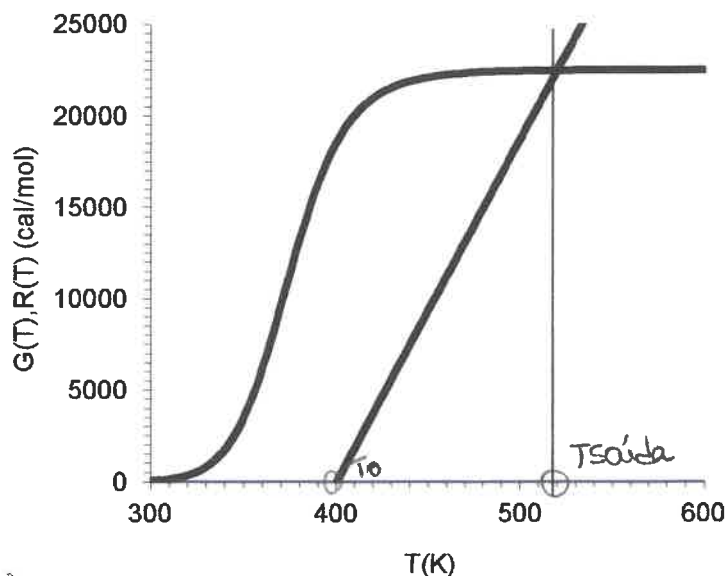


2) A reacção de 1ª ordem, em fase líquida,  $A \rightarrow B$ , é conduzida num reactor CSTR adiabático, de 1 m³ de volume, a funcionar em estado estacionário. A alimentação ao reactor, a um caudal volumétrico de 10 dm³/min, é constituída por A e por um inerte I (o solvente). A figura mostra as curvas de geração e de remoção de calor. Diga, justificando a resposta e apresentando os cálculos necessários:

- O valor da temperatura da corrente de saída.
- O valor da temperatura da corrente de alimentação.
- O valor da temperatura de ignição.
- O valor da temperatura de extinção.

e) A concentração da alimentação ( $C_{A0}$ )

f) O valor da temperatura de alimentação para que seja possível um estado estacionário estável correspondente a uma conversão de 95.6%



Dados:

Peso molecular de A:  $PM_A = 44$ ; peso molecular do inerte:  $PM_I = 18$ ; densidade da alimentação:  $d = 1$ ;  $\Delta H_R = -22.5$  kcal/mol;  $C_{pA} = C_{pB} = 8$  cal/mol K;  $C_{pI} = 18$  cal/mol K;  $R = 1,987$  cal mol⁻¹ K⁻¹.

Resolução

### Prob 2a

Balanco de energia

$$\dot{Q} - F_{A0} \sum_i \theta_i C_{p_i} (T - T_0) - F_{A0} \Delta H_R X = 0$$

Reactor adiabático

$$-F_{A0} \sum_i \theta_i C_{p_i} (T - T_0) - F_{A0} \Delta H_R X = 0$$

$$\sum_i \theta_i C_{p_i} (T - T_0) + \Delta H_R X = 0$$

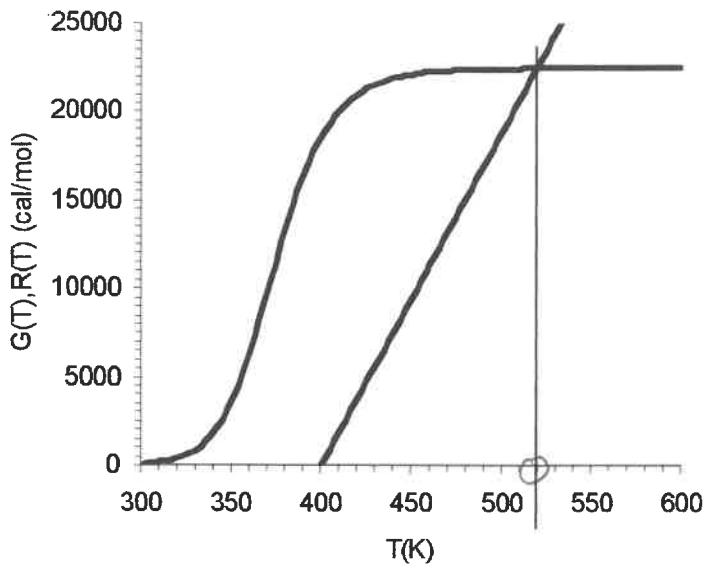
$$\sum_i \theta_i C_{p_i} (T - T_0) = -\Delta H_R X$$

$$R(T) = \sum_i \theta_i C_{p_i} (T - T_0)$$

$$G(T) = -\Delta H_R X$$

$$R(T) = (C_{pA} + \theta_I C_{pI}) (T - T_0)$$

$$G(T) = -\Delta H_R X$$



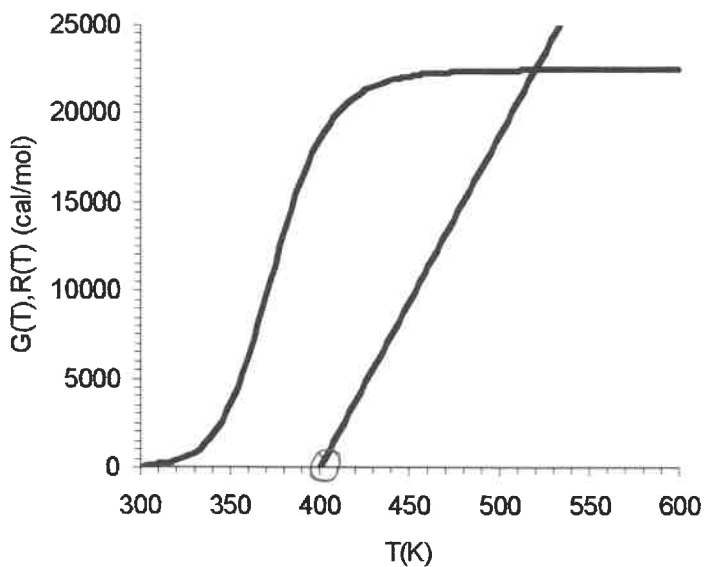
No estado estacionário  
 $T = 520 \text{ K}$

$$R(T) = G(T)$$

### Prob 2b

$$R(T) = (Cp_A + \theta_I Cp_I)(T - T_0)$$

$$G(T) = -\Delta H_R X$$



Se

$$0 = (Cp_A + \theta_I Cp_I)(T - T_0)$$

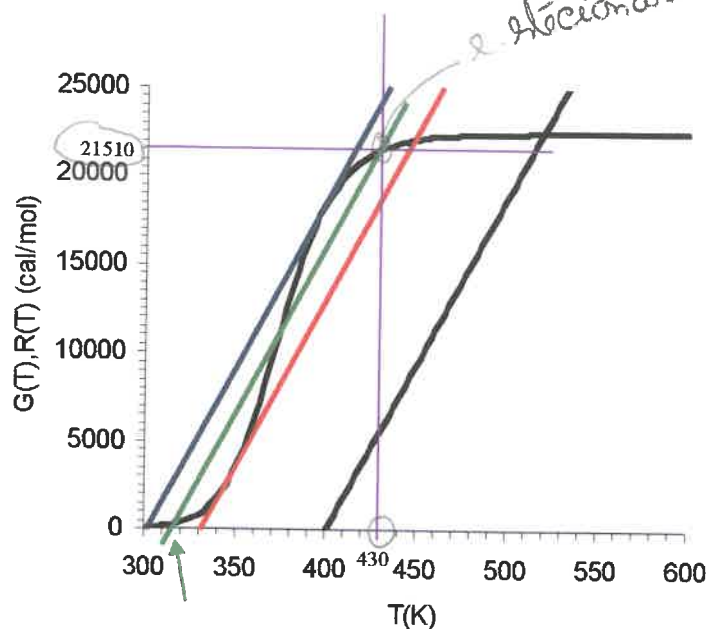
$$\Rightarrow T - T_0 = 0$$

$$\therefore T = T_0$$

Do gráfico

$$R(T) = 0 \Rightarrow T = 400 \text{ K} = T_0$$

Prob 2cdf



$$R(T) = (Cp_A + \theta_I Cp_I)(T - T_0)$$

Temperatura de ignição:

$$T_0 = 330 \text{ K}$$

A recta vermelha corresponde à ignição. O declive mantém-se porque não se altera  $\theta_I$ .

