

Shi, Li e Pang (2018) utilizam a equação de PR como base para obter uma previsão mais precisa das densidades de líquido para componentes puros adicionado de um modelo não linear generalizado de translação de volume dependente da temperatura melhorando a precisão no cálculo da densidade do líquido para as 17 substâncias com um desvio percentual médio absoluto geral de 1,44%.

Rowland, Hughes e May (2017) afirmaram que, para modelagem das condições de destilação é necessário uso de equações de estado capazes de prever o equilíbrio do vapor-líquido em uma ampla gama de condições. Em suas avaliações, utilizaram a equação de PR a partir de uma abordagem alternativa usando constantes críticas efetivas para gases quânticos demonstrando melhora significativa na predição do equilíbrio líquido – vapor.

Issa (2016) utiliza as equações de Soave RK e PR em comparação aos dados de previsão das pressões de vapor para uma mistura multicomponente de gás natural a partir do *software MATLAB 8.2 R2013b (The MathWorks, Natick, MA)* obtendo resultados com desvio inferior ao de Soave e próximo dos resultados da equação de PR.

### 3.2.5 Tabulação de propriedades

Como visto anteriormente, as propriedades termodinâmicas usualmente mensuradas em um sistema são temperatura e pressão. Assim, é comum encontrar a apresentação dos dados com  $T$  e  $P$  como variáveis independentes e as outras propriedades tratadas como dependentes. Os intervalos entre os registros das tabelas são realizados por meio de interpolação linear com



intervalos suficientemente próximos a fim de garantir a eficácia da análise (ÇENGEL e BOLES, 2015).

Algumas propriedades termodinâmicas podem ser medidas facilmente, mas outras somente podem ser obtidas por meio de cálculos usando relações entre eles e propriedades mensuráveis. As propriedades termodinâmicas resultantes são listadas separadamente para cada região de estudo. No estudo da água pura as tabelas mais utilizadas são: vapor superaquecido, líquido comprimido e água saturada (mistura). As tabelas de saturação correspondem a uma representação da interpolação dos dados de temperatura ou pressão compreendidos entre o ponto de congelamento normal e ponto crítico da substância. As tabelas para vapor superaquecido representam os dados em relação às condições de temperatura superiores à temperatura de saturação para uma determinada pressão. Analogamente, as tabelas e líquido comprimido representam os dados em condições de temperatura inferiores à temperatura de saturação a determinada pressão. O volume específico, energia interna, entalpia e entropia são tabulados como funções de pressão em várias temperaturas sendo úteis para o cálculo de calor e trabalho em sistemas, dentre outras análises. (SANDLER, 1999; SMITH e VAN NESS, 2007; ÇENGEL e BOLES, 2015).

### 3.2.6 Sistemas bifásicos e equilíbrio de fases

Para que um sistema que contenha mais de uma fase em contato esteja em condição de equilíbrio é necessário que ele obedeça a alguns critérios de estabilidade termodinâmica. O equilíbrio é definido como uma condição estática na qual não ocorrem variações das propriedades macroscópicas de um sistema com o tempo (SMITH e VAN NESS, 2007). Assim, o sistema é dito uniforme e não existe gradientes de temperatura, pressão, concentração ou velocidade. No entanto, a nível microscópico, as condições não estão estáticas uma vez que é considerado o movimento entre as moléculas que por possuírem velocidades suficientemente altas superam as forças superficiais e migram para a outra fase. Dessa forma, a condição de equilíbrio do sistema só existe se houver:

- Equilíbrio Térmico:  $T^1 = T^2$ , não há transferência de massa ou de calor;
- Equilíbrio Mecânico:  $P^1 = P^2$ , não há realização de trabalho;
- Equilíbrio Químico:  $\mu_i^1 = \mu_i^2$ , igualdade entre os potenciais químicos das fases da substância não havendo variação nas propriedades do sistema.

Assim, os cálculos de equilíbrio de fases consistem, basicamente, em determinar as condições de temperatura, pressão e composição para as quais ocorre o equilíbrio termodinâmico (SANDLER, 1999). Quando consideramos o equilíbrio bifásico, a regra de fases de Gibbs é dada pela equação:

$$F = 2 + N - \pi = 2 + 1 - 2 = 1 \quad (14)$$

Por meio do resultado obtido pela aplicação da regra das fases de Gibbs é possível observar que um sistema monocomponente bifásico em equilíbrio apresenta um grau de liberdade. Isso significa dizer que para especificar o estado termodinâmico de cada fase em sistema de duas fases (ou seja, regiões de coexistência de vapor-líquido, vapor-sólido ou sólido-líquido) torna-se preciso especificar apenas uma variável, usualmente temperatura ou pressão, o valor da outra variável pode então ser obtido por meio de cálculos (SANDLER, 1999).

### 3.2.7 Equilíbrio líquido – vapor (ELV) a partir de uma EDE e da fugacidade ( $f$ )

Para melhor entendimento das condições de equilíbrio que envolvem uma EDE é preciso compreender o conceito de fugacidade, uma grandeza definida em termodinâmica para facilitar operações matemáticas e proporcionar a modelagem de fenômenos estudados (TARDIOLI, 2013).

Segundo Fernandes (2017), quando duas fases estão em equilíbrio, os seus potenciais químicos, pressões e temperaturas são iguais. Se o potencial químico, que representa a taxa de variação da energia livre de Gibbs, da fase líquida é maior do que o da fase vapor, o líquido vaporiza-se e a pressão do vapor aumenta até que a pressão de equilíbrio seja atingida e atinja o equilíbrio. Se ocorrer o contrário, o vapor condensa e a a pressão diminuí até ao ponto de equilíbrio. Dessa forma, há uma relação direta entre o potencial químico do vapor e o da fase condensada. As pressões de vapor relacionam-se também com a tendência de escape das moléculas de líquidos e sólidos para o estado gasoso, desenvolvendo-se o conceito de fugacidade. Essa nova variável termodinâmica trata-se de uma pressão efetiva que traduz o desvio do gás real relativamente ao gás ideal; no gás ideal as forças intermoleculares são

inexistentes e a fugacidade é igual à pressão. Em termos gerais, é a pressão do sistema corrigida (FERNANDES, PIZO E MORAES JR., 2006).

Quando consideramos o equilíbrio líquido- vapor, fugacidade deve ser a mesma para cada fase em equilíbrio. Entretanto, para que essa expressão tenha utilidade, a fugacidade tem que ser relacionada com propriedades mensuráveis (PRAUSNITZ; LICHTENTHALER; AZEVEDO, 1999), como mostrado a seguir:

$$f_i^L(T, P) = f_i^V(T, P) \quad (15)$$

Dessa forma, o coeficiente de fugacidade é a função auxiliar capaz de relacionar a fugacidade com propriedades mensuráveis ( $PVT$ ) e é definido como a razão entre a fugacidade da substância e a pressão:

$$\varphi = \frac{f}{P} \quad (16)$$

Para o cálculo dos coeficientes de fugacidade, equações de estado (EDE) podem ser aplicadas a ambas as fases. Assim, o equilíbrio só existe quando coeficientes de fugacidade das duas fases se igualam. Para os gases ideais, o coeficiente de fugacidade é igual a 1, pois para estes tipos de fluidos a fugacidade do fluido é igual à pressão do sistema (FERNANDES, PIZO E MORAES JR., 2006). Analogamente, obtém-se a Equação 17.

$$\ln \varphi_i^L(T, P) = \ln \varphi_i^V(T, P) \quad (17)$$

Esta equação se aplica à mudança de líquido saturado para vapor saturado, ambos na temperatura  $T$  e na pressão de vapor  $P_{sat}$ . No equilíbrio, quando a fugacidade da fase líquida e da fase de vapor são iguais é estabelecida a condição de isofugacidade, critério onde podemos estabelecer que a  $P_{sat}$  é a pressão de vapor na temperatura especificada pelo sistema representando a real condição de equilíbrio entre a fase líquida e vapor (SMITH, VAN NESS E ABBOTT, 2007; SANDLER, 1999).

### 3.3 Modelagem e simulação do equilíbrio líquido – vapor (ELV)

Quando consideramos as condições de equilíbrio líquido - vapor torna-se necessário avaliar, além dos critérios de equilíbrio vistos no item anterior, os critérios de estabilidade desse equilíbrio representados matematicamente pelas expressões 18 e 19. Um estado de equilíbrio estável é um estado de equilíbrio em que qualquer pequena flutuação nas condições internas se dissipa ao invés de aumentar, ou seja, caso haja uma pequena modificação no sistema, o sistema voltará sozinho para a mesma condição de equilíbrio inicial (FERNANDES, PIZZO E MORAES JR., 2006).

$$Cv > 0, \text{ critério de estabilidade térmica} \quad (18)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T < 0, \text{ critério de estabilidade mecânica} \quad (19)$$

Em que, na Equação 18,  $Cv$  é a capacidade calorífica a volume constante definida como o quociente entre a variação da energia interna e a variação de temperatura. O que significa que ao adicionar calor ao sistema estável, a temperatura irá aumentar qualquer desvio do equilíbrio estável provoca um processo na direção de reestabelecer o equilíbrio. A Equação 19 representa a razão entre derivada parcial da pressão e a derivada parcial do volume em função da temperatura. Fazendo uma análise das condições de equilíbrio em sistemas fechados e isolados verifica-se que apresentam energia interna e volume constante e assim, a entropia do sistema atinge um valor máximo. Vários fluidos poderão apresentar em certas condições duas ou mais fases (sólido, líquido e gasoso), estabelecendo um equilíbrio entre as fases, onde parte do fluido estará em uma fase e outra parte do fluido estará em uma outra fase (FERNANDES, PIZZO E MORAES JR., 2006). A quantidade de fluido em cada uma das fases em equilíbrio pode ser calculada conhecendo-se os critérios de equilíbrio termodinâmico dispostos no item anterior.

O modelamento matemático da estabilidade de fases e das transformações de fase é uma importante ferramenta para o desenvolvimento ou otimização de processos (GARZÓN e TSCHIPTSCHIN, 2006). A modelagem, cálculo de propriedades, os softwares e ferramentas para simulação mais utilizados para descrever as condições de equilíbrio líquido-vapor em sistemas monocomponente serão descritos a seguir.

### 3.3.1 Modelagem e cálculo de propriedades no ELV em sistemas monocomponente

Sabe-se que o equilíbrio líquido – vapor ocorre quando há igualdade entre a energia livre de Gibbs nos dois estados (equação 22).

$$G^L(T, P) = G^V(T, P) \quad (20)$$

A energia livre de Gibbs diz respeito ao total de energia disponível no sistema para realização de um trabalho útil em condições de P e T constantes. Como a energia livre de Gibbs é difícil de ser calculada, faz-se uma mudança de variável a partir da introdução do conceito de fugacidade visto no item 3.2.7. A fugacidade de uma substância pura é definida como:

$$f = P \cdot \exp \left[ \frac{1}{R \cdot T} \cdot \int_0^P \left( v - \frac{R \cdot T}{P} \right) dP \right] \quad (21)$$

Para facilitar a execução dos cálculos faz-se uso do coeficiente de fugacidade descrito pelas equações (18) e (19). No entanto, como muitas equações de estado são escritas na forma  $P = f(T, V)$  utiliza-se o coeficiente de fugacidade em termos de compressibilidade (Z) resultado na seguinte expressão:

$$\ln \phi = (Z - 1) - \ln Z + \frac{1}{R \cdot T} \cdot \int_{V=\infty}^V \left( \frac{R \cdot T}{v} - P \right) dv \quad (22)$$

O quadro 2 mostra as expressões utilizadas para o cálculo do coeficiente de fugacidade para cada condição de estado. Fernandes, Pizzo e Moraes Jr. (2006) descrevem, de forma geral os seguintes passos para resolução dos problemas envolvendo equilíbrio líquido – vapor:

1. Escolha uma equação de estado na forma  $P = f(T, V)$ ;
2. Faça  $P = \frac{R \cdot T}{v}$  substituindo P pela fórmula da equação de estado;
3. Integre o resultado do passo 2 em relação ao v;
4. Divida a fórmula encontrada no passo 3 por (R.T);
5. Pegue a fórmula encontrada no passo 4 e some  $[(Z - 1) - \ln Z]$ .

**Quadro 2.** Coeficiente de fugacidade nas condições de estado para substâncias puras.

Condição de estado	Coeficiente de fugacidade
<b>Gás puro</b>	$\ln \phi^V = \ln \frac{f^V}{P} = (Z^V - 1) - \ln Z^V + \frac{1}{R \cdot T} \cdot \int_{V=\infty}^{V=\frac{Z^V \cdot R \cdot T}{P}} \left( \frac{R \cdot T}{v} - P \right) dv$
<b>Líquido Puro</b>	$\ln \phi^L = \ln \frac{f^L}{P} = (Z^L - 1) - \ln Z^L + \frac{1}{R \cdot T} \cdot \int_{V=\infty}^{V=\frac{Z^L \cdot R \cdot T}{P}} \left( \frac{R \cdot T}{v} - P \right) dv$
<b>Sólido Puro</b>	$\ln \phi^S = \ln \frac{f^S}{P} = (Z^S - 1) - \ln Z^S + \frac{1}{R \cdot T} \cdot \int_{V=\infty}^{V=\frac{Z^S \cdot R \cdot T}{P}} \left( \frac{R \cdot T}{v} - P \right) dv$

Fonte: Autor (2020).

