

152

**SIMULADOR DE EQUILÍBRIO DE FASES – SOFTWARE EDUCACIONAL.** *Anelise Braun, Cristina W. Hartke e Leonel T. Pinto* (Laboratório de Simulação de Processos, Dep. de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos, Centro Tecnológico, UFSC).

Este trabalho se situa no contexto do projeto de desenvolvimento de softwares educacionais em processos químicos, cujo objetivo geral é a elaboração de pacotes computacionais para servir de suporte ao ensino e à pesquisa nos cursos de graduação em engenharia química e engenharia de alimentos da UFSC. Neste caso específico trata-se do projeto e desenvolvimento de aplicativo voltado para a previsão de propriedades de equilíbrio líquido-vapor binário. O EquiFase (Simulador de Equilíbrio de Fases), versão 2,0, é desenvolvido em ambiente Delphi e possui uma interface amigável. Entre suas opções situam-se: Constante de Equilíbrio, Coeficiente de Atividade, Coeficiente de Fugacidade, Segundo Coeficiente do Virial e Equilíbrio Líquido-Vapor. Os modelos termodinâmicos usados são: para a fase vapor a equação do Virial, com o seu segundo coeficiente previsto pelo método de Hayden-OConnell, e para a fase líquida os modelos UNIQUAC e UNIFAC. O aplicativo contém um banco de dados com vários compostos, que permite a modificação de dados e a inclusão de novos compostos. Os resultados obtidos podem ser visualizados nas formas de tabelas e gráficos, além de poderem ser preservados em arquivos eletrônicos. A principal fonte dos modelos termodinâmicos foi o livro: Fredenslund, Gmehling e Rasmussen, vapor-liquid equilibria using UNIFAC, a group-contribution method, Elsevier, 1977 (FEESC).