Temperatura de extinção:

$$T_0 = 300 \text{ K}$$

A recta azul corresponde à extinção. O declive mantém-se porque não se altera  $\theta_I$ .

Prob 2f

$$G(T) = -\Delta H_R^0 X$$

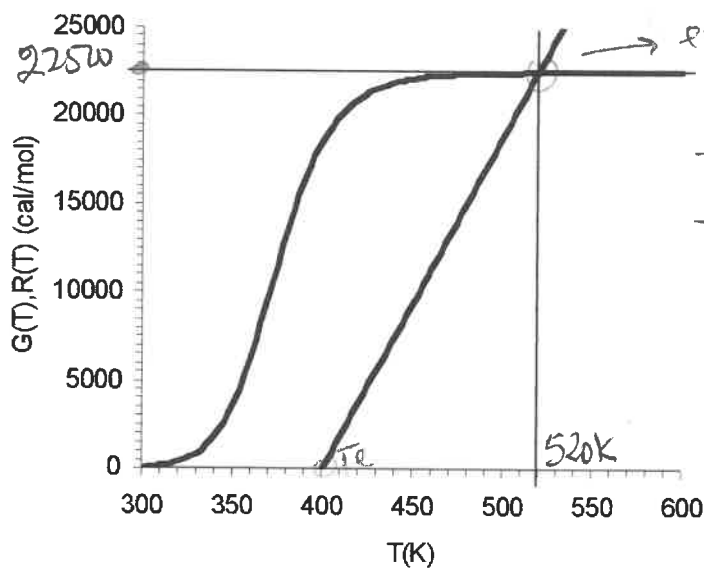
$$G(T) = 22500 \times 0,956 = 21510 \text{ cal/mol}$$

O estado estacionário é definido pelos pontos:

$$R(T) = G(T) = 21510 \text{ cal/mol}$$

$$T = 430 \text{ K}$$

Prob 2c



estado estacionário  
 $G(T) = R(T)$

$$T_0 = 400 \text{ K}$$

$$T = T_{\text{est. estacionária}} = 520 \text{ K}$$

$$R(T) = (C_{pA} + \theta I C_{pI})(T - T_0)$$

$$R(T) = (C_{pA} + \theta I C_{pI}) T - (C_{pA} + \theta I C_{pI}) T_0$$

$$22500 = (C_{pA} + \theta I C_{pI}) \underline{520} - (C_{pA} + \theta I C_{pI}) \underline{T_0}$$

$$0 = (C_{pA} + \theta I C_{pI}) 400 - (C_{pA} + \theta I C_{pI}) T_0$$

$$22500 - 0 = (C_{pA} + \theta I C_{pI}) (520 - 400)$$

$$\frac{22500 - 0}{(520 - 400)} = (C_{pA} + \theta I C_{pI}) = 187,5$$

$$(C_{pA} + \theta I C_{pI}) = 187,5$$

$$8 + 18 \theta I = 187,5$$

$$\theta I = \frac{187,5 - 8}{18} = 9,972$$

$$\begin{cases} \frac{y_{I0}}{y_{A0}} = 9,972 \\ y_{I0} + y_{A0} = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{I0} = 9,972 y_{A0} \checkmark \\ 9,972 y_{A0} + y_{A0} = 1 \checkmark \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{I0} = 9,972 y_{A0} \\ y_{A0} = \frac{1}{10,972} = 0,0911 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{I0} = 9,972 \times 0,0911 = 0,9089 \\ y_{A0} = \frac{1}{10,972} = 0,0911 \end{cases}$$

Base de cálculo: 1 L

$$m = \rho V$$

$$m = 1 \times 1000 = 1000 \text{ g}$$

$$m = 1000 = M_A n_A + M_I n_I$$

$$1000 = 44 n_A + 18 n_I$$

$$\begin{cases} y_{A0} = \frac{n_A}{n_A + n_I} = 0,0911 \\ 1000 = 44 n_A + 18 n_I \end{cases}$$

$$\begin{cases} n_A = 0,0911 n_A + 0,0911 n_I \\ 1000 = 44 n_A + 18 n_I \end{cases}$$

$$\begin{cases} n_A = 0,1002 n_I \\ 1000 = 44 n_A + 18 n_I \end{cases}$$

$$\begin{cases} n_A = 0,1002 n_I \\ 1000 = 44 \times 0,1002 n_I + 18 n_I \end{cases}$$

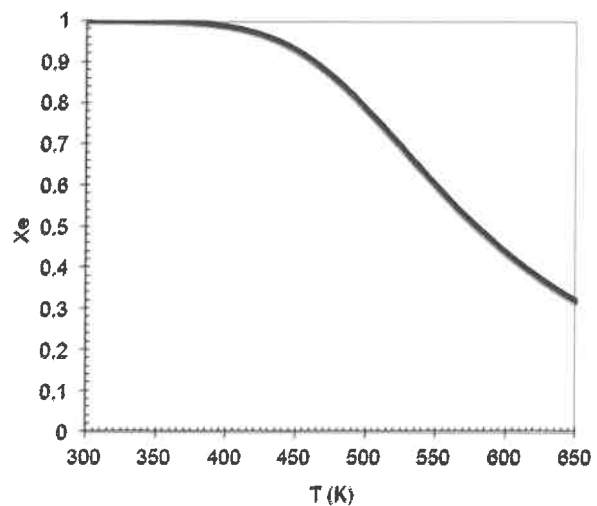
$$\begin{cases} n_A = 0,1002 n_I \\ 1000 = (44 \times 0,1002 + 18) n_I \end{cases}$$

$$\begin{cases} n_A = 0,1002 n_I = 0,1002 \times 44,6 = 4,5 \text{ mol} \\ n_I = \frac{1000}{44 \times 0,1002 + 18} = 44,6 \text{ mol} \end{cases}$$

$$C_{A0} = 4,5 \text{ M}$$

- 1) A reacção elementar em fase gasosa  $A \rightleftharpoons B$  é conduzida num reactor PFR adiabático. A alimentação é constituída por 15% de A e um inerte (I), entrando à temperatura de 373 K e à pressão de 1 atm, a um caudal volumétrico de 100 dm<sup>3</sup>/min. A figura mostra a variação da conversão de equilíbrio com a temperatura.

*The gas phase elemental reaction  $A \rightleftharpoons B$  is carried out in an adiabatic PFR. A (15%) and an inert I are fed to the reactor at a volumetric flow rate of 100 dm<sup>3</sup>/min. The variation of equilibrium conversion with temperature is plotted in the figure.*



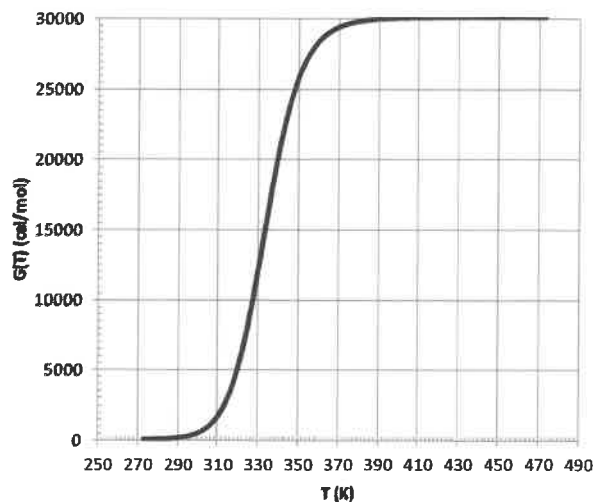
- Escreva a equação da curva representada na figura, substituindo todos os símbolos das constantes pelos respectivos valores numéricos. *Write the equation of the plotted curve, replacing all the constant symbols by the corresponding numerical values.*
- Escreva a equação de balanço de energia, substituindo todos os símbolos das constantes pelos respectivos valores numéricos. *Write the balance energy equation, replacing all the constant symbols by the corresponding numerical values.*
- Calcule a temperatura de equilíbrio e a conversão de equilíbrio adiabáticas. *Calculate the adiabatic equilibrium temperature and the adiabatic equilibrium conversion.*
- Determine o volume de um reactor tubular, necessário a uma conversão que seja 98% da conversão de equilíbrio. *Determine the PFR volume required for 98% equilibrium conversion.*

Dados:

$E_a = 15$  kcal/mol;  $\Delta H_R^\circ(373\text{ K}) = -12,5$  kcal/mol;  $C_{pA} = 3$  cal/mol.K;  $C_{pB} = 1.5$  cal/mol K;  $C_{pC} = 1.5$  cal/mol K;  $C_{pI} = 2$  cal/mol K;  $k(373\text{ K}) = 0,05\text{ s}^{-1}$ ;  $K_e(373\text{ K}) = 28$ .