No equilíbrio líquido – vapor a pressão de saturação pode ser calculada utilizando uma equação de estado estimando-se a pressão de vapor e calculando-se a fugacidades das fases líquida e vapor e comparando-as nessas condições. O equilíbrio líquido – vapor é obtido quando a relação em estudo atingir o critério de isofugacidade descrito no item 3.2.7. Caso a relação da fugacidade entre as duas fases seja diferente de zero, os cálculos são feitos de forma iterativa até que a condição seja respeitada (FERNANDES, PIZZO E MORAES JR., 2006).

É possível observar que a avaliação dos critérios de equilíbrio líquido-vapor envolve cálculos extensos que demandam muito tempo para sua realização. Dessa forma, o uso de softwares e ferramentas de simulação faz com que o estudo dessas condições seja realizado de forma prática e satisfatória.

### 3.3.2 Softwares e ferramentas para simulação

*Software* é uma ferramenta necessária para facilitar as atividades desenvolvidas durante a execução do projeto, como determinar o tamanho de torres de destilação, trocadores de calor, evaporadores e simular o funcionamento de equipamentos. Além de simplificar o trabalho,

esses procedimentos também ajudam a evitar erros e interferências nos cálculos manuais que podem causar efeitos irreversíveis (SANTOS, 2019).

A simulação de processos tem se tornado de extrema importância nos últimos anos não só com o objetivo de estudar e avaliar o desempenho de sistemas complexos como também como método de ensino – aprendizagem no ensino a nível universitário. Com o avanço da tecnologia computacional, vem sendo desenvolvidos simuladores cada vez mais sofisticados, permitindo prever o comportamento estático e dinâmico de processos químicos (PEREIRA *et al.*, 2016).

PEREIRA *et al.* (2016), em sua pesquisa, analisa a aplicação do simulador gratuito *ChemSemp* como ferramenta para o ensino de sistemas de separação na engenharia química. Dentre as conclusões do uso, o simulador permitiu a visualização dos resultados de forma dinâmica e clara por meio de tabelas e gráficos, facilitando o entendimento dos conceitos envolvidos.

O *software COCO* também é utilizado como ferramenta para visualização dos processos de separação abordados na disciplina de Operações Unitárias 3 do curso de Engenharia de Alimentos da Universidade Federal do Tocantins. Por possuir interface didática, facilita do desenvolvimento da aprendizagem e visualização das etapas de processamento assim como as variáveis envolvidas.

Lander, Silva e Santos (2016) utilizaram o *COCO, software* gratuito, como ferramenta computacional didática para estudantes de engenharia a fim de modelar e simular processos químicos possibilitando fácil visualização das variáveis resultantes.

Souza e Menezes (2017) fez uso da comunicação entre os softwares *Scilab* e *COCO* para propor uma rota para o processo de produção do Etileno glicol em conjunto com a implantação de um controlador do tipo proporcional e integral que visa o aumento do rendimento da reação de produção da substância em interesse. O estudo obteve êxito na comunicação entre os *softwares* e na conversão final da reação de produção de Etileno glicol.

Silva e Evangelista (2019) apresentam uma nova ferramenta computacional gratuita, *SINDRI*, para a estimativa de propriedades termodinâmicas de substâncias puras/misturas e de dados de equilíbrio líquido-vapor dispondo de variadas equações de estado cúbicas que são utilizadas como modelos para todos os cálculos que pode ser utilizada para fins didáticos e práticos. O software faz o uso de uma interface gráfica simples e intuitiva além de possuir código aberto permitindo a alterações a qualquer momento e fazendo com que a comparação entre os dados seja rápida e efetiva.

Rocha (2019) em seu estudo sobre modelagem e simulação de uma coluna de destilação multicomponente operando em regime estacionário desenvolveu um programa computacional escrito em linguagem de programação Fortran capaz de adaptar-se a diferentes casos reais. A validação dos resultados obtidos foi realizada utilizando uma ferramenta de simulação fiável e consolidada no mercado, *ProSimPlus*, obtendo um erro relativo percentual dos resultados foi da ordem de 0,01%.

Sawaki (2019) desenvolveu uma ferramenta educacional direcionada para simulação de reatores químicos utilizando a linguagem de programação Python. Os dados de modelagem matemática obtidos no estudo foram validados a partir do programa *Aspen Plus* e Excel/método de Runge-Kutta de 4ª ordem. O software desenvolvido mostrou-se uma ferramenta simples e intuitiva que poderia ser utilizada como complemento dentro de sala de aula facilitando a promoção do conhecimento e entendimento dos conteúdos relacionados à temática.

Dal Berto e Steffen (2020) desenvolveram um software para cálculo do equilíbrio líquido – vapor utilizando linguagem Python por meio de iterações de equilíbrio de fases. O programa foi testado com exemplos disponíveis na literatura apresentando uma precisão satisfatória podendo ser uma ferramenta potencial para o ensino da temática.

Existem uma variedade de *softwares* desde versões comerciais a gratuitas. Alguns dos exemplos mais utilizados na engenharia química e de alimentos são: *ASPEN-HYSYS*, *ChemCAD*, *AFT Fathom*, *Cape Open to Cape Open*, *Thermoflow*, *Scilab*, *Ansys CFX*, *COCO*, *PROSIM*, entre outros capazes de realizar estimativas de propriedades volumétricas, residuais e termodinâmicas, simulações de fluidos, perda de carga, dimensionamento de tubos e muito mais (HAYON, 2018). No entanto, para fins educacionais, os aplicativos comerciais demandam altos custos para licenciamento e compra de equipamentos dificultando seu uso na área acadêmica.

### 3.3.3 Excel e seus suplementos

O Microsoft Excel é um programa de planilhas eletrônicas pertencente ao pacote Microsoft Office amplamente utilizado em diversos ramos da Engenharia. Trata-se de um software amplamente disponível a baixo custo com recursos que permitirem a resolução de problemas complexos de forma simples. Entre as vantagens de se utilizar o *software* OLIVEIRA (2017) destaca: (a) ampla disponibilidade, isto é, pode ser encontrado facilmente em laboratórios de informática, computadores pessoais, computadores de empresas etc.; b)



grande quantidade de funções predefinidas (matemáticas e estatísticas); c) fácil importação de dados (arquivos de dados, instrumentos de laboratórios e placa de aquisição de dados); d) diversas ferramentas de análise.

A plataforma Excel permite a composição de rotinas próprias por meio do uso da linguagem VBA (*Visual Basic for Applications*) de modo a facilitar a execução de tarefas. No estudo da termodinâmica, diversas ferramentas foram desenvolvidas ao longo dos anos com diferentes finalidades. Alguns exemplos são: *XSEOS*, *OCTOPUS*, *THERMOXL*, *XCSP*, *Vr Therm*, entre outros que permitem os cálculos de propriedades termodinâmicas a partir de funções implementadas no código da ferramenta.

Barbosa Neto (2015) desenvolveu um simulador  $PvT$  composicional para fluidos de petróleo, de fácil manuseio, com objetivo de prever com precisão as propriedades termodinâmicas utilizando cálculos de equilíbrio de fases podendo desempenhar um papel importante para aplicações de projeto e operações de campo. O programa denominado PVTpetro foi desenvolvido a partir da linguagem de programação *Visual Basic Applications* (VBA) em aplicativo Excel. Os dados obtidos foram validados por meio de uma comparação com os resultados de pacotes termodinâmicos comerciais: *Wimprop*, *Hysys*, *COMThermo*. Ao fim, a ferramenta mostrou-se confiável em seus cálculos além de ser uma alternativa de fácil manuseio, intuitivo e gratuita.

Evangelista, Carmo e Sant'Ana (2016) desenvolveram uma biblioteca de acesso livre composta por funções a serem utilizadas para a estimativa de propriedades de compostos orgânicos moleculares denominada *OCTOPUS*. Evangelista (2018) fez uso do suplemento *OCTOPUS* utilizando para estimativas de propriedades físicas e químicas de compostos orgânicos moleculares e de líquidos iônicos.

Oliveira (2017) utilizou a praticidade da criação de rotinas de cálculos em linguagem VBA para o desenvolvimento de aplicativo para estimativa de propriedades volumétricas, residuais e termodinâmicas e avaliação de equações cúbicas e estado. O aplicativo desenvolvido mostrou-se útil para realização de projetos de válvulas e turbinas/expansores utilizando equações cúbicas.

Quaranta (2017) utilizou a extensão *xlwings* para relacionar a interface do Excel com os cálculos realizados através do Python e simular os dados de seu estudo no processamento em coluna de destilação.

Araújo (2019), em seu estudo, forneceu planilhas Excel para a resolução de problemas envolvendo o equilíbrio líquido-vapor de misturas binárias.

Santos (2019) determinou a pressão de vapor de espécies químicas utilizadas na indústria de alimentos por meio de linguagem VBA implementada no Excel destacando o programa como uma alternativa rápida, eficaz e precisa.

Dessa forma, o uso do Excel ao longo dos anos vem se mostrando uma ferramenta útil na análise de dados nos setores da Engenharia Química e de Alimentos podendo ser utilizado tanto a nível universitário facilitando o processo de ensino – aprendizagem quanto em situações práticas.

### **3.4 Ensino da termodinâmica na Engenharia de Alimentos**

O propósito do curso de Engenharia de Alimentos é preparar um profissional capaz de desempenhar as atividades de Engenharia dentro das indústrias do ramo da alimentação, desenvolvendo projetos e processos produtivos, a partir das características de qualidade dos produtos, objetivando a otimização dos recursos e aumento da produtividade.

Assim sendo, diante de todo o exposto, entende-se que o estudo da termodinâmica é essencial para formação de um profissional apto a solucionar variadas problemáticas dentro e fora do ambiente industrial. No entanto, é possível encontrar diversas problemáticas relacionadas ao seu processo de ensino- aprendizagem que influenciam negativamente o desenvolvimento do aluno e formação profissional.

#### **3.4.1 Ensino da termodinâmica a nível universitário e problemáticas encontradas**

De forma geral, o ensino da termodinâmica a nível universitário engloba: conceitos básicos (grandezas e propriedades termodinâmicas), a primeira lei, a segunda lei, espontaneidade e equilíbrio. Os conceitos discutidos dentro da disciplina são basicamente os mesmos em qualquer lugar do mundo. Apesar dos tópicos básicos da termodinâmica de engenharia não terem sofrido alterações significativas ao longo dos anos, os professores têm se esforçado em modificar a abordagem do ensino tradicional de modo a auxiliar a compreensão e domínio do assunto por parte dos alunos (UGURSAL e CRUICKSHANK, 2015).

Numerosas pesquisas demonstram que os alunos podem ter dificuldades com os conceitos termodinâmicos porque têm problemas para visualizar os conceitos, o que leva a uma compreensão insuficiente e falta de fixação do assunto abordado (PATRONO 1997; COX *et*

*al.* 2003; LIU 2011; apud UGURSAL e CRUICKSHANK, 2015). Estudos apontam que o ensino tradicional na Engenharia é quase sempre dedutivo, iniciando em teorias e exemplificando-as ao final (PRINCE e FELDER, 2006; apud PARISOTO, 2015). Tal característica enfatiza a memorização e compreensão isolada dos assuntos. Bain *et al.* (2014) em uma revisão a respeito do processo de ensino – aprendizagem da termodinâmica a nível universitário apontam como fortes preditores do sucesso do aluno na disciplina a proficiência em matemática e habilidades de pensamento lógico. Assim, há necessidade de optar por metodologias de ensino que priorizem o aspecto indutivo onde estudos de caso ou problemas são introduzidos e as teorias são ensinadas apenas se sentirem necessidade. (PARISOTO, 2015).

Métodos indutivos, de acordo com a definição de Prince (2004), diz respeito à “qualquer método institucional que engaje os estudantes no processo de aprendizagem, na qual estes façam atividades que os levem a aprenderem, pensando no que estão fazendo”. A utilização dos métodos indutivos desperta não somente a aprendizagem conceitual como também estimula o desenvolvimento do pensamento crítico e capacidade de argumentação visando uma aprendizagem ativa. (PRINCE e FELDER, 2006; SCHNEIDER *et al.*, 2002; MATOS, 2009; PLANINSIC, 2007; apud PARISOTO, 2015). Sözbilir (2004) apud Bain *et al.* (2014) também relata como aspecto muito importante o desenvolvimento profissional do corpo docente uma vez que ao trabalharem com modelos de aprendizagem defasados e recursos limitados influenciam significativamente o processo de ensino – aprendizagem da termodinâmica.