- 2) A reacção de 1ª ordem, em fase líquida,  $A \rightarrow B$ , é conduzida num reactor CSTR adiabático, de 5 m<sup>3</sup> de volume, a funcionar em estado estacionário. A alimentação ao reactor, a um caudal volumétrico de 50 dm<sup>3</sup>/min é constituída por A (7 mol%) e por um inerte I. A figura mostra a curva de geração de calor. Determine:

*The liquid phase 1st order reaction  $A \rightarrow B$  is carried out in a steady-state, 5 m<sup>3</sup>, adiabatic CSTR. A (7 mol %) and an inert I are fed to the reactor at 50 dm<sup>3</sup>/min volumetric flow rate. Determine:*



- O valor da temperatura da corrente de saída, correspondente a uma conversão de 97,5%. *The temperature of the exiting current corresponding to 97,5% conversion.*
- O valor da temperatura da alimentação, nas condições da alínea a). *The feed temperature corresponding to 97,5% conversion.*
- O valor da temperatura de ignição. *The ignition temperature.*
- O valor da temperatura de extinção. *The extinction temperature.*
- A composição da alimentação, nas condições da alínea a), para uma temperatura da alimentação de 310 K. *The feed composition for 310 K entering temperature and 97,5 % conversion.*

Dados:  $\Delta H_R = -30$  kcal/mol;  $E_a = 25$  kcal/mol;  $C_{pA} = C_{pB} = C_{pI} = 20$  cal/mol K;  $R = 1,987$  cal mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>.

Prob 1a)

PFR  
Adiabático

$$Ke = \frac{P_{Be}}{P_{Ae}} = \frac{C_{Be}}{C_{Ae}} = \frac{C_{A0} X_e}{C_{A0} (1 - X_e)} = \frac{X_e}{1 - X_e}$$

$$X_e = \frac{Ke}{1 + Ke} = \frac{Ke(T_R) e^{-\frac{\Delta H_R}{R}(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R})}}{1 + Ke(T_R) e^{-\frac{\Delta H_R}{R}(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R})}}$$

$$X_e = \frac{28 e^{+\frac{12500}{1987}(\frac{1}{T} - \frac{1}{373})}}{1 + 28 e^{+\frac{12500}{1987}(\frac{1}{T} - \frac{1}{373})}}$$

Prob 1b)

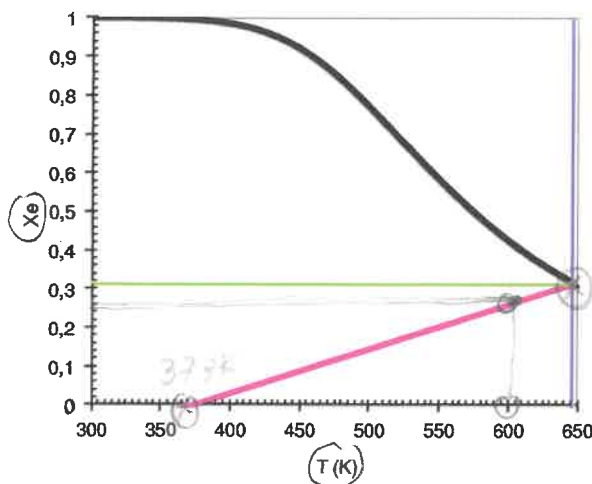
$$X = \frac{(C_{pA} + \theta_I C_{pI}) (T - T_0)}{-\Delta H_R}$$

$$T_0 = 373 \text{ K}$$

P. E

$$X = \frac{(3 + \frac{85}{15} \times 2) (T - 373)}{12500}$$

Prob 1c)



Se :

$$\begin{cases} T = 600 \text{ K} \rightarrow X = 0,26 \\ T_0 = 0 \rightarrow X = 0 \end{cases}$$



do fixo de a recta

A interseção da curva

$X_e ; T_e$

$$\ast \begin{cases} T_e = 646 \text{ K} \\ X_e = 0,315 \end{cases}$$

Prob 1d)

Balanço molar Mole balance:

$$F_A - (F_A + dF_A) + r_A dV = 0$$

$$dV = \frac{dF_A}{r_A}$$

$$V = \int_0^X F_{A0} \frac{dX}{-r_A}$$

Lei cinética *Kinetic law*:

$$-r_A = k C_{A0} \frac{T_0}{T} \left( (1 - X) - \frac{X}{Ke} \right)$$

Condensando o balance molar com a lei cinética:

$$V = \int_0^X F_{A0} \frac{dX}{k C_{A0} \frac{T_0}{T} \left( (1 - X) - \frac{X}{Ke} \right)}$$

$$V = \int_0^X v_0 \frac{dX}{k \frac{T_0}{T} \left( (1 - X) - \frac{X}{Ke} \right)}$$

Arrhenius:

$$k(T) = 1,6 e^{-\frac{15000}{1,987} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{373} \right)}$$

Van't Hoff:

$$Ke(T) = 12 e^{\frac{12500}{1,987} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{373} \right)}$$

Balço de energia *Energy balance*:

$$T = 373 + \frac{12500 X}{\left( 3 + \frac{85}{15} \times 2 \right)}$$

$$f(X) = \frac{v_0}{k \frac{T_0}{T} \left( (1 - X) - \frac{X}{Ke} \right)}$$



$$V = \int_{X_1}^{X_3} f(X) dX = \frac{h}{3} (f(X_1) + 4f(X_2) + f(X_3))$$

$$h = \frac{X_3 - X_1}{2}$$

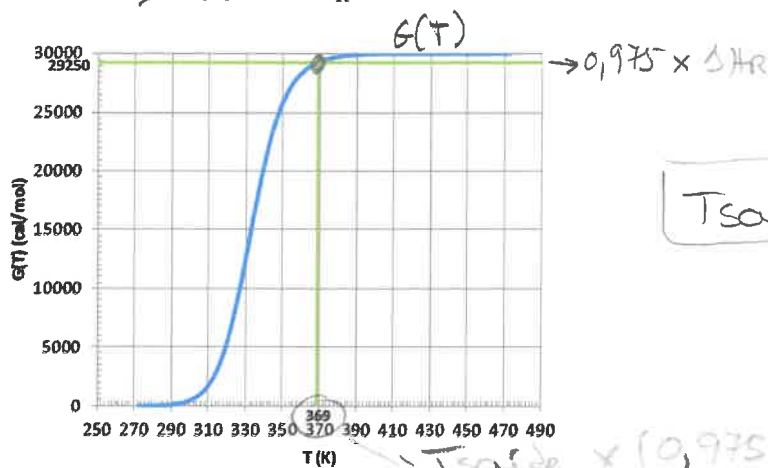
$$X = 0,98 X_e = 0,98 \times 0,315 = 0,309$$

X	T	k(T)	Ke(T)	f(X)	V	
0,000	373	0,05	28	33,33333	33,33333	
0,154	507,6076	10,71021	0,319743	32,2741	129,0964	
0,309	642,2151	241,8512	0,023805	92,98661	92,98661	
					<b>13,2</b>	<b>dm3</b>

Prob 2a)

$$\rightarrow G(T) = -\Delta H_R X = 12500 \times 0,975 = 29250 \text{ cal/mol}$$

$$X = 0,975$$



$$T_{\text{saída}} = 369 \text{ K}$$

$$T = 369 \text{ K}$$

Prob 2b)

$$\rightarrow R(T) = (C_{pA} + \theta_I C_{pI}) (T - T_0)$$

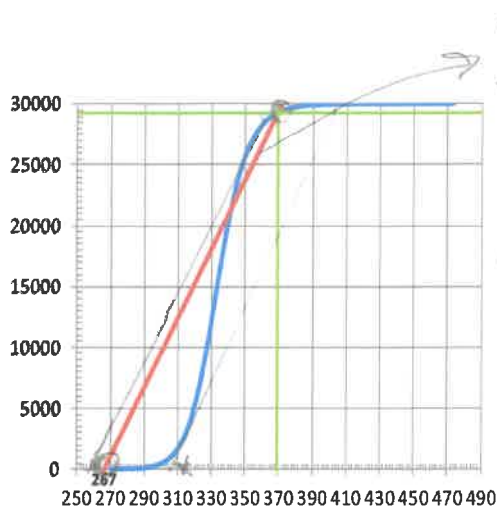
$$29250 = \left(20 + \frac{93}{7} \times 20\right) (369 - T_0)$$

$$T_0 = 369 - \frac{29250}{\left(20 + \frac{93}{7} \times 20\right)} = 267 \text{ K}$$