O uso de concepções alternativas para o entendimento de processos relaciona-se ao que pode ser utilizado para compreensão de futuras discussões. Dessa forma, é preciso construir uma nova visão da base científica no que diz respeito aos tópicos mais problemáticos dentro do ensino da termodinâmica: energia, entalpia, entropia, energia livre e equilíbrio. Isto fica claro ao observar que nos processos de educação superior, em especial nas engenharias, há predominância de matrizes curriculares com baixa, ou quase nenhuma, interdisciplinaridade, seja entre diferentes componentes curriculares, seja na relação desenvolvida entre a teoria e a prática (GONÇALVES, 2012; apud MONARO *et al.*, 2018). Em seu estudo, Parisoto (2015) aponta a necessidade da interdisciplinaridade entre as disciplinas da Engenharia de modo a unificar o conhecimento geral dos assuntos e contextualizá-los para situações práticas fazendo uso de diversas ferramentas (cinestésica, visual e auditiva) objetivando a aprendizagem significativa do conteúdo.

Mulop, Yusof e Tasir (2012) apontam que são encontradas muitas dificuldades por parte dos alunos no entendimento de conceitos básicos da termodinâmica. Os principais obstáculos dizem respeito ao direcionamento da compreensão teórica de conceitos que são considerados muito abstratos e por consequência, difíceis de visualizar. Por meio do uso de uma abordagem de ensino tradicional centrada no professor, os autores enfatizam que em muitos casos os alunos não são capazes de relacionar o conhecimento adquirido com situações reais tratando os problemas de termodinâmica como casos isolados. Problemas como a falta de interpretação e dificuldades na retenção de conhecimento são frequentemente relatados em seu estudo e assim, a metodologia tradicional não se mostra eficaz no processo de aprendizagem.

### 3.4.2 Metodologias de ensino: breve histórico e metodologias emergentes

Em função das diversas problemáticas enfrentadas pelos alunos no aprendizado da termodinâmica, ao longo dos anos, foram projetados e desenvolvidos alguns métodos para melhoria do processo de ensino – aprendizagem.

Ausubel (1963) apresenta o conceito de aprendizagem significativa destacando a criação de significados pelo aluno transformando este em significado cognitivo. Dewey (1959) anuncia que o conhecimento passa por um processo reflexivo e ordenado de ideias iniciando com o levantamento de uma problemática e finalizando com a resolução desta. Assim, verifica-se a importância do estímulo correto para esse processo promovendo a melhoria do aprendizado e tornando os alunos autônomos na busca de conhecimentos (BASTOS, 2006; apud MONARO *et al.*, 2018).

Monteiro *et al.* (2012), em seu estudo, traz uma revisão a respeito do histórico de metodologias e práticas de ensino em engenharia. Nele, verifica que em função de variadas demandas novas metodologias de aprendizagem foram sendo desenvolvidas ao longo dos anos. O quadro 3 apresenta um breve histórico dos modelos apontados pelo autor.

**Quadro 3.** Descrição das metodologias de ensino.

MÉTODO	DESCRIÇÃO	FONTE
<i>Discovery Learning</i>	Trata-se do fornecimento prévio de problemas e estimulação dos alunos pela busca de soluções.	Bruner (1961) apud Monteiro <i>et al.</i> (2012)

<b><i>Inquiry Learning</i></b>	Abrange o ensino ativo por meio de uma metodologia construtivista com quatro níveis (Confirmação, Estruturado, Guiado e Aberto) em que a curiosidade é a grande força motriz.	Banchi e Bell (2008) apud Monteiro <i>et al.</i> (2012)
<b><i>Case-Based Learning (CBL) e Just-in-time Teaching (JiTT)</i></b>	O CBL estimula a discussão e análise colaborativa explorando situação realísticas e específicas desenvolvendo diferentes conclusões. O JiTT baseia-se no direcionamento prévio do aluno, extraclasse, que reflete significativamente na eficiência da aula incentivando a participação ativa dos alunos.	Austin (1993) e Novak <i>et al.</i> (1999) apud Monteiro <i>et al.</i> (2012)
<b><i>Colaborative Learning</i></b>	Trata-se de uma aprendizagem colaborativa como metodologia de ensino ativo em que, sob orientação do professor, os alunos são agrupados a fim de aprenderem uma mesma ideia.	Smith e MacGregor (1992) e Chiu (2004) apud Monteiro <i>et al.</i> (2012)
<b><i>Cooperative Learning</i></b>	Diz respeito à aprendizagem cooperativa que difere da aprendizagem colaborativa uma vez que cada participante do grupo deve dispor de um papel próprio.	Smith e MacGregor (1992) apud Monteiro <i>et al.</i> (2012)
<b><i>Project-Led Education (PLE)</i></b>	Trata-se da educação guiada por projeto podendo ocorrer em três níveis. O primeiro diz respeito ao uso do projeto paralelamente à disciplina de ensino tradicional; o segundo, aplicado de forma interdisciplinar; e no terceiro, a aplicação do projeto substitui a matéria como um todo.	Helle, Tynjälä e Olkinuora (2006) apud Monteiro <i>et al.</i> (2012)

<p><b><i>Problem-Based Learning (PBL)</i></b></p>	<p>É uma metodologia de ensino baseada na resolução de problemas onde a aprendizagem é centrada no aluno e os professores atuam como facilitadores. Este método estimula o desenvolvimento e uso de habilidades além de desenvolver meios de auto aprendizagem a partir do trabalho em grupo e identificação de informações que possam solucionar a problemática apresentada.</p>	<p>Ausubel <i>et al.</i> (1980) e Barrows (1996) apud Monteiro <i>et al.</i> (2012)</p>
<p><b><i>Project-Based Learning (PJBL)</i></b></p>	<p>Promove a aprendizagem por meio da participação do aluno em equipes de projeto caracterizando-se como: integradora, cooperativa, orientada à prática e às competências, multidisciplinar, criativa e motivadora.</p>	<p>Oliveira e <i>et al.</i> (1998) e Wijnen (1999) apud Monteiro <i>et al.</i> (2012)</p>

Fonte: Autor (2020).

Um dos principais desafios para aplicação da metodologia *Discovery Learning* diz respeito ao tempo e esforço exigido pelo método dificultando a abrangência com qualidade de todo o conteúdo sendo sua aplicação válida apenas em casos específicos. O método *Inquiry Learning* por instigar a curiosidade revela-se como uma experiência cognitiva mais relevante. Já o *Case-Based Learning (CBL)* e *Just-in-time Teaching (JiTT)* consistem na preparação prévia e extraclasse do aluno favorecendo o surgimento de dúvidas e o bom rendimento das aulas. Os métodos *Colaborative Learning* e *Cooperative Learning* diferem na atribuição de tarefas em que a relação de interdependência favorece o desenvolvimento de outras habilidades sob orientação do professor. *Project-Led Education (PLE)*, *Problem-Based Learning (PBL)* e *Project-Based Learning (PJBL)* tratam da resolução de casos práticos ou problemas reais facilitando o processo de aprendizagem uma vez que permitem mostrar ao aluno que o conteúdo teórico é importante bem como motivá-lo a trabalhar em equipe e a desenvolver um estilo próprio para a solução de problemas (MONTEIRO *et al.*, 2012).

Parisoto (2015) cita que Prince e Felder (2006) recomendam a metodologia de ensino a partir de projetos (PBL) em cursos de Engenharia, para aulas de laboratório, cursos que visam o desenvolvimento de processo e/ou produtos uma vez que visam uma aprendizagem ativa e possibilitando articulação com métodos baseados em teorias cognitivas.

Silva *et al.* (2019) em um estudo sobre a transposição didática do conteúdo da termodinâmica química destacam a importância da programabilidade, recontextualização e gestão do tempo na construção do conhecimento devido a ocorrência de deformações, supressões e criações didáticas na construção do texto do saber. Além disso, os autores também puderam observar um fenômeno denominado acréscimo individual no qual há inclusão de elementos teóricos por meio do professor.

Plasses *et al.* (2017) em uma pesquisa a respeito da autonomia na aprendizagem da termodinâmica chegam à conclusão de que os alunos não sabem pesquisar corretamente fazendo uso de livros didáticos e por isso salientam a importância da autonomia para que o aluno faça buscas extraclasse a partir do uso da *internet*. No entanto, nesse processo, a explicação posterior do professor torna-se tão relevante quanto para fixação do conteúdo. Mazaro e Darroz (2017) a respeito do ensino da termodinâmica a partir de pesquisas em ferramentas da internet destacam que apesar da relevância do uso das ferramentas tecnológicas no processo de ensino, elas são apenas uma estratégia complementar para utilização do professor com finalidade de sanar as dificuldades apresentadas.

O processo de ensino – aprendizagem sofreu muitas mudanças ao decorrer dos anos em função da introdução de uma série de novos fatores que levam em consideração abordagens tecnológicas e comportamentais. O uso de novas ferramentas de ensino que levem o aluno a interagir e absorver os princípios básicos abordados em um estudo tem sido cada vez mais frequentes principalmente no que diz respeito ao uso de recursos computacionais e simulação de processos (SÁ, NASCIMENTO E LIMA, 2020).

Diante da atual situação de pandemia causada pela *Covid-19* e consequentes medidas de afastamento torna-se cada vez mais importante a adesão de novas metodologias de ensino que priorizam o uso de ferramentas tecnológicas. Almeida *et al.* (2020) destaca o despreparo, falta de incentivo para com a equipe docente o que acaba por prejudicar o desempenho das aulas à distância e a aprendizagem do aluno. Analogamente, Nhantumbo (2020) ressalta as dificuldades e as necessidades sentidas por alunos e professores em lidar com diferentes plataformas digitais durante as suas interações online, apesar das Instituições Educativas terem organizado e replanificado as atividades a fim de contornar os efeitos causados pela pandemia.

## 4 METODOLOGIA

Visando atingir o objetivo geral deste trabalho, a metodologia foi desenvolvida em três etapas diferentes: (1) construção do protótipo, (2) modelagem e simulação da superfície  $PvT$  da água pura e (3) incorporação dos resultados das etapas 1 e 2 na metodologia de ensino das disciplinas de termodinâmica I e II do curso de engenharia de alimentos da UFT.

### 4.1 Construção do protótipo

Para a construção do protótipo foi selecionado o gesso de construção civil adquirido em uma loja de material de construção da cidade de Porto Nacional – TO. A escolha do material deu-se por ser um material resistente, de prática aplicação, rápida execução, fácil de ser moldado e por possuir baixo custo.

Inicialmente fez-se a montagem de um cubo com o 40x40x40cm sobre um suporte de madeira. A partir do cubo seco, iniciou-se a quebra e raspagem do material com auxílio de martelo e lâminas de aço, para que se assemelhe o máximo possível com o modelo 3D da Figura 5. Como existe uma semelhança no comportamento  $PvT$  da maior parte das substâncias puras, o protótipo construído representa de forma tridimensional, as fases e particularidades de qualquer substância pura em forma geral.

A modelagem e acabamento foram realizados com auxílio de lixa multiuso. Posteriormente, o cubo esculpido foi pintado e, as fases e isotermas foram identificados. As projeções do diagrama  $PT$ ,  $Pv$  e  $Tv$  também foram identificados a fim de facilitar a visualização e entendimento do diagrama.

### 4.2 Modelagem e simulação

As relações Pressão-Volume-Temperatura tentam representar, de forma analítica, as superfícies  $PvT$  da Figura 5. SANTOS (2019) apresenta que existem basicamente três formas de estimar os valores dessas variáveis: base teórica, empírica ou semi-empírica. De forma satisfatória, uma equação de estado é capaz de prever o comportamento do equilíbrio de fases de uma substância pura. No entanto, ao se aplicar um modelo ideal para uma situação real são



obtidos muitos desvios. Dessa forma, muitas equações foram e têm sido propostas. As equações resultantes são equações cúbicas que relacionam dados empíricos e semi-empíricos aproximando os resultados à realidade.

Para esse estudo, a princípio, foram estudadas as equações de estado que são frequentemente citadas na literatura: Van der Waals, Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong e Peng-Robinson. A partir dos resultados obtidos em literatura selecionou-se a Equação de Peng-Robinson (1976), por permitir uma melhor estimativa das relações de pressão de vapor, volume e equilíbrio de fases, além de ser uma das mais recomendadas por autores reconhecidos na área (SMITH, VAN NESS E ABBOTT, 2007; SANDLER, 1999).

A Equação de Peng-Robinson adotada para este trabalho é:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a \alpha(T_r, \omega)}{v(v + b) + b(v - b)} \quad (23)$$

Em que,

$P$ : Pressão do sistema

$R$ : Constante dos gases ideais

$T$ : Temperatura do sistema

$v$ : Volume molar

$a \alpha(T_r, \omega)$  e  $b$ : parâmetros de ajuste da equação

Inicialmente, para montagem da planilha de cálculos, os valores das propriedades características da água pura: massa molar (kg/kmol), fator acêntrico ( $\omega$ ), temperatura crítica (K), pressão crítica (bar) e volume crítico (cm<sup>3</sup>/mol) foram tomados da literatura (REID, PRAUNSNITZ E SHERWOOD, 1977). Para construção das isotermas (linhas de temperatura constante) e consequente análise do comportamento volumétrico da substância, calculou-se o gradiente de pressões para uma faixa de temperatura e volume. Por fim, para a obtenção dos dados no equilíbrio líquido-vapor foram utilizados os suplementos XSEOS e OCTOPUS que, em síntese, consistem em uma biblioteca de funções do *MS-Excel* implementadas em linguagem VBA (*Visual Basic for Applications*) que permitem calcular propriedades termodinâmicas derivadas de equações de estado. Dessa forma, os valores da pressão de vapor e volume foram estimados a partir de uma faixa de temperatura pré-estabelecida e foram comparados com dados encontrados na literatura (WYLEN, SONNTAG e BORGNAKKE, 2013).

Do ponto de vista matemático, qualquer equação com duas variáveis independentes na condição  $z = z(x, y)$  representa um espaço tridimensional em uma área retangular. Assim, é possível representar o comportamento  $PvT$  de uma substância sobre uma superfície no espaço, como mostra a Figura 5. Nela, as regiões de uma fase aparecem como superfícies curvas na superfície  $PvT$  e as regiões de duas fases como superfícies perpendiculares ao plano  $PT$ . Nesse estudo após a obtenção da base de dados, gerou-se uma superfície  $PvT$  para a água pura a partir do equilíbrio de fases entre duas propriedades intensivas independentes, pressão e temperatura, e uma terceira que se tornou dependente, volume. Ou seja, foi gerada a superfície tridimensional a partir do comportamento volumétrico das isotermas características da região de equilíbrio líquido vapor estudada.

### 4.3 Proposta metodológica em complementação ao ensino da termodinâmica

Levando em consideração a dificuldade de assimilação dos conteúdos tratados neste TCC e baseados na minha experiência como aluna, como monitora e na experiência dos meus colegas de sala, foram realizadas algumas propostas, onde os resultados das duas etapas precedentes poderão ser incorporados como ferramentas para complementar a metodologia de ensino utilizada pelo professor da disciplina de termodinâmica I e II do curso de engenharia de alimentos da UFT, visando estimular e favorecer o entendimento do comportamento  $PvT$  das substâncias puras.

Por meio do método de ensino indutivo descrito por Prince (2004), a proposta nesse estudo baseia-se na aprendizagem significativa em substituição ao método tradicional. Dessa forma, propõe-se a inclusão de uma sequência didática interativa ao conteúdo programático das disciplinas de termodinâmica I e II de modo a instigar a participação ativa dos alunos nas atividades a serem desenvolvidas.

A partir da implantação da nova metodologia abordada pretende-se incorporar à ementa o uso dos suplementos XSEOS e OCUTOPUS como facilitadores para estudo e visualização das propriedades volumétricas para fluidos puros e todas as variáveis de processo. Fundamentado na literatura, escolheu-se como estratégia de ensino a aplicação parcial da metodologia baseada na resolução de problemas, modelo *Problem-Based Learning (PBL) parcial*, fazendo uso do trabalho colaborativo como principal ferramenta de interação e aprendizagem.

A sequência didática foi planejada seguindo o modelo proposto por Hung (2006) apud Barros (2020) denominado 3C3R em que há abordagem de duas categorias em equilíbrio: componentes principais e componentes procedimentais. A primeira diz respeito ao conteúdo, contexto e conexão, que estão relacionados com o aprendizado satisfatório do conteúdo e conceitos da disciplina. Já a segunda categoria trata-se da investigação, raciocínio e reflexão que objetiva proporcionar o envolvimento dos alunos e desenvolvimento das habilidades de resolução de problemas a partir da interpretação visual dos conceitos.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 Construção do protótipo

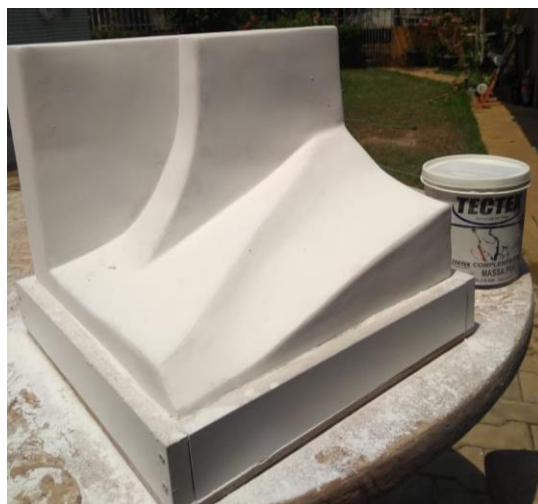
A princípio, fez-se a montagem do protótipo a partir da mistura de gesso e água obtendo-se um cubo 40 x 40 x 40 cm conforme o descrito. A partir do cubo de gesso foram feitos os recortes conforme o modelo computadorizado (Figura 5). Para dar melhor acabamento ao protótipo, fez-se uma camada de Massa PVA conforme a Figura 7. Em seguida, com auxílio de uma lixa, a superfície foi lixada até que ficasse uniforme (Figura 8).

**Figura 7.** Recortes iniciais do protótipo.



Fonte: Autor 2020.

**Figura 8.** Acabamento do protótipo.



Fonte: Autor 2020.

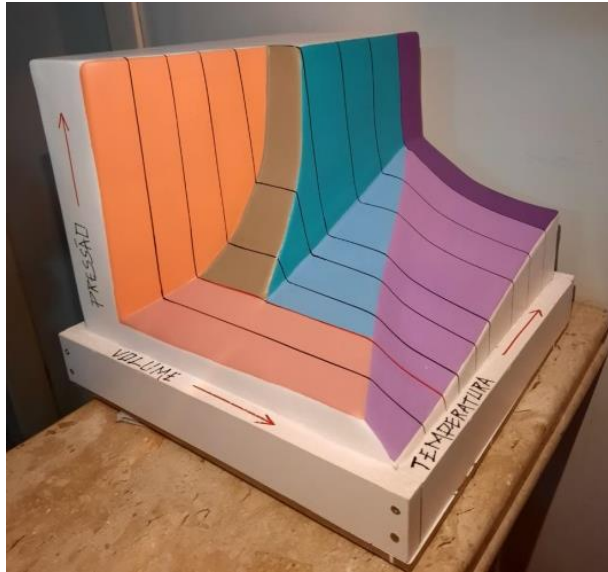
Para pintura do diagrama, foi utilizado como modelo o apresentado na Figura 5. De modo que cada região característica da superfície fosse identificada com uma cor diferente (Figura 9). Com base nisso é possível observar que a fase sólida se encontra a baixas

temperaturas e ocupa menor volume em comparação as outras duas fases; requer maior temperatura para alcançar a fase líquida que é um estado intermediário; e a fase de vapor é possível ser encontrada a qualquer temperatura dependendo da pressão exercida sob o sistema. É possível observar também as fases de transição: sólido-líquido, sólido-vapor e líquido-vapor. Analisando o diagrama encontra-se um ponto, ponto crítico, em que a diferença de volume entre a fase líquida e vapor tendem a zero chegando a uma região de fluido em que as características de ambas as fases se confundem. Por fim, encontra-se também a temperatura do ponto triplo no qual as três fases ou estados físicos da substância coexistem em equilíbrio.

O comportamento da superfície representada foi feito sem referência específica e com base no comportamento da maioria das substâncias puras uma vez que exibem o mesmo comportamento geral com exceção da água. Durante a solidificação dessas substâncias um aumento de pressão dificulta a expansão, é necessário mais energia para o processo, o que faz com que a temperatura de fusão aumente. No entanto, a temperatura do ponto triplo e a temperatura crítica variam de uma substância para outra. Para a água, com um aumento de pressão facilita a contração, é necessário menos energia para o processo, o que faz com que a temperatura de fusão diminua.

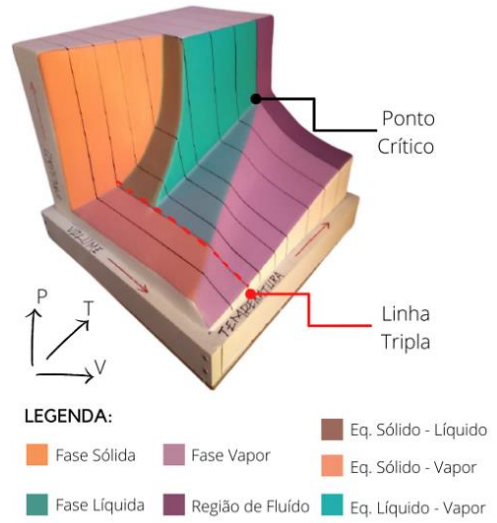
As Figuras 11 e 12 apresentam as representações esquemáticas dos planos “Pressão x Volume” e “Pressão x Temperatura” que são os mais abordados no estudo da termodinâmica. A partir deles é possível diferenciar as regiões monofásicas e bifásicas pelo gradiente de cores utilizado. As regiões bifásicas (duas fases coexistindo em equilíbrio) surgem quando há uma mudança de fase, tais como, sublimação, fusão e vaporização. São elas: As regiões bifásicas: sólido-vapor, sólido-líquido e líquido-vapor. Está destacada também a linha tripla onde três fases podem coexistir em equilíbrio, algumas isotermas (linhas de temperatura constante) e ponto crítico da substância, dado pelas coordenadas temperatura crítica ( $T_c$ ) e pressão crítica ( $P_c$ ). A temperatura crítica de uma substância pura é a maior temperatura na qual líquido e vapor coexistem em equilíbrio (TARDIOLI, 2013). A Figura 10 apresenta a legenda dos pontos característicos identificados no diagrama.

**Figura 9.** Protótipo da superfície  $PvT$ .



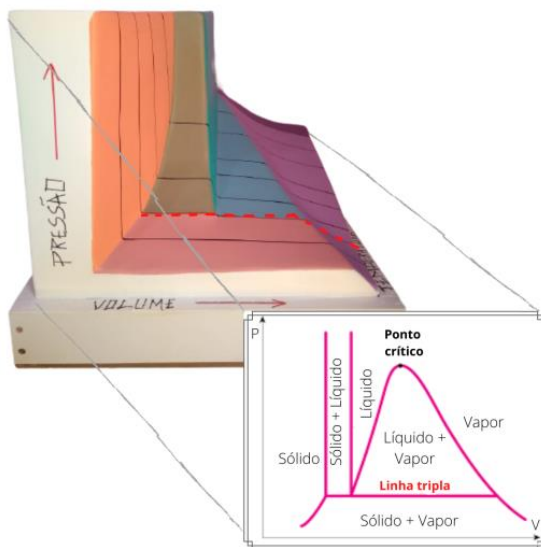
Fonte: Autor 2020.

**Figura 10.** Identificação das regiões características da superfície  $PvT$ .



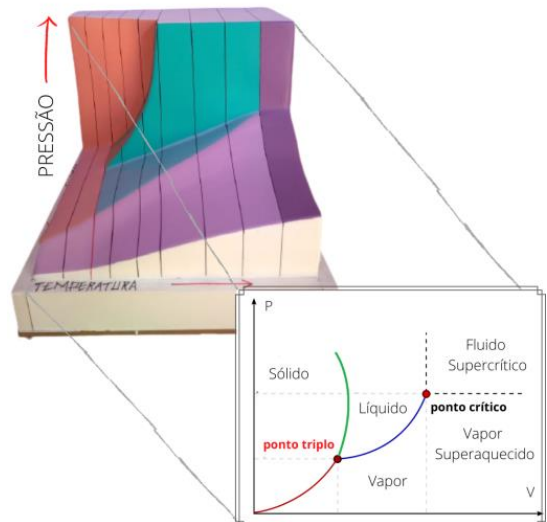
Fonte: Autor 2020.

**Figura 11.** Projeção do plano “Pressão x Volume”.



Fonte: Autor 2020.

**Figura 12.** Projeção do plano “Pressão x Temperatura”.



Fonte: Autor 2020.

É sabido que para substâncias puras qualquer propriedade termodinâmica pode ser escrita como função de duas outras propriedades independentes que de acordo com a Regra de Gibbs são suficientes para conhecer o estado em que a substância se encontra. No protótipo desenvolvido fica evidente a relação entre duas coordenadas que obrigatoriamente determina a terceira grandeza, seja ela temperatura, pressão ou volume específico. No entanto, de acordo

com Angelo e Moreira (2001), a representação esquemática em 3D (desenho) não é completamente explicativa, pois, ainda trata com limitações do modo de construção em duas dimensões (gráficos), onde muitas características não são evidentes e encontram-se ocultas ou imperceptíveis.

Verifica-se que ainda que seja utilizado o recurso da perspectiva, Angelo E Moreira (2001) também observam que é possível que algumas regiões gerem ambiguidades nas interpretações, como concavidades que não podem ser distinguidas – um exemplo é a região próxima ao ponto crítico. O modelo físico representado pelo protótipo é capaz de suprimir essas impertinências possibilitando uma clara visualização de todos os processos envolvidos. Os autores também observaram que a construção de um modelo físico é uma ferramenta didática importante no ensino da termodinâmica e concluíram que o modelo é capaz de introduzir os conceitos muito mais facilmente do que os gráficos, não se detendo nas dificuldades características deles e eliminando as dúvidas mais frequentes quanto a apresentação da teoria.

Gregio (2016) em sua dissertação introduz o estudo da entropia com métodos de quantificar o que chamamos de desordem e afirma que o uso de métodos alternativos de aprendizagem para o entendimento da termodinâmica desperta o interesse do aluno e aumenta a capacidade de aprendizagem. Analogamente, o uso do protótipo e a utilização da visualização tridimensional na engenharia, em especial na Engenharia de Alimentos, são de extrema importância para o aprendizado. A estimulação visual possibilita fácil entendimento de como os fenômenos ocorrem e, em alguns casos, como deveriam ocorrer em condições ideais e consequente assimilação dos conteúdos previstos na ementa do curso de termodinâmica I e II que também serão aproveitados em outras disciplinas oferecidos na grade curricular como Operações Unitárias.