$T_s \rightarrow X = 0,975$   
 $T_0$  - temp. de  
 alimentação  
 $T_{\text{saída}} = 369 \text{ K}$

$$\theta_I = \frac{93}{7} = \frac{C_{T_0}}{C_{T_0}}$$

A (7%)  
 I (93%)



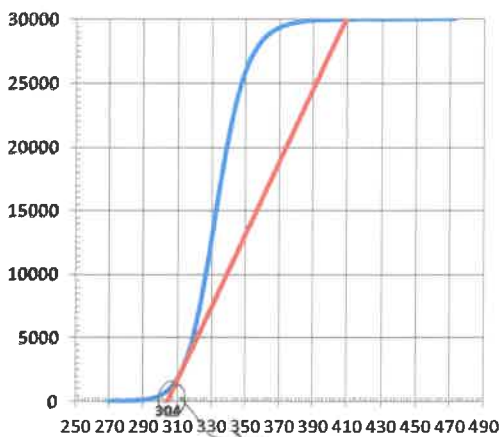
$$\left\{ \begin{array}{l} T_0 = 267 \\ T_{\text{sig}} = 369 \text{ K} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} T_0 = 267 \\ G(T) = 2925 \end{array} \right.$$

reta vermelha

$$T_0 = 369 \cdot \frac{2950}{(20 + \frac{93}{7} + 20)} = 267 \text{ K}$$

Prob 3c)



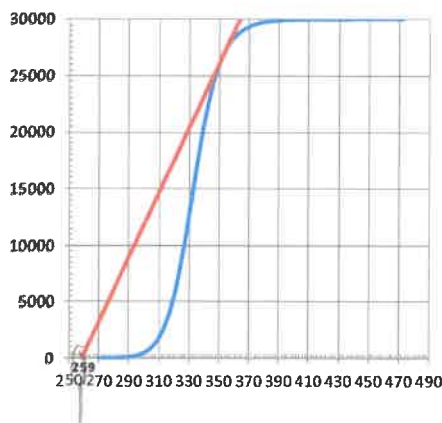
paralela à recta vermelha

liquidação

$R(T)$  desloca-se paralelamente a ela própria de modo a ficar tangente ao ramo inferior de  $G(T)$ ,  $R(T)$  is shifted parallel to itself in order to become tangent to the lower branch of  $G(T)$ :

$$T_{\text{ign}} = 304 \text{ K}$$

Prob 3d)



Texturas

$R(T)$  desloca-se paralelamente a ela própria de modo a ficar tangente ao ramo superior de  $G(T)$ ,  $R(T)$  is shifted parallel to itself in order to become tangent to the higher branch of  $G(T)$ :

$$T_{\text{ign}} = 259 \text{ K}$$

$$T_0 = 310 \text{ K}$$

Prob 2e)

$$T_{\text{saide}} = 369 \text{ K ver alinea a)}$$

$$R(T) = (20 + 20 \theta_I) (T - 310)$$

$$29250 = (20 + 20 \theta_I) 369 - 310 (20 + 20 \theta_I) \checkmark$$

$$29250 = 20 \times 369 + 20 \times 369 \theta_I - 310 \times 20 - 310 \times 20 \theta_I$$

$$\theta_I = \frac{\frac{29250}{20} - 369 + 310}{369 - 310} = 23,788 //$$

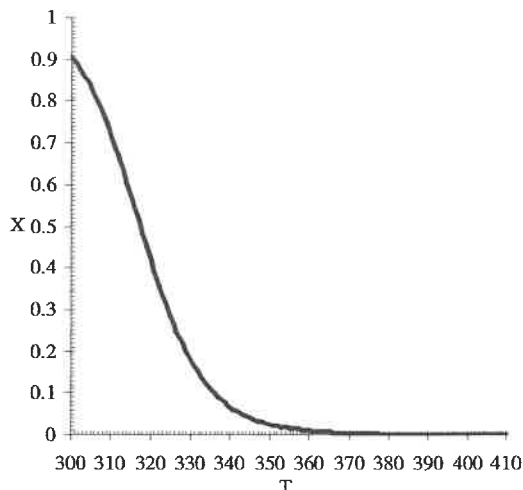
$$\begin{cases} \theta_I = \frac{y_{I0}}{y_{A0}} = 23,788 \\ y_{A0} + y_{I0} = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{I0} = 0,96 \\ y_{A0} = 0,04 \end{cases}$$

## Problema 4

### R. tubular

A reacção reversível  $A \rightleftharpoons B$  é conduzida, na fase líquida, num reactor tubular adiabático. O reagente A é alimentado numa concentração 1 M, à temperatura de 300 K, a um caudal volumétrico de  $20 \text{ dm}^3/\text{min.}$ , juntamente com um solvente C, o qual se comporta como um inerte. À saída do reactor obtém-se uma conversão correspondente a 99,9% da conversão de equilíbrio. A figura representa a variação da conversão de equilíbrio com a temperatura.



The reversible reaction is carried out in the liquid phase in an adiabatic PFR. Reactant A is fed to the reactor at 1 M concentration, 300 K and  $20 \text{ dm}^3/\text{min}$  volumetric flow rate, along with a solvent C, which is behaving as inert.

- Determine a conversão de equilíbrio e a correspondente temperatura de equilíbrio. Determine the adiabatic equilibrium conversion and adiabatic equilibrium temperature.
- Calcule o volume de reactor necessário a uma conversão correspondente a 99,9% da conversão de equilíbrio. Calculate the reactor volume required for a conversion correspondig to 99,9% of equilibrium conversion.
- Determine o valor da temperatura à saída do reactor.
- Qual deverá ser o valor da concentração de A na alimentação, para que seja possível uma conversão de equilíbrio de 75%? What should be the A concentration in the feed, in order to make possible an equilibrium conversion of 75%?

Dados (data):  $\Delta H_R(300 \text{ K}) = -25 \text{ kcal/mol}$ ; Peso molecular de A (Molecular weight of A): 44; Peso molecular de C (Molecular weight of C): 18; densidade da alimentação (feed density): 1;  $C_{pA} = C_{pB} = 20 \text{ cal/mol K}$ ;  $C_{pI} = 18 \text{ cal/mol K}$ ; Constante cinética da reacção directa (rate constant of the direct reaction):  $k(300 \text{ K}) = 0.1 \text{ min}^{-1}$ ;  $K_e(300 \text{ K}) = 10$ ; Energia de activação (activation energy):  $E = 15 \text{ kcal/mol}$ ;  $R = 1.987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ .

Resolução:

a)

Base de cálculo (calculation basis):  $1 \text{ dm}^3$

Massa da solução (solution mass):  $m = 1000 \text{ g}$

$$m = n_A PM_A + n_C PM_C$$

$$n_A = 1 \text{ mol}$$

$$1000 = 1 \times 44 + n_c \times 18$$

$$n_c = 53,1 \text{ mol} \quad \Rightarrow \quad \theta_c = \frac{C_{c0}}{C_{A0}} = \frac{53,1}{1} = 53,1$$

Balço de energia (energy balance):