Além disso, o modelo desenvolvido possui potencial de suprir as impertinências encontradas em análises de gráficos bidimensionais uma vez que permite visualizar melhor a relação entre as três variáveis de estado estudadas e observar o comportamento volumétrico das isotermas características. O protótipo ainda permite verificar as propriedades de transição de fases (sólido-líquido, líquido-vapor e sólido-vapor) uma vez que a mudança de fases acontece a temperatura e pressão constantes e esse comportamento pode ser facilmente verificado.

## 5.2 Modelagem e simulação

As equações de estado são capazes de representar o comportamento  $PvT$  de uma substância pura a partir da incorporação de parâmetros que levam em conta desvios da idealidade. Com base na literatura estudada, os modelos aqui citados foram testados no *Excel* com uso dos suplementos XSEOS e OCTOPUS e a partir dos resultados obtidos foi possível comparar qual EDE fornecia o valor mais próximo da literatura adotada.

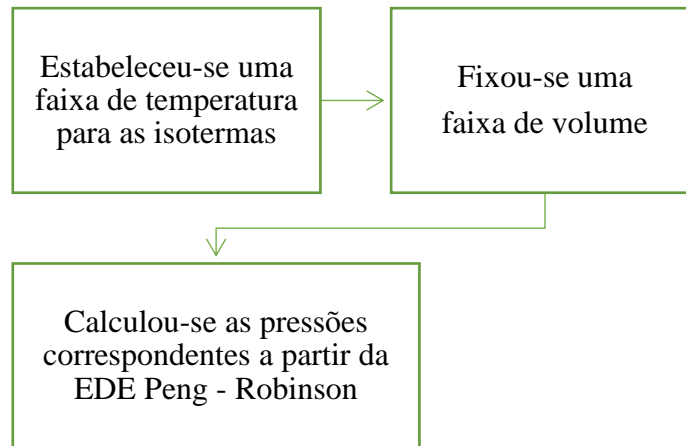
A equação de Peng-Robinson (1976) leva em consideração as propriedades críticas de cada substância, ou seja, até que ponto duas fases podem coexistir sem que saia da condição de equilíbrio permitindo melhor estimativa do volume molar. Além disso, está entre as equações de estado de uso mais disseminado na indústria para simulação e modelagem termodinâmica de processos, devido a sua eficiência, simplicidade e facilidade de resolução (LEAL, 2012). Desta forma, foi adotada essa equação para o presente estudo.

Para este estudo, escolheu-se a água pura em função da ampla faixa de utilizações tanto no curso de termodinâmica quanto em condições industriais. Para montagem da planilha de cálculos, trabalhou-se com a EDE de Peng-Robinson em função da pressão como demonstrado na Equação 25. Foi selecionada uma faixa de temperatura para construção e análise das isotermas subcríticas ( $T < T_c$ ), crítica ( $T = T_c$ ) e supercríticas ( $T > T_c$ ). Posteriormente escolheu-se uma faixa de volume específico representativa variando de 30 cm<sup>3</sup>/mol até 1030 cm<sup>3</sup>/mol a fim de verificar o comportamento volumétrico das isotermas a partir dos valores de pressão calculados com a EDE para cada valor de temperatura. O procedimento é descrito no fluxograma da Figura 13.

Os pontos encontrados foram representados em um gráfico “Pressão x Volume” que foi devidamente ajustado para melhor visualização dos dados (Figura 17). Para o cálculo dos dados no equilíbrio líquido-vapor a partir da EDE de Peng-Robinson foram utilizados os suplementos XSEOS e OCTOPUS. Foram estabelecidos 50 pontos entre a temperatura do ponto triplo (273,15 K) até o ponto crítico (647,10K). Para dar início ao cálculo estimou-se a pressão de vapor, ou pressão de equilíbrio do sistema. Essa estimativa foi realizada com auxílio do suplemento OCTOPUS, desenvolvido por EVANGELISTA *et al.* (2016), que possui 19 métodos disponíveis para estimativa da pressão de vapor. Para esse estudo, a partir das propriedades da água utilizou-se o método de Ambrose e Walton (1989), pois ele permite a estimativa da pressão de saturação levando em consideração apenas o fator acêntrico, pressão crítica, temperatura crítica e a temperatura do sistema. No entanto, há restrições para sua

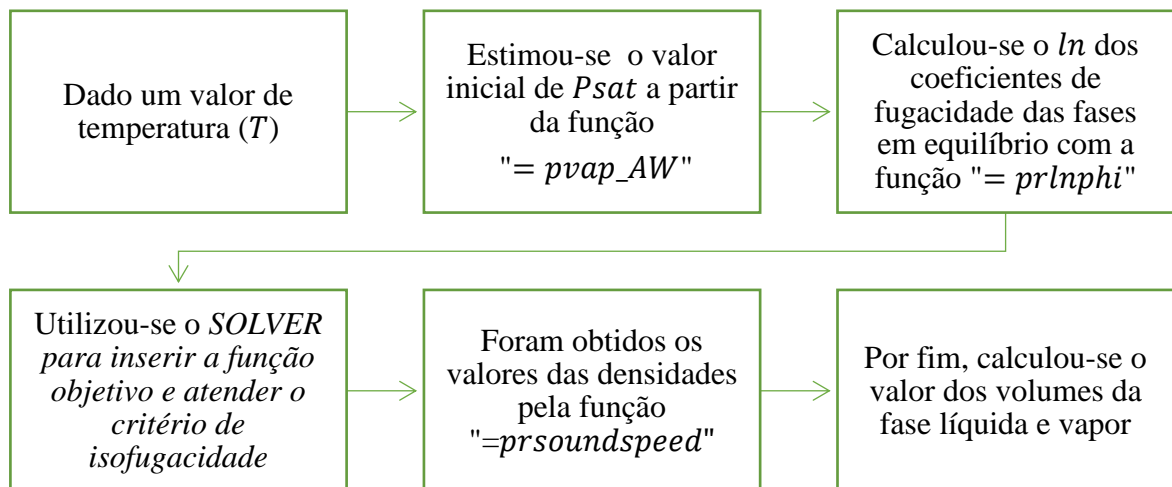
aplicação uma vez que sua aplicação só é possível com uso de dados confiáveis das coordenadas do ponto crítico e fator acêntrico e a aplicação do método não garante o real valor da pressão na condição de equilíbrio. O fluxograma do processo está representado na Figura 14.

**Figura 13.** Fluxograma de construção das isotermas.



Fonte: Autor 2020.

**Figura 14.** Fluxograma de construção das curvas de saturação calculada



Fonte: Autor 2020.

O critério de equilíbrio líquido – vapor pressupõe uma igualdade de temperatura e pressão entre as duas fases. Sabendo-se que a fugacidade da substância é função apenas da temperatura e pressão em que ela se encontra deduz-se que o equilíbrio é equivalente à igualdade da fugacidade das fases, analisando os coeficientes de fugacidade fez-se rearranjo das equações para se assemelhar ao método introduzido no suplemento XSEOS e calcular as condições de equilíbrio do sistema. Assim sendo, o equilíbrio entre as fases sólido e líquido só

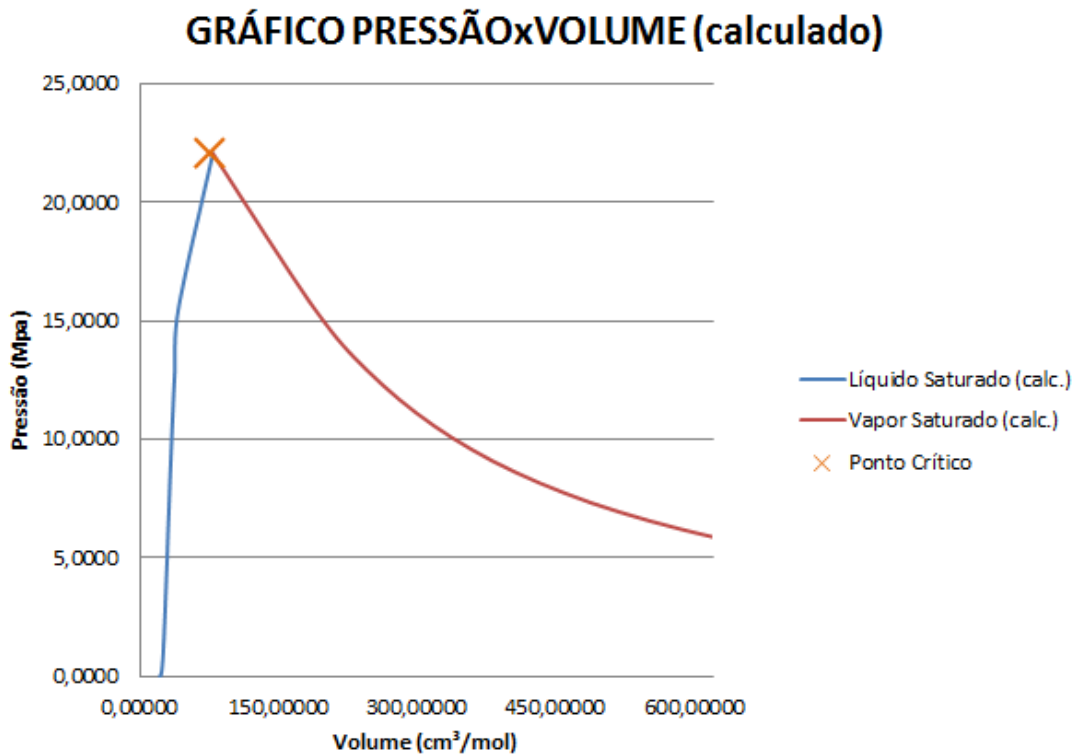


existe se a relação entre o  $\ln$  dos coeficientes de fugacidade forem iguais, uma vez que os dados evoluem de forma exponencial. Para garantir esse critério de isofugacidade fez-se uso da ferramenta *SOLVER* - própria do Excel para análise de dados- de modo a introduzir uma função objetivo (Equação 24) capaz de zerar o módulo da diferença entre os valores calculados variando o valor da pressão de saturação estimada e encontrando um novo valor que represente a real condição de equilíbrio.

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^N | \ln \phi_i^L - \ln \phi_i^V | \quad (24)$$

Posteriormente, calculou-se a densidade e o volume específico da região de líquido e vapor saturado a partir de funções do XSEOS. EVANGELISTA *et al.* (2016) ao analisar o uso da ferramenta na resolução de problemas de equilíbrio de fases aponta que, dessa forma, apesar de ser uma ferramenta potencial, os cálculos não são efetuados de forma totalmente automática priorizando seu aspecto didático. A figura 15 apresenta representação gráfica no plano “Pressão x Volume” das curvas de saturação calculadas e as coordenadas do ponto crítico.

**Figura 15.** Representação do plano “Pressão x Volume” para os dados calculados

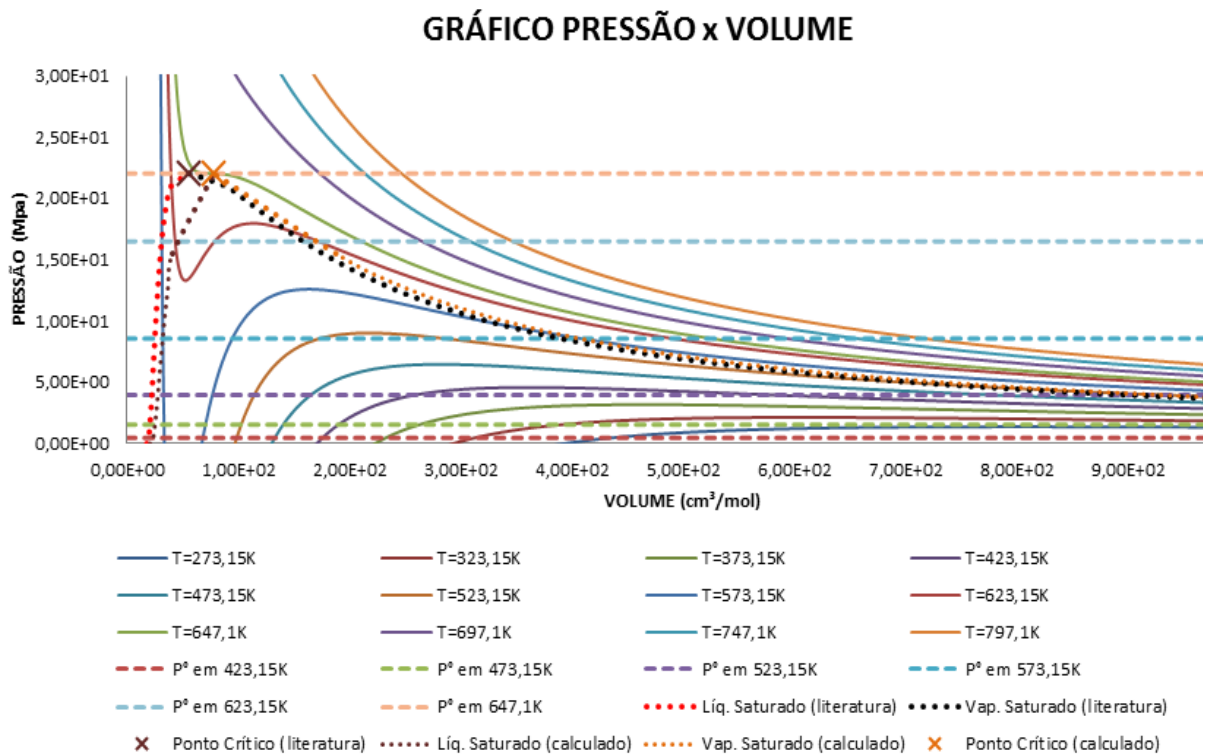


Fonte: Autor 2020.