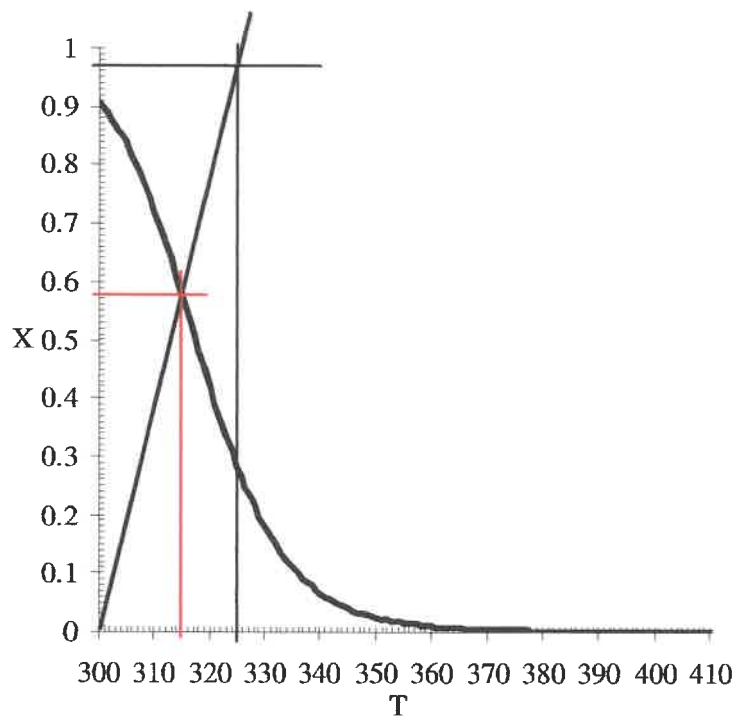
$$X = \frac{\sum_i \theta_i C_{p_i} (T - T_0)}{-\Delta H_R} = \frac{(C_{p_A} + \theta_c C_{p_c})(T - T_0)}{-\Delta H_R}$$

$$X = \frac{(C_{p_A} + \theta_c C_{p_c})(T - T_0)}{-\Delta H_R^0} = \frac{(20 + 53,1 \times 18)(T - 300)}{25000}$$

A recta é definida por dois pontos:

The straight line is defined by two points:

$$\begin{cases} T = 300 & X = 0 \\ T = 325 & X = 0,976 \end{cases}$$



$$\begin{cases} T_e = 315 \text{ K} \\ X_e = 0,58 \end{cases}$$

c)

Lei cinética:

Rate law:

$$-r_A = k \left( C_A - \frac{C_B}{K_e} \right) = k \left( C_{A0}(1 - X) - \frac{C_{A0} X}{K_e} \right) = k C_{A0} \left( 1 - X - \frac{X}{K_e} \right)$$

Balço molar:

Mole balance:

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A}$$

Condensando as duas equações:

Condensing both equations:

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{k C_{A0} \left( 1 - X - \frac{X}{K_e} \right)}$$

$$V = C_{A0} v_0 \int_0^X \frac{dX}{k C_{A0} \left( 1 - X - \frac{X}{K_e} \right)}$$

$$V = \int_0^X \frac{v_0}{k \left( 1 - X - \frac{X}{K_e} \right)} dX$$

Com (with)

$$k(T) = k(T_R) e^{\frac{E}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right)}$$

$$K_e(T) = K_e(T_R) e^{\frac{-\Delta H_R}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right)}$$

$$X = 0,999 X_e$$

Balço de energia (energy balance):

$$X = \frac{(C_{pA} + \theta_C C_{pC})(T - T_0)}{(-\Delta H_R)}$$

$$(-\Delta H_R)X = (C_{pA} + \theta_C C_{pC})T - (C_{pA} + \theta_C C_{pC})T_0$$

$$T = \frac{(-\Delta H_R)X + (Cp_A + \theta_C Cp_C)T_0}{Cp_A + \theta_C Cp_C}$$

Temos, portanto, de resolver em simultâneo as seguintes equações (therefore, we have to solve simultaneously the following equations):

$$V = \int_0^{0,999 X_e} \frac{v_0}{k \left(1 - X - \frac{X}{K_e}\right)} dX$$

$$k(T) = k(T_R) e^{-\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)}$$

$$K_e(T) = K_e(T_R) e^{-\frac{\Delta H_R}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)}$$

$$T = \frac{(-\Delta H_R)X + (Cp_A + \theta_C Cp_C)T_0}{Cp_A + \theta_C Cp_C}$$

$$V = \int_0^{0,579} \frac{20}{k \left(1 - X - \frac{X}{K_e}\right)} dX$$

$$k(T) = 0,1 e^{-\frac{15000}{1,987} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{300}\right)}$$

$$K_e(T) = 10 e^{\frac{25000}{1,987} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{300}\right)}$$

$$T = \frac{25000 X + (20 + 53,1 \times 18) \times 300}{20 + 53,1 \times 18}$$

Usando-se a regra de Simpson a três pontos (using the three points Simpson rule):

X	T	k	K	f(X)
0	300	0,1	10	200
0,2895	307,417	0,183513	3,635419	172,7528
0,579	314,834	0,327274	1,386162	18518,16

$$V = \frac{0,2895}{3} \times (200 + 4 \times 172,7528 + 18518,16) = 2073 \text{ dm}^3$$

c)

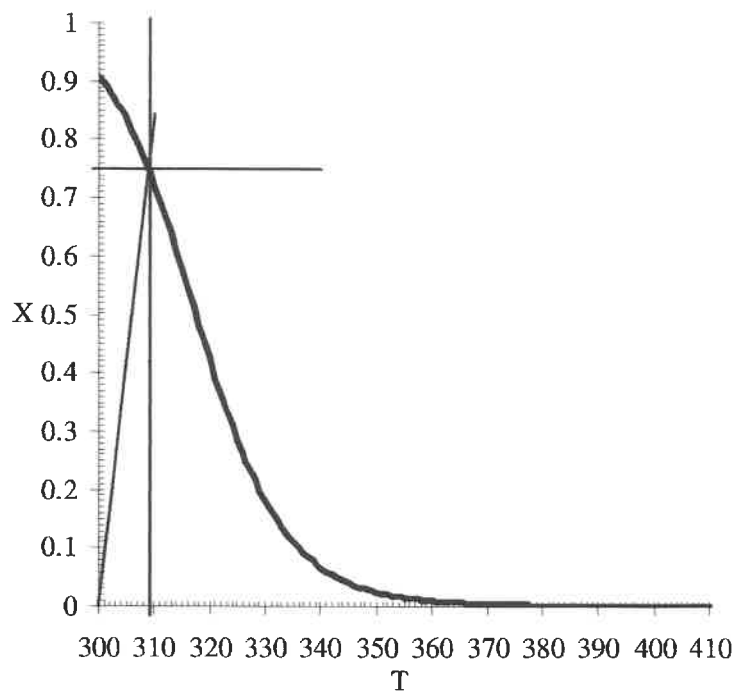
$$T = \frac{25000 X + (20 + 53,1 \times 18) \times 300}{20 + 53,1 \times 18} =$$

$$= \frac{25000 \times 0,579 + (20 + 53,1 \times 18) \times 300}{20 + 53,1 \times 18} = 314,8 \text{ K}$$

d)

$$X = \frac{(C_{pA} + \theta_c C_{pC})(T - T_0)}{-\Delta H_R^0} = \frac{(20 + \theta_c \times 18)(T - 300)}{25000}$$

$$X = \frac{(20 + \theta_c \times 18)}{25000} T - \frac{(20 + \theta_c \times 18)300}{25000}$$



A recta é definida por dois pontos (the straight line is defined by two points):

$$\begin{cases} T = 300 & X = 0 \\ T = 309 & X = 0,75 \end{cases}$$

O declive da recta é dado por (the slope is given by):

$$\frac{(20 + \theta_c \times 18)}{25000} = \frac{0 - 0,75}{300 - 309}$$

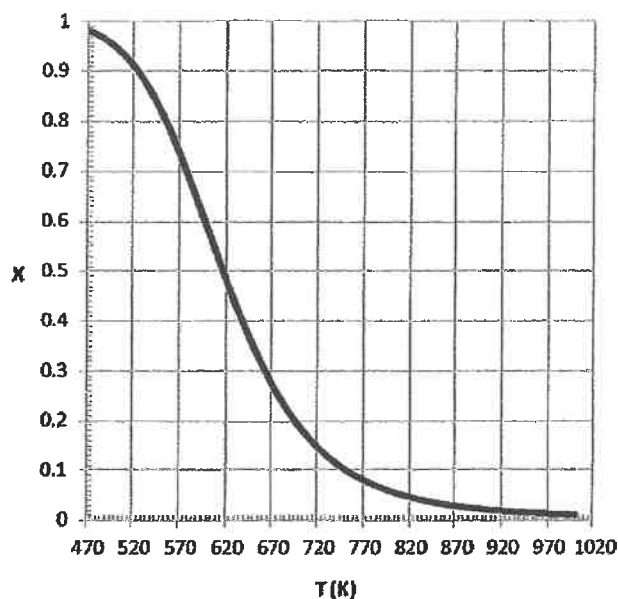


Obtendo-se:

$$\begin{aligned}\theta_c &= 114,6 \\ \left\{ \begin{array}{l} 1000 = N_{A0} \times 44 + N_{C0} \times 18 \\ \theta_c = \frac{N_{C0}}{N_{A0}} = 114,6 \end{array} \right. \\ \left\{ \begin{array}{l} N_{A0} = 0,475 \text{ mol} \\ N_{C0} = 54,41 \text{ mol} \end{array} \right. \\ C_{A0} &= 0,475 \text{ M}\end{aligned}$$

Apresente sempre todos o cálculos e construções gráficas

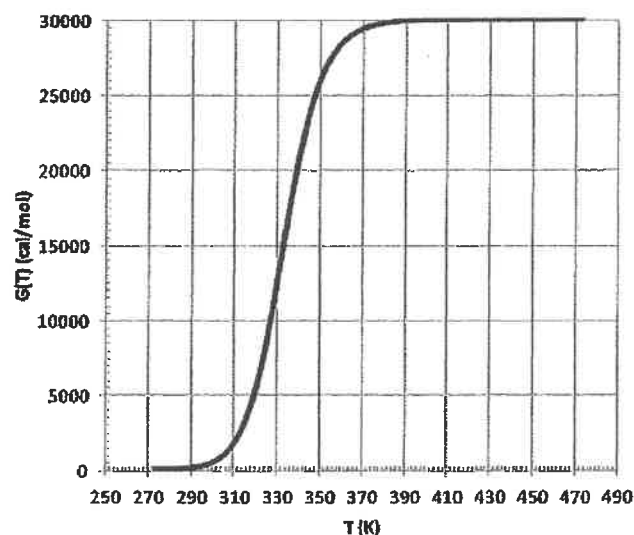
- 1) A reacção reversível  $A \rightleftharpoons B$  é conduzida, na fase gasosa, num reactor tubular adiabático. O reagente A (20%) e um inerte são alimentados, à temperatura de 473 K, a um caudal volumétrico de 100 dm<sup>3</sup>/min. A figura representa a variação da conversão de equilíbrio com a temperatura. Apresentando todos os cálculos e construções gráficas:



- Diga, justificando a resposta, se a reacção é endotérmica ou exotérmica.
- Escreva a equação da curva representada na figura, substituindo todas as constantes pelos respectivos valores numéricos.
- Determine, usando o gráfico, o valor do calor de reacção.
- Determine a conversão de equilíbrio e a correspondente temperatura de equilíbrio.
- Calcule o volume do reactor necessário a uma conversão de 99,5% da conversão de equilíbrio.
- Qual deverá ser o valor da fracção molar de A na alimentação, para que seja possível uma conversão de equilíbrio de 90%?

Dados:  $C_{pA} = C_{pB} = 5$  cal/mol K;  $C_{pI} = 12$  cal/mol K; Constante cinética da reacção directa:  $k(473 \text{ K}) = 1.17 \text{ min}^{-1}$ ;  $K_e(473 \text{ K}) = 40$ ; Energia de activação:  $E = 20$  kcal/mol;  $R = 1,987$  cal mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>.

- 2) A reacção elementar em fase líquida,  $A \rightarrow B$ , é conduzida num reactor CSTR adiabático, de 10 m<sup>3</sup> de volume, a funcionar em estado estacionário. A alimentação ao reactor, a um caudal volumétrico de 200 dm<sup>3</sup>/min é constituída por A (10 mol%) e por um inerte I. A figura mostra a curva de geração de calor. Determine:



- O valor da temperatura da corrente de saída, correspondente a uma conversão de 99%.
- O valor da temperatura da alimentação, nas condições da alínea a).
- Os valores das temperaturas de ignição e extinção.
- A composição da alimentação, nas condições da alínea a), para uma temperatura da alimentação de 310 K.

Dados:  $\Delta H_R = -30$  kcal/mol;  $E_a = 25$  kcal/mol;  $C_{pA} = C_{pB} = 20$  cal/mol K;  $C_{pI} = 40$  cal/mol K;  $R = 1,987$  cal mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>.

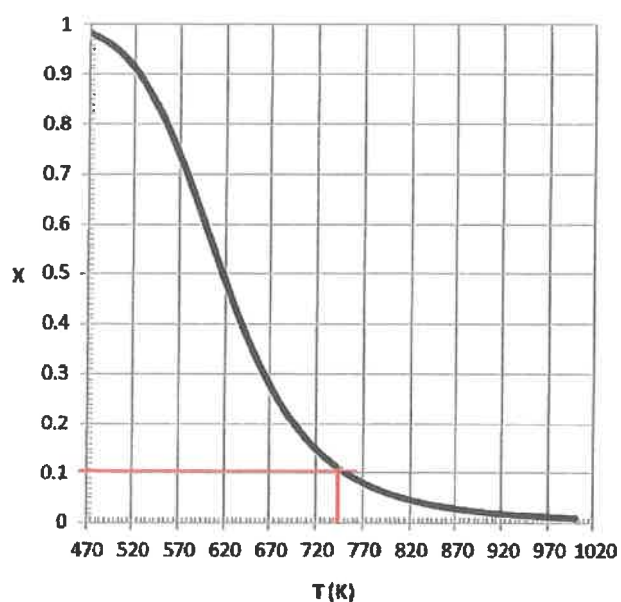
Prob 1a

A reacção é exotérmica porque o valor da conversão de equilíbrio desce quando a temperatura aumenta.

Prob 1b

$$X = \frac{Ke(T_R) \exp \left[ -\frac{\Delta H_R}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) \right]}{1 + Ke(T_R) \exp \left[ -\frac{\Delta H_R}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) \right]} = \frac{40 \times \exp \left[ -\frac{\Delta H_R}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{473} \right) \right]}{1 + 40 \times \exp \left[ -\frac{\Delta H_R}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{473} \right) \right]}$$

Prob 1c



Do gráfico:

$$Xe(745) = 0,1$$

$$Ke(T) = \frac{Xe(T)}{1 - Xe(T)}$$

$$Ke(745) = \frac{Xe(745)}{1 - Xe(745)} = \frac{0,1}{1 - 0,1} = 0,111$$

Lei de van't Hoff:

$$Ke(T) = Ke(T_R) \exp \left[ -\frac{\Delta H_R^0}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) \right]$$

$$0,111 = 40 \exp \left[ -\frac{\Delta H_R^0}{1,987} \left( \frac{1}{745} - \frac{1}{473} \right) \right]$$

$$\Delta H_R^0 = \frac{1,987 \ln \frac{40}{0,111}}{\left( \frac{1}{745} - \frac{1}{473} \right)} = -15155 \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$$

Prob 1d

Balanco de energia:

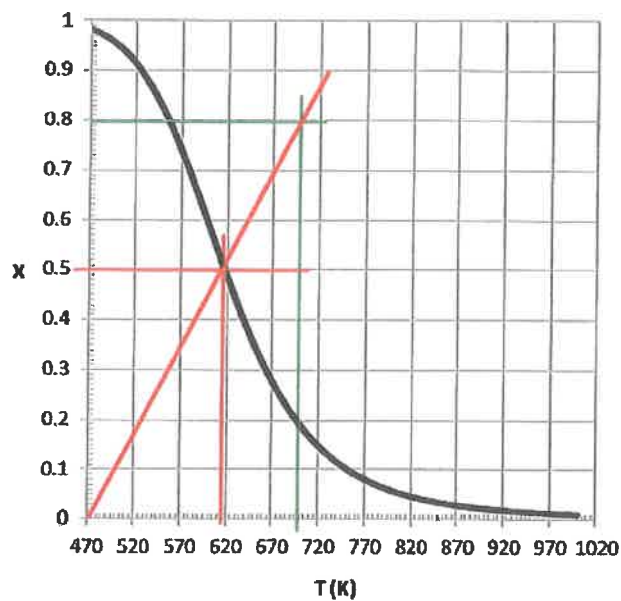
$$X = \frac{(Cp_A + \theta_I Cp_I) (T - T_0)}{-\Delta H_R^0} = \frac{(Cp_A + \frac{y_{I0}}{y_{A0}} Cp_I) (T - T_0)}{-\Delta H_R^0}$$

$$X = \frac{\left( 5 + \frac{80}{20} \times 12 \right) (T - 473)}{-(-15155)} = \frac{53 (T - 473)}{15155}$$