A fim de aferir a precisão dos métodos utilizados valores tabelados a partir de uma tabela de propriedades adaptada de Van Wylen (2013). A partir dos dados calculados foram obtidas as coordenadas do ponto crítico calculadas sendo obtida pressão crítica ( $P_c$ ) equivalente a 22,055 MPa e volume crítico ( $V_c$ ) igual a 78,3956  $cm^3/mol$  para temperatura crítica ( $T_c$ ) sendo 647,10 K. De acordo com os dados tabelados para água pura tem-se para  $T_c = 647,10 K$ ,  $V_c = 55,9546 cm^3/mol$  e  $P_c = 22,064 Mpa$ . A vista disso é possível perceber que houve um pequeno desvio entre os valores do volume crítico decorrente de diferenças nos valores das propriedades termofísicas utilizadas para o cálculo. É válido ressaltar que o presente estudo se trata de uma análise não quantitativa e os valores da literatura são adotados apenas como referência ao comportamento que, para o caso, apresentaram comportamentos similares.

Todos os dados obtidos foram igualmente relacionados no plano “Pressão x Volume” como demonstra a Figura 16.

**Figura 16.** Representação dos dados no plano “Pressão x Volume”.



Fonte: Autor 2020.

Analisando de forma geral o comportamento das isothermas quando  $T < T_c$  tem-se que a região de líquido subresfriado localizado a esquerda da curva de líquido saturado e caracterizado como curvas muito inclinadas como consequência de líquidos serem pouco

compressíveis. Tem-se também a região de vapor superaquecido localizado a direita da curva de vapor saturado com curvas pouco inclinadas como consequência de vapores serem muito compressíveis. No plano representado, foram traçadas também linhas de pressão de saturação, representadas pelas linhas pontilhadas na Figura 16, uma vez que a condição de equilíbrio estabelece que a mudança de fase ocorre à temperatura e pressão constantes. Assim sendo, ainda que uma isoterma subcrítica forneça três valores de raízes oriundos da equação cúbica, o valor intermediário não apresenta significado físico. SANTOS (2019), em um estudo da determinação da pressão de vapor de espécies químicas utilizadas na indústria de alimentos a partir do uso do Excel, descreveu que para isotermas supercríticas ( $T > T_c$ ) é obtido apenas um valor de volume correspondente a cada pressão. Já para isotermas críticas ( $T = T_c$ ), a equação cúbica obtém três raízes reais e idênticas. O mesmo comportamento descrito pode ser observado na Figura 16.

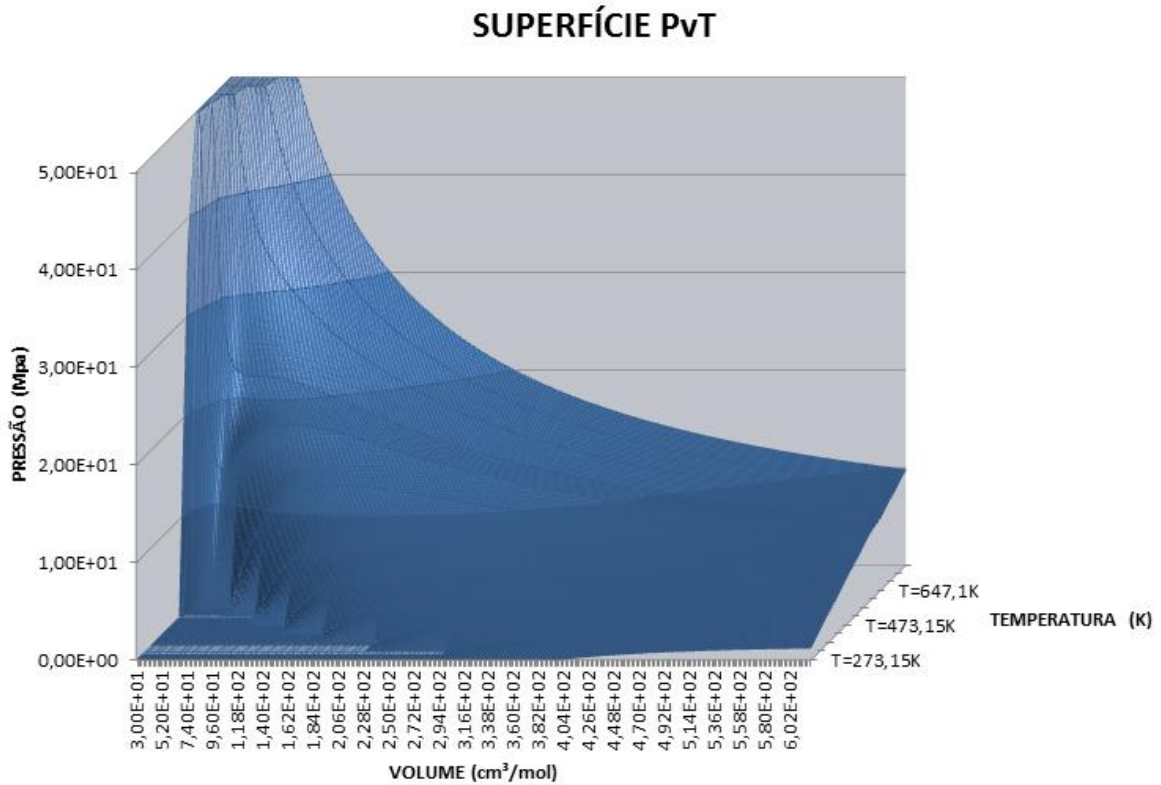
Baseado no comportamento volumétrico das isotermas traçadas a partir da EDE de Peng Robinson buscou-se simular a superfície  $PvT$  da água pura dadas as condições de equilíbrio líquido - vapor respeitando as limitações apresentadas pelo modelo matemático. Para tal, utilizou-se o *Excel* para manipulação dos dados. Devido à complexidade da construção da superfície tridimensional que seja fiel ao modelo representado na Figura 5, neste trabalho, apenas foram analisadas as fases líquida e vapor das substâncias puras (bem como a região de saturação), não interessando o estado sólido e as regiões de equilíbrio sólido-líquido e sólido-vapor. A superfície obtida é representada na Figura 17 com as devidas configurações dos eixos para melhor visualização.

TARDOLI (2013) afirma que a maioria das equações geralmente representa bem os trechos da superfície  $PvT$  para substâncias de fórmula molecular semelhante. Assim sendo, por meio da superfície representada com base nos dados apontados nesse estudo abrange bem as regiões de líquido e vapor.

Assim, diante do proposto, o *Microsoft Excel* se mostrou como uma ferramenta que se adequa ao estudo permitindo boa análise de gráficos bidimensionais além de produzir boa representação da superfície  $PvT$  do equilíbrio líquido – vapor a partir do comportamento volumétrico das isotermas características. Pliego Jr. (2016) em uma avaliação do uso do Excel no ensino da físico – química para construção da curva de equilíbrio líquido-vapor a partir de uma equação cúbica demonstrou que o uso da ferramenta influenciou positivamente compreensão dos tópicos abordados além de apresentar boa representatividade dos dados. Os

documentos presentes no Apêndice A e Anexo 1 apresentam as tabelas de saturação da água conforme os cálculos com uso dos suplementos e a literatura utilizada, respectivamente.

**Figura 17.** Simulação da superfície PvT a partir do equilíbrio líquido - vapor.



Fonte: Autor 2020.

O trabalho foi desenvolvido de modo a se tornar uma ferramenta didática fácil, prática e acessível. Os suplementos utilizados facilitaram os cálculos da região de equilíbrio líquido-vapor priorizando o aspecto didático e, dessa forma, o usuário deve conhecer os princípios termodinâmicos o qual se objetiva o estudo e construção de análises potencializando a assimilação dos conceitos fundamentais da termodinâmica. Evangelista *et al.* (2016) aponta que apesar do *Excel* ser uma ferramenta acessível, na maioria dos cursos de graduação de Engenharia, os estudantes não aprendem a utilizá-la de forma eficiente, o que, de certa forma, pode prejudicar o entendimento dos conceitos relacionados às diversas disciplinas. Assim, a metodologia proposta nesse trabalho espera suprir essa problemática entre outras apontadas na literatura contribuindo para o sucesso do processo de ensino – aprendizagem.

### 5.3 Proposta metodológica em complementação ao ensino da termodinâmica

A proposta metodológica para aplicação das ferramentas dispostas nesse trabalho concentra-se na aprendizagem baseada em projetos como forma de incentivar a compreensão dos assuntos abordados e conseqüentemente reduzir o índice de reprovações na disciplina. A metodologia parte do princípio de estruturar a turma em pequenos grupos de alunos para discutirem a respeito de problemáticas direcionadas para situações reais dentro da indústria de alimentos deixando de lado a repetição e memorização dos conceitos.

A aplicação da proposta requer conhecimento básico das ferramentas do Excel. Assim, como forma de introduzir a proposta, é indicado que seja realizado um curso com finalidade de capacitar e melhorar o desempenho dos alunos. O curso seria dividido em dois módulos: 1) Abrangendo as ferramentas básicas do MS – Excel; 2) Manipulação dos suplementos: XSEOS e OCTOPUS. A literatura indicada para construção do curso é o livro “Excel para engenheiros” desenvolvido por Evangelista e Carmo (2015) que trata do uso do MS-Excel como ferramenta auxiliar na resolução de problemas na engenharia com aplicações voltadas para termodinâmica e sob autoria de Evangelista (2016), o livro “Termodinâmica: o uso da ferramenta XSEOS na resolução de problemas de equilíbrio de fases”.

No decorrer das aulas referentes à disciplina de termodinâmica I será trabalhado o comportamento  $PvT$  de substâncias puras e suas particularidades. Para isso, cada grupo de alunos receberá uma situação problema utilizando uma substância pura e o estudo das variáveis de processo deverá ser feito com uso das ferramentas abordadas no curso introdutório. Analogamente, na disciplina de termodinâmica II serão exploradas as equações de estado, comportamento volumétrico das isotermas, propriedades termodinâmicas de transição de fases assim como o equilíbrio de fases. O quadro 4 apresenta a proposta metodológica considerando o modelo 3C3R proposto por Hung (2006).

Nesse modelo de aprendizagem ativa os estudantes são incentivados a agir e refletir sobre suas ações e pensamentos, tendo uma parcela importante de responsabilidade sobre a própria aprendizagem. O papel do professor nesse contexto é de conduzir as discussões, além de ser o responsável pelo planejamento das atividades. Nota-se, portanto, mudança significativa nas funções desempenhadas por professores e estudantes no processo de ensino e aprendizagem em relação às abordagens mais tradicionais, nas quais o ensino é considerado como um processo de transferência de conhecimento do professor para o estudante. Em um ambiente de

aprendizagem ativa os estudantes são engajados em processo colaborativo contínuo de construção e reformulação de sua compreensão como uma consequência de suas experiências e interações autênticas com o mundo, incluindo o acesso às informações científicas (GRABINGER e DUNLAP, 1995; apud SOUZA, 2019).

**Quadro 4.** Módulo PBL para complementação do ensino da termodinâmica.

Situação problema	Disciplina	Conceitos abordados	Ferramentas utilizadas
Equilíbrio de fases aplicado à indústria de alimentos	Termodinâmica I	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Comportamento <math>PvT</math> de substâncias puras;</li> <li>- Construção dos diagramas PV, PT, TV.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ MS – Excel</li> <li>✓ XSEOS</li> <li>✓ OCTOPUS</li> <li>✓ SOLVER</li> <li>✓ Protótipo da superfície <math>PvT</math></li> </ul>
	Termodinâmica II	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Propriedades volumétricas de fluidos puros;</li> <li>- Equações de Estado;</li> <li>- Propriedades termodinâmicas de transições de fase.</li> </ul>	

Fonte: Autor (2020).

Um dos principais obstáculos no projeto de processamento eficiente de alimentos é a dificuldade em prever com precisão o comportamento da fase e propriedades relacionadas. O estudo do equilíbrio de fases aplicado a indústria de alimentos é essencial para o entendimento dos processos de fabricação de diferentes tipos de matérias-primas, em diferentes estados de agregação (PEREIRA, 2019).