Precisamos de dois pontos:

$$T = 473 \quad X = 0$$

$$T = 700 \quad X = \frac{53 (700 - 473)}{15155} = 0,794$$



$$\begin{cases} T_e = 615 \text{ K} \\ X_e = 0,495 \end{cases}$$

Prob 1e

Lei cinética:

$$-r_A = k \left( C_A - \frac{C_B}{Ke} \right) = k C_{A0} \frac{T_0}{T} \left( 1 - X - \frac{X}{Ke} \right)$$

Balço molar:

$$F_A - (F_A + dF_A) + r_A dV = 0$$

$$dV = \frac{dF_A}{r_A} = F_{A0} \frac{dX}{-r_A}$$

$$dV = C_{A0} v_0 \frac{dX}{k C_{A0} \frac{T_0}{T} \left( 1 - X - \frac{X}{Ke} \right)}$$

$$V = \int_0^V dV = \int_0^X \frac{v_0}{k \frac{T_0}{T} \left( 1 - X - \frac{X}{Ke} \right)} dX$$

$$X = 0,995 X_e = 0,995 \times 0,495 = 0,4925$$

$$V = \int_0^{0,4925} \frac{v_0}{k \frac{T_0}{T} \left( 1 - X - \frac{X}{Ke} \right)} dX$$

Lei de van't Hoff:

$$Ke(T) = Ke(T_R) \exp \left[ -\frac{\Delta H_R^0}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) \right] = 40 \exp \left[ \frac{15155}{1,987} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{473} \right) \right]$$

Lei de Arrhenius

$$k(T) = k(T_R) \exp \left[ -\frac{E}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) \right] = 1,17 \exp \left[ -\frac{20000}{1,987} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{473} \right) \right]$$

Balço de energia:

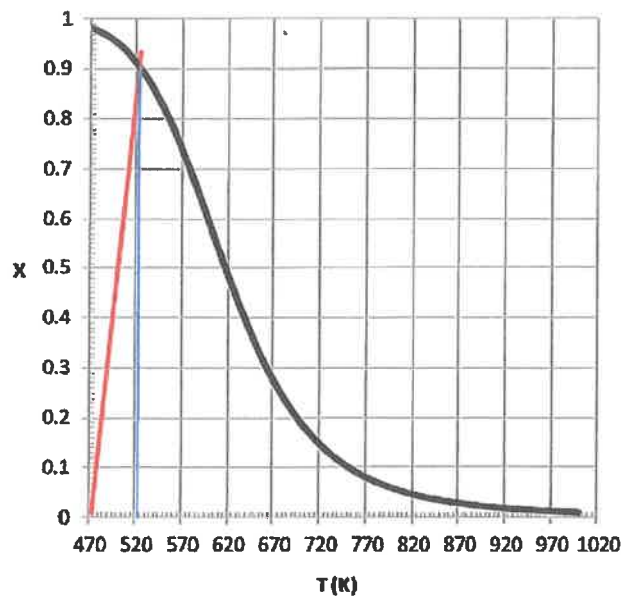
$$T = \frac{15155X}{53} + 473$$

X	T	k	Ke	f(X)
0	473	1.17	40	85.47009
0.2463	543.4171	18.43972	4.94997	8.850202
0.4925	613.8343	154.369	0.989342	87.17037

$$f(X) = \frac{v_0}{k \frac{T_0}{T} \left(1 - X - \frac{X}{Ke}\right)}$$

$$V = \frac{h}{3} (f(0) + 4f(0,2463) + f(0,4925)) = \frac{0,2463}{3} (85,47 + 4 \times 8,85 + 87,17) = 17 \text{ dm}^3$$

Prob 1f



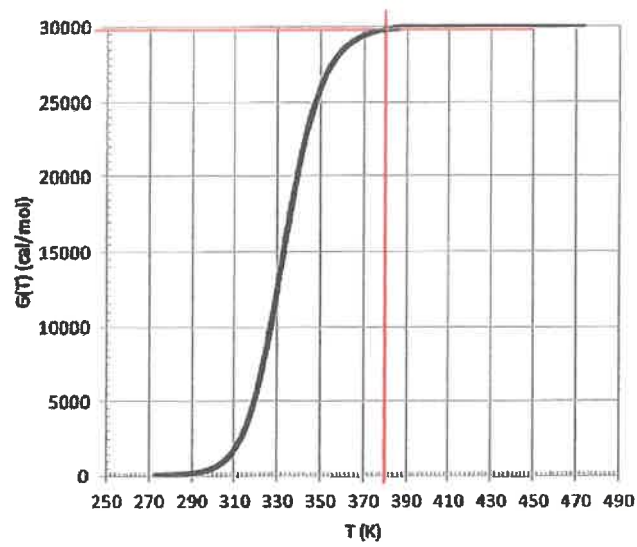
$$0,9 = \frac{(5 + 12 \theta_1) (525 - 473)}{15155} = \frac{5 \times 52 + 52 \times 12 \theta_1}{15155}$$

$$\theta_1 = \frac{0,9 \times 15155 - 5 \times 52}{52 \times 12} = 21,442$$

$$\begin{cases} \frac{y_{I0}}{y_{A0}} = 21,442 \\ y_{I0} + y_{A0} = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{I0} = 0,955 \\ y_{A0} = 0,045 \end{cases}$$

Prob 2a



$$G(T) = -\Delta H_R^0 X = 30000 \times 0,99 = 29700 \text{ cal/mol}$$

$$T = 380 \text{ K}$$

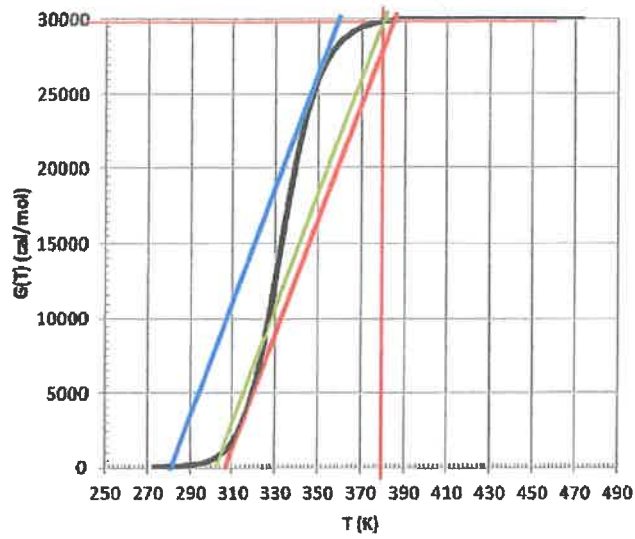
Prob 2b

$$R(T) = \left( C_{pA} + \frac{y_{I0}}{y_{A0}} C_{pI} \right) (T - T_0)$$

$$29700 = \left( 20 + \frac{0,9}{0,1} \times 40 \right) (380 - T_0)$$

$$T_0 = 301,8 \text{ K}$$

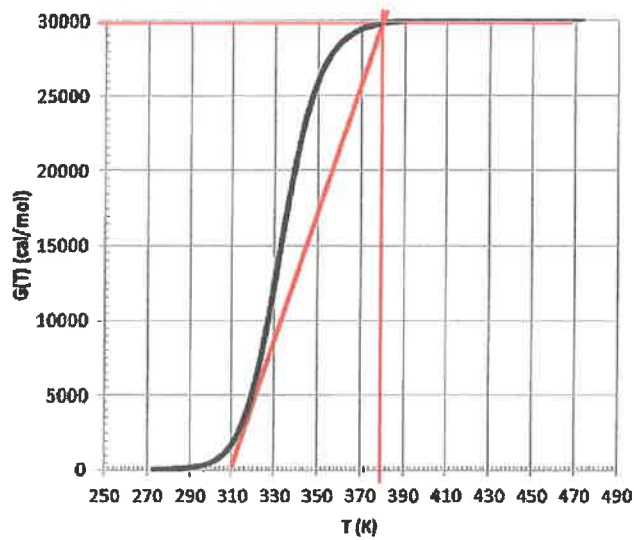
Prob 2c



Temperatura de ignição:  $T_{\text{ign}} \approx 307$  K.

Temperatura de extinção:  $T_{\text{ext}} \approx 282$  K.