Dessa forma, para Engenharia de Alimentos, o desenvolvimento de metodologias de ensino voltadas para aplicação dos conceitos são de suma importância para a formação de profissionais preparados para o mercado de trabalho. Nesse cenário, a vantagem mais relevante do método PBL é a capacidade de tornar a aprendizagem mais dinâmica instigando o apreço pelo estudo e, por consequência, a disposição para a aprendizagem autônoma por toda a vida. Além disso, o PBL parece conferir aos discentes mais motivação para o trabalho ao qual estão

sendo preparados durante a formação (LOPES, 2007; RIBEIRO, 2008; apud ARAÚJO *et al.*, 2016).

Araújo *et al.* (2016) aplicou o método PBL na Engenharia e os resultados demonstraram viabilidade na proposição de uso da metodologia de forma parcial quando aplicado para disciplinas que preveem uma carga horária prática. Vieira e Lima (2018) verificaram aumento significativo nas produções trabalhos fazendo uso da aprendizagem baseada em projetos com resultados congruentes concluindo que o PBL é de fato uma metodologia instigante para a formação das necessárias competências contemporâneas dos engenheiros uma vez que contribui para o desenvolvimento da autonomia, resolução de problemas e trabalho em grupo.

## 6 CONCLUSÕES

O estudo do diagrama de fases e o entendimento dos processos envolvidos são de suma importância para a compreensão de operações com sistemas mais complexos. O protótipo desenvolvido facilita a compreensão dos fenômenos em condições ideais e conseqüente assimilação dos conteúdos previstos na ementa do curso de Termodinâmica I e II.

O *Software Excel* da *Microsoft* se mostrou como uma ferramenta adequada ao estudo proposto, permitindo boa análise de gráficos bidimensionais, além de possuir recurso para visualização de superfícies tridimensionais. Os suplementos de *Excel* utilizados facilitaram os cálculos da região de equilíbrio líquido-vapor priorizando o aspecto didático.

A equação de Peng-Robinson foi a que melhor se ajustou ao modelo proposto. A análise de uma superfície  $PvT$  é útil para mostrar as relações gerais entre as variáveis de estado a partir do estudo do estado de saturação e ponto crítico da substância.

Com base no cenário pandêmico e necessidades do mercado de trabalho referente à indústria de alimentos a nova metodologia de ensino proposta a partir do método PBL deve ser aplicada futuramente como forma de contribuir não somente com a diminuição do índice de reprovações nas disciplinas abordadas como também para a diminuição da desmotivação, da má performance e da evasão entre os estudantes do curso de Engenharia de Alimentos.

Como encaminhamentos para trabalhos futuros deve-se: 1) identificar as problemáticas na área abrangida pela proposta; 2) definir métodos comparativos quanto à evolução do desempenho dos alunos; 3) preparar cursos para professores e instrutores de modo a estender a metodologia para outras áreas; e 4) realizar avaliações qualitativas e quantitativas.

## 7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALENCAR REIS, A. R.; REGO, E. F.; MELO, R. A. C.; SOUZA, C. P. **Estudo experimental dos equilíbrios entre fases com aplicação computacional para o ensino de termodinâmica para engenharia.** In: FIGUEREDO, J. DE L.; QUEIROZ, R. F. (Eds.). Caderno de monitoria 4: relatos de experiência / projetos premiados 2015. Natal - RN: 2017. p. 142–152.

ANGELO, E.; MOREIRA, J.R.S. **Utilização de uma superfície termodinâmica pressão–volume específico–temperatura no ensino da termodinâmica.** In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENSINO DE ENGENHARIA, XXIX, 2001, Porto Alegre – RS.

ARAÚJO, A. A. D. **Desenvolvimento de planilhas *Excel* para estimativas dos coeficientes de atividade e cálculos do equilíbrio líquido- vapor de misturas binárias em baixas pressões.** João Pessoa – PB, 2019.

ARAÚJO, W. J. et al. **Aprendizagem por problemas no ensino de engenharia.** Rev. Docência Ens. Sup., v. 6, n. 1, p. 57–90, 2016.

BAIN, K. et al. **A review of research on the teaching and learning of thermodynamics at the university level.** Chem. Educ. Res. Pract., v. 15, n. 3, p. 320–335, 2014.

BARBOSA NETO, A. M. **Desenvolvimento de um simulador PVT composicional para fluidos de petróleo.** 2015.

BARROS, B. A. **Aprendizagem baseada em problemas: um roteiro para o ensino de termodinâmica na educação básica.** Sorocaba - SP, 2020.

ÇENGEL, Y. A.; BOLES, M. A. **Thermodynamics: an engineering approach.** 8<sup>a</sup> ed. [s.l.] McGraw-Hill Education, 2015.

CÉSAR DE SOUZA, J. **Aprendizagem ativa em aulas de física: o uso do Arduino em experimentos de Termodinâmica.** Dissertação. Universidade Federal de Minas Gerais - Faculdade de Mestrado Profissional, Educação e Docência. Belo Horizonte – MG, 2019.

DAL BERTO, C. A. M.; STEFFEN, V. **Desenvolvimento de software para cálculo de equilíbrio líquido-vapor.** 2020 Disponível em: <<http://seisicite2020.td.utfpr.edu.br/node/5272>>. Acesso em: 14 dez. 2020.



DE MAERE D'AERTRYCKE, J.-B. et al. **Exploring the solid-state phases and thermodynamics of calcium l-lactate.** Food Chemistry, v. 325, set. 2020.

EVANGELISTA, N. S. **Avaliação de modelos preditivos para a estimativa de propriedades físicas de ésteres de ácidos graxos.** Fortaleza- CE, 2018.

EVANGELISTA, N. S.; CARMO, F. R. DO; SANT'ANA, H. . DE; **OCTOPUS: uma nova ferramenta computacional para estimativa de propriedades físicas e químicas de compostos orgânicos moleculares.** Anais do Congresso Brasileiro de Engenharia Química, p. 8, 2016.

EVANGELISTA, Nathan Sombra. **Termodinâmica: o uso da ferramenta XSEOS na resolução de problemas de equilíbrio de fases.** Ceará, 2016. 48 p.

FERNANDES, F. A. N.; PIZZO, S. M.; MORAES JR, D. **Termodinâmica Química.** 1ª edição ed. [s.l.] Engenharia Química UFC, 2006.

FERNANDES, F. M. S. S. **Potencial Químico, Fugacidade e Atividade.** Revista de Ciência Elementar, v. 5, n. 4, p. 1–7, 30 dez. 2017.

GARZÓN, C. M.; TSCHIPTSCHIN, A. P. **Modelamento termodinâmico e cinético por meio do Método *Calphad* do processamento térmico e termoquímico de aços.** Revista Matéria, v. 11, p. 70–87, mar. 2006.

GREGIO, Nivaldo de Oliveira. **Termodinâmica, um tutorial para entendimento do conceito de entropia.** 2016. 95 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Ensino de Ciências Exatas, UFSCar, São Carlos – SP.

GRILO, M. M. DE S. **Análises termodinâmica, ambiental e econômica de uma bomba de calor para secagem de alimentos.** [s.l.] Universidade Federal da Paraíba, 23 fev. 2017. Disponível em: <<https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/123456789/12762>>. Acesso em: 14 dez. 2020.

GUEDES DE ALMEIDA, E. et al. **Ensino remoto e tecnologia: uma nova postura docente na educação pós-pandemia.** Maceió - Alagoas: 2020.

HAYON, E. H. **Biblioteca de softwares para Engenharia Química.** Disponível em: <[https://www.crq4.org.br/informativomat\\_1264](https://www.crq4.org.br/informativomat_1264)>. Acesso em: 14 dez. 2020.

HOWELL, J. R. .; BUCKIUS, R. O. **Princípios de Termodinâmica para Engenharia**. México: McGraw-Hill, 1990.

ISSA, H. M. **A new correlation for vapor pressure prediction of natural gas mixture**. *Petroleum Science and Technology*, v. 34, n. 23, p. 1913–1919, 8 dez. 2016.

JAUBERT, J.-N. et al. **Benchmark Database Containing Binary-System-High-Quality-Certified Data for Cross-Comparing Thermodynamic Models and Assessing Their Accuracy**. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 59, n. 33, p. 14981–15027, 19 ago. 2020.

KJELSTRUP, S.; MAGNANELLI, E. Efficiency in the process industry: Three thermodynamic tools for better resource use. **Trends in Food Science & Technology**, v. 104, p. 84–90, out. 2020.

LANDER, L. L.; DA SILVA JR, J. L.; SANTOS, R. B. **Utilização de um software gratuito para modelagem e simulação de processos químicos**. 2016.

LEAL, Denise dos Santos. **Avaliação de equações de estado no cálculo de propriedades do dióxido de carbono úteis ao estudo do seu escoamento**. 280 f, Cap 2 . Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Industrial, UFBA – Salvador, 2012.

LIU, M. et al. **Highly efficient and cost-effective removal of patulin from apple juice by surface engineering of diatomite with sulfur-functionalized graphene oxide**. *Food Chemistry*, v. 300, p. 125111, dez. 2019.

MATSOUKAS, T. **Fundamentos de termodinâmica para engenharia química: com aplicações aos processos químicos**. 1º edição ed. [s.l.] LTC, 2016.

MAZARO, S. B.; DARROZ, L. M. **O ensino de termodinâmica a partir de pesquisas em ferramentas da internet**. *Revista CIATEC - UPF*, p. 74–83, 2017.

MENEZES, C. C. L. .; SOUZA, D. L. DE; **Tecnologia e Inovação (RBCTI)**, v. 2, n.1, jan./jun **Revista Brasileira de Ciência, Tecnologia e Inovação**. 2017. Disponível em: <<http://seer.ufm.edu.br/revistaeletronica/index.php/rbcti/article/view/1992>>. Acesso em: 14 dez. 2020.

MINTAH, B. K. et al. **Sonochemical action and reaction of edible insect protein: Influence on enzymolysis reaction-kinetics, free-Gibbs, structure, and antioxidant capacity.** Journal of Food Biochemistry, v. 43, n. 9, 18 set. 2019.

MONARO, R. L. G. et al. **Metodologias ativas no ensino de engenharia de produção: relato da aplicação dos métodos PBL e TBL em uma IES privada do Espírito Santo.** Maceió – Alagoas. ENEGEP, 2018.

MONTEIRO, S. B. S. et al. **Metodologias e práticas de ensino aplicadas ao curso de engenharia de produção: análise da percepção de alunos de projetos de sistemas de produção da universidade de Brasília.** Belém – PA. COBENGE, 2012.

MORETTI DE ALMEIDA, G. et al. **Kinetic and thermodynamic parameters of nisin thermoinactivation.** Journal of Food Engineering, v. 280, p. 109986, set. 2020.

MULOP, N.; YUSOF, K. M.; TASIR, Z. **A Review on Enhancing the Teaching and Learning of Thermodynamics.** Procedia - Social and Behavioral Sciences, v. 56, p. 703–712, out. 2012.

NHANTUMBO, T. L. **Capacidade de resposta das instituições educacionais no processo de ensino-aprendizagem face à pandemia de Covid-19: impasses e desafios.** Revista EDUCAmazônia - Educação, Sociedade e Meio Ambiente, Humaitá, 2020. Disponível em: <<https://periodicos.ufam.edu.br/index.php/educamazonia/article/view/7851/5535>>. Acesso em: 15 dez. 2020

OLIVEIRA, L. G. DE; **Desenvolvimento de aplicativo para estimativa de propriedades volumétricas, residuais e termodinâmicas e propriedades volumétricas, residuais e termodinâmicas e avaliação de equações cúbicas de estado.** João Pessoa – PB. Dissertação, 2017.

PARENTI, G.; D.; JOÃO. **Relatório Anual 2019.** Associação Brasileira da Indústria de Alimentos - ABIA, 2019. Disponível em: <<https://www.abia.org.br/vsn/temp/z202055RelatorioAnual2019.pdf>>. Acesso em: 13 dez. 2020

PARISOTO, M. FERNANDA; **ensino de termodinâmica a partir de situações da engenharia: integrando as metodologias de projetos e as unidades de ensino potencialmente significativas.** Porto Alegre, 2015.

PEREIRA, C. G. **Thermodynamics of phase equilibria in food engineering.** 1ª edição ed. 2019 [s.l.].

PEREIRA, V. M. et al. **Simulador gratuito CHEMSEP como ferramenta para o ensino de sistemas de separação na área de engenharia química.** Anais da Jornada Científica e Tecnológica e Simpósio de Pós-graduação do IFSULDEMINAS. Anais 2016.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W.; MALONEY, J. O. **Chemical Engineer's handbook.** 5ª edição ed. [s.l.] McGraw-Hill, 1984.

PLASSE, R. et al. **Autonomia na aprendizagem de termodinâmica,** 2017.

PLIEGO, J. R. **Construção da curva de equilíbrio líquido-vapor usando uma equação de estado cúbica: uso do EXCEL no ensino de físico-química.** Química Nova, v. 39, n. 5, p. 641–645, 1 jun. 2016.

POWELL-PALM, M. J.; RUBINSKY, B. **A shift from the isobaric to the isochoric thermodynamic state can reduce energy consumption and augment temperature stability in frozen food storage.** Journal of Food Engineering, v. 251, p. 1–10, jun. 2019.

PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; DE AZEVEDO, E. G. **Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria.** In: Fluid Phase Equilibria. New Jersey: Prentice Hall PTR, 1999. p. 1–54.

QUARANTA, I. C. C. **Projeto e simulação de uma indústria de pequeno porte para fabricação de cachaça por coluna de destilação.** Fortaleza- CE, 2017. Disponível em: <<https://www.researchgate.net/publication/333380970>>. Acesso em: 14 dez. 2020

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, T. K. **The properties of gases and liquids, their estimation and correlation.** 3ª edição ed. United States of America: McGraw-Hill, 1977.

ROCHA, A. L. DO N. **Modelagem e simulação de uma coluna de destilação multicomponente operando em regime estacionário.** Universidade Federal do Rio Grande

do Norte, Departamento de Engenharia Química: Natal – RN. 20 ago. 2019. Disponível em: <<http://monografias.ufrn.br/handle/123456789/9402>>. Acesso em: 14 dez. 2020.

ROTSTEIN, E.; SINGH, R. P.; VALENTAS, K. (EDS.). **Handbook of food engineering practice**. [s.l.: s.n.]. v. 62

ROWLAND, D.; HUGHES, T. J.; MAY, E. F. Effective Critical Constants for Helium for Use in Equations of State for Natural Gas Mixtures. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 62, n. 9, p. 2799–2811, 14 set. 2017.

SÁ, E. R. A. .; NASCIMENTO, L. A.; LIMA, F. C. A. **Thermodynamics: A Teaching Proposal from Computational Chemistry**. Revista Virtual de Química, v. 12, n. 3, p. 795–808, 2020.

SANDLER, S. I. **Chemical and engineering thermodynamics**. 3ª edição ed. New York: John Wiley & Sons Inc., 1999.

SANTOS, E. J. N. DOS. **Determinação da pressão de vapor de espécies químicas utilizadas na indústria de alimentos utilizando a plataforma Excel**. Garanhuns - PE, 2019.

SAWAKI, R. V. 1992-. **Desenvolvimento de uma ferramenta educacional direcionada a simulação de reatores químicos**. [s.l.] [s.n.], 2019. Disponível em: <<http://lattes.cnpq.br/2075649178288407>>. Acesso em: 14 dez. 2020.

SHI, J.; LI, H. A.; PANG, W. **An improved volume translation strategy for PR EOS without crossover issue Fluid Phase Equilibria**, v. 470, p. 164–175, ago. 2018. SILVA, M. B. F.;

SILVA, P. N. et al. **A transposição didática do conteúdo termodinâmica química**. Revista Insignare Scientia, v. 2, n. 4, p. 198–217, 2019.

SILVA, M. B. F.; EVANGELISTA, N. S. **SINDRI: uma nova ferramenta computacional para cálculos de propriedades termodinâmicas e de equilíbrio líquido-vapor a partir de equações de estado cúbicas**. 2019

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à termodinâmica da engenharia química**. 7. ed. Rio de Janeiro: Ltc, 2007. 626 p.

**STAUDT, P. B. Nova equação cúbica de estado para a predição do equilíbrio líquido vapor de misturas complexas envolvendo polímeros e óleos.** Porto Alegre, 2010.

**SUN, H.; LI, H. Phase-Behavior Modeling of Hydrocarbon Fluids in Nanopores Using PR-EOS Coupled with a Modified Young–Laplace Equation.** *ACS Omega*, v. 5, n. 25, p. 15177–15191, 30 jun. 2020.

**TARDIOLI, P. W. Termodinâmica para engenharia: um curso introdutório.** São Carlos – SP. Departamento de Produção Gráfica – UFSCAR, 2013.

**TRINDADE, J. et al. Ambientes gráficos tridimensionais como ferramentas físico-químicas no ensino e na aprendizagem das ciências.** In: Proceedings of the VIII Encontro Nacional de Educação em Ciência. Ponta Delgada: Universidade dos Açores, 2001. p. 391–403.

**UGURSAL, V. I.; CRUICKSHANK, C. A. Student opinions and perceptions of undergraduate thermodynamics courses in engineering.** *European Journal of Engineering Education*, v. 40, n. 6, p. 593–610, 2 nov. 2015.

**VALENTAS, K. J.; ROTSTEIN, E.; SINGH, R. P. Handbook of Food Engineering Practice.** New York: CRC Press, LLC, 1997.

**VIEIRA, K.; LIMA, V. A. A. DE. The use of PBL in engineering courses in Brazil – A bibliometric analysis.** *Revista de Ensino de Engenharia*, v. 37, n. 3, 2018.

**WYLEN, G.V., SONNTAG, R. & BORGNAKKE, C., 2013. Fundamentos da termodinâmica.** São Paulo: Editora Edgard Blücher, 8ª Edição.

**APÊNDICE A – TABELA DE SATURAÇÃO DA ÁGUA PURA  
(LITERATURA)**

T (°C)	T (K)	P (Kpa)	P (Mpa)	Vl (m <sup>3</sup> /kg)	Vl (cm <sup>3</sup> /mol)	Vv (m <sup>3</sup> /kg)	Vv (cm <sup>3</sup> /mol)
0,01	273,16	0,6113	0,0006113	0,001000	18,015	206,132	3713467,98
5	278,15	0,8721	0,0008721	0,001000	18,015	147,118	2650330,77
10	283,15	1,2276	0,0012276	0,001000	18,015	106,377	1916381,655
15	288,15	1,705	0,001705	0,001001	18,033015	77,925	1403818,875
20	293,15	2,339	0,002339	0,001002	18,05103	57,7897	1041081,446
25	298,15	3,169	0,003169	0,001003	18,069045	43,3593	781117,7895
30	303,15	4,246	0,004246	0,001004	18,08706	32,8922	592552,983
35	308,15	5,628	0,005628	0,001006	18,12309	25,2158	454262,637
40	313,15	7,384	0,007384	0,001008	18,15912	19,5229	351705,0435
45	318,15	9,593	0,009593	0,001010	18,19515	15,2581	274874,6715
50	323,15	12,350	0,01235	0,001012	18,23118	12,0318	216752,877
55	328,15	15,758	0,015758	0,001015	18,285225	9,56835	172373,8253
60	333,15	19,941	0,019941	0,001017	18,321255	7,67071	138187,8407
65	338,15	25,03	0,02503	0,001020	18,3753	6,19656	111631,0284
70	343,15	31,19	0,03119	0,001023	18,429345	5,04217	90834,69255
75	348,15	38,58	0,03858	0,001026	18,48339	4,13123	74424,10845
80	353,15	47,39	0,04739	0,001029	18,537435	3,40715	61379,80725
85	358,15	57,83	0,05783	0,001032	18,59148	2,82757	50938,67355
90	363,15	70,14	0,07014	0,001036	18,66354	2,36056	42525,4884
95	368,15	84,55	0,08455	0,001040	18,7356	1,98186	35703,2079
100	373,15	101,3	0,1013	0,001044	18,80766	1,67290	30137,2935
105	378,15	120,8	0,1208	0,001047	18,861705	1,41936	25569,7704
110	383,15	143,3	0,1433	0,001052	18,95178	1,21014	21800,6721
115	388,15	169,1	0,1691	0,001056	19,02384	1,03658	18673,9887
120	393,15	198,5	0,1985	0,001060	19,0959	0,89186	16066,8579
125	398,15	232,1	0,2321	0,001065	19,185975	0,77059	13882,17885
130	403,15	270,1	0,2701	0,001070	19,27605	0,66850	12043,0275
135	408,15	313,0	0,313	0,001075	19,366125	0,58217	10487,79255
140	413,15	361,3	0,3613	0,001080	19,4562	0,50885	9166,93275
145	418,15	415,4	0,4154	0,001085	19,546275	0,44632	8040,4548
150	423,15	475,9	0,4759	0,001090	19,63635	0,39278	7075,9317
155	428,15	543,1	0,5431	0,001096	19,74444	0,34676	6246,8814
160	433,15	617,8	0,6178	0,001102	19,85253	0,30706	5531,6859
165	438,15	700,5	0,7005	0,001108	19,96062	0,27269	4912,51035
170	443,15	791,7	0,7917	0,001114	20,06871	0,24283	4374,58245
175	448,15	892,0	0,892	0,001121	20,194815	0,21680	3905,652
185	458,15	1122,7	1,1227	0,001134	20,42901	0,17409	3136,23135
190	463,15	1254,4	1,2544	0,001141	20,555115	0,15654	2820,0681
195	468,15	1397,8	1,3978	0,001149	20,699235	0,14105	2541,01575

200	473,15	1553,8	1,5538	0,001156	20,82534	0,12736	2294,3904
205	478,15	1723,0	1,723	0,001164	20,96946	0,11521	2075,50815
210	483,15	1906,3	1,9063	0,001173	21,131595	0,10441	1880,94615
215	488,15	2104,2	2,1042	0,001181	21,275715	0,09479	1707,64185
220	493,15	2317,8	2,3178	0,001190	21,43785	0,08619	1552,71285
225	498,15	2547,7	2,5477	0,001199	21,599985	0,07849	1413,99735
230	503,15	2794,9	2,7949	0,001209	21,780135	0,07158	1289,5137
235	508,15	3060,1	3,0601	0,001219	21,960285	0,06536	1177,4604
240	513,15	3344,2	3,3442	0,001229	22,140435	0,05976	1076,5764
245	518,15	3648,2	3,6482	0,001240	22,3386	0,05470	985,4205
250	523,15	3973,0	3,973	0,001251	22,536765	0,05013	903,09195
255	528,15	4319,5	4,3195	0,001263	22,752945	0,04598	828,3297
260	533,15	4688,6	4,6886	0,001276	22,98714	0,04220	760,233
265	538,15	5081,3	5,0813	0,001289	23,221335	0,03877	698,44155
270	543,15	5498,7	5,4987	0,001302	23,45553	0,03564	642,0546
275	548,15	5941,8	5,9418	0,001317	23,725755	0,03279	590,71185
280	553,15	6411,7	6,4117	0,001332	23,99598	0,03017	543,51255
285	558,15	6909,4	6,9094	0,001348	24,28422	0,02777	500,27655
290	563,15	7436,0	7,436	0,001366	24,60849	0,02557	460,64355
295	568,15	7992,8	7,9928	0,001384	24,93276	0,02354	424,0731
300	573,15	8581,0	8,581	0,001404	25,29306	0,02167	390,38505
305	578,15	9201,8	9,2018	0,001425	25,671375	0,01995	359,39925
310	583,15	9856,6	9,8566	0,001447	26,067705	0,01835	330,57525
315	588,15	10547	10,547	0,001472	26,51808	0,01687	303,91305
320	593,15	11274	11,274	0,001499	27,004485	0,01549	279,05235
325	598,15	12040	12,04	0,001528	27,52692	0,01420	255,813
330	603,15	12845	12,845	0,001561	28,121415	0,01300	234,195
335	608,15	13694	13,694	0,001597	28,769955	0,01186	213,6579
340	613,15	14586	14,586	0,001638	29,50857	0,01080	194,562
345	618,15	15525	15,525	0,001685	30,355275	0,00978	176,1867
350	623,15	16514	16,514	0,001740	31,3461	0,00881	158,71215
355	628,15	17554	17,554	0,001807	32,553105	0,00787	141,77805
360	633,15	18651	18,651	0,001892	34,08438	0,00694	125,0241
365	638,15	19807	19,807	0,002011	36,228165	0,00599	107,90985
370	643,15	21028	21,028	0,002213	39,867195	0,00493	88,81395
374	647,10	22064	22,064	0,003106	55,95459	0,003106	55,95459

Legenda: T = Temperatura; P = Pressão; VI = Volume de líquido saturado; Vv = Volume de vapor saturado

Fonte: Adaptada de Tabela - Propriedades Termodinâmicas - Apêndice B (Van Wylen)



## ANEXO 1 – TABELA DE SATURAÇÃO DA ÁGUA PURA (CALCULADA)

RELAÇÃO PV		
P (Mpa)	Vl (cm <sup>3</sup> /mol)	Vv (cm <sup>3</sup> /mol)
0,0005	20,90898	4717796,685
0,0014	21,10001	1714666,488
0,0036	21,30535	700435,6133
0,0084	21,52648	315975,1809
0,0178	21,76515	155149,6797
0,0352	22,02337	81928,39749
0,0651	22,30352	46059,24819
0,1139	22,60838	27331,97486
0,1894	22,94127	16994,71895
0,3018	23,30616	11002,91423
0,4627	23,70784	7377,034205
0,6859	24,15216	5097,745422
0,9870	24,64634	3615,703316
1,3831	25,19941	2622,633248
1,8934	25,82285	1939,086946
2,5382	26,53149	1457,117256
3,3397	27,34495	1109,799525
4,3215	28,28980	854,5321027
5,5087	29,40323	663,4905855
6,9280	30,73929	518,0784406
8,6080	32,38065	405,5811849
10,5789	34,46264	317,0985371
12,8731	37,22955	246,2013433
15,5252	41,19582	187,9370743
22,0550	78,39564	78,39563586

Legenda: T = Temperatura; P = Pressão; Vl = Volume de líquido saturado; Vv = Volume de vapor saturado

Fonte: Autor (2020)