Prob 2d



$$29700 = \left( 20 + \frac{y_{I0}}{y_{A0}} \times 40 \right) (380 - 310)$$

$$\frac{y_{I0}}{y_{A0}} = \frac{29700 - 20 \times 70}{40 \times 70} = 10,107$$

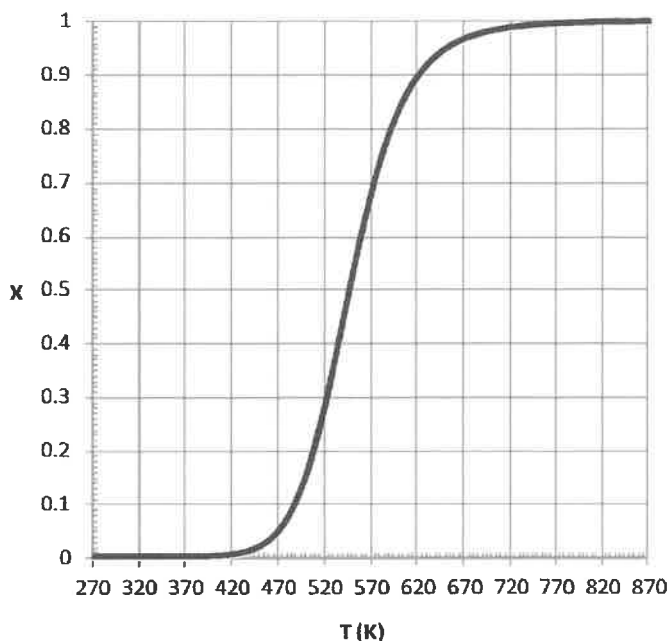


$$\begin{cases} y_{I0} = 10,107 \\ y_{A0} \\ y_{I0} + y_{A0} = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_{I0} = 0,91 \\ y_{A0} = \frac{1}{11,107} = 0,09 \end{cases}$$

Apresente sempre todos o cálculos e construções gráficas

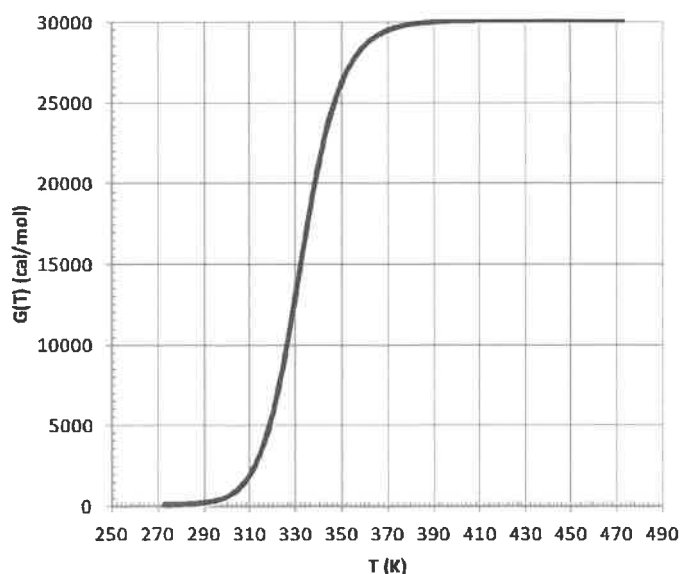
- 1) A reacção reversível  $A \rightleftharpoons B$  é conduzida, na fase gasosa, num reactor tubular adiabático. O reagente A (20%) e um inerte são alimentados, à temperatura de 673 K, a um caudal volumétrico de 100 dm<sup>3</sup>/min. A figura representa a variação da conversão de equilíbrio com a temperatura. Apresentando todos os cálculos e construções gráficas:



- Diga, justificando a resposta, se a reacção é endotérmica ou exotérmica.
- Escreva a equação da curva representada na figura, substituindo todas as constantes pelos respectivos valores numéricos.
- Determine, usando o gráfico, o valor do calor de reacção.
- Determine a conversão de equilíbrio e a correspondente temperatura de equilíbrio.
- Calcule o volume do reactor necessário a uma conversão de 99,5% da conversão de equilíbrio.

Dados:  $C_{pA} = C_{pB} = 5$  cal/mol K;  $C_{pI} = 12$  cal/mol K; Constante cinética da reacção directa:  $k(673 \text{ K}) = 50 \text{ min}^{-1}$ ;  $K_c(673 \text{ K}) = 30$ ; Energia de activação:  $E = 20$  kcal/mol;  $R = 1,987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . Se não resolveu a alínea c), use  $\Delta H_R = 20$  kcal/mol.

- 2) A reacção elementar em fase líquida,  $A \rightarrow B$ , é conduzida num reactor CSTR adiabático, de 10 m<sup>3</sup> de volume, a funcionar em estado estacionário. A alimentação ao reactor, a um caudal volumétrico de 200 dm<sup>3</sup>/min é constituída por A (10 mol%) e por um inerte I. A figura mostra a curva de geração de calor. Determine:



- O valor da energia de activação.
- O valor da temperatura da corrente de saída, correspondente a uma conversão de 95%.
- O valor da temperatura da alimentação, nas condições da alínea b).
- Os valores das temperaturas de ignição e extinção.
- A composição da alimentação, nas condições da alínea b), para uma temperatura da alimentação de 298 K.

Dados:  $\Delta H_R = -30$  kcal/mol;  $C_{pA} = C_{pB} = 20$  cal/mol K;  $C_{pI} = 40$  cal/mol K;  $R = 1,987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ .

## Resolução

### Prob 1a

A reacção é endotérmica porque o valor da conversão de equilíbrio aumenta quando a temperatura aumenta.

### Prob 1b

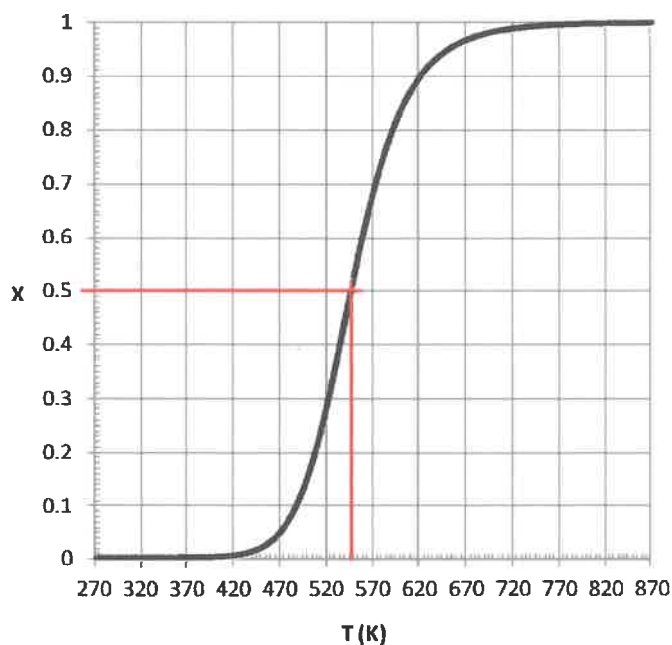
$$X_e = \frac{30 e^{-\frac{\Delta H_R}{1,987} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{673} \right)}}{1 + 30 e^{-\frac{\Delta H_R}{1,987} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{673} \right)}}$$

ex: 99

temperatura  $\rightarrow X_e$

### Prob 1c

$\Delta H_R = ?$



ex: 550 K  $\rightarrow X_e$

$$\begin{cases} T = 550 \text{ K} \\ X_e = 0,5 \end{cases}$$

calcula-se  $K_e(550 \text{ K}) = \frac{X_e}{1 - X_e} = \frac{0,5}{1 - 0,5} = 1$

$$K_e(673 \text{ K}) = K_e(550 \text{ K}) e^{-\frac{\Delta H_R}{1,987} \left( \frac{1}{673} - \frac{1}{550} \right)}$$

$$30 = 1 \times e^{-\frac{\Delta H_R}{1,987} \left( \frac{1}{673} - \frac{1}{550} \right)}$$

$$\ln 30 = \ln e^{-\frac{\Delta H_R}{1,987} \left( \frac{1}{673} - \frac{1}{550} \right)}$$

$$\ln 30 = -\frac{\Delta H_R}{1,987} \left( \frac{1}{673} - \frac{1}{550} \right)$$

$$\Delta H_R = -\frac{1,987 \times \ln 30}{\left( \frac{1}{673} - \frac{1}{550} \right)} = 20337.7 \text{ cal/mol} //$$

$T_0 = 673 \text{ K}$   
(alimentação)

Prob 1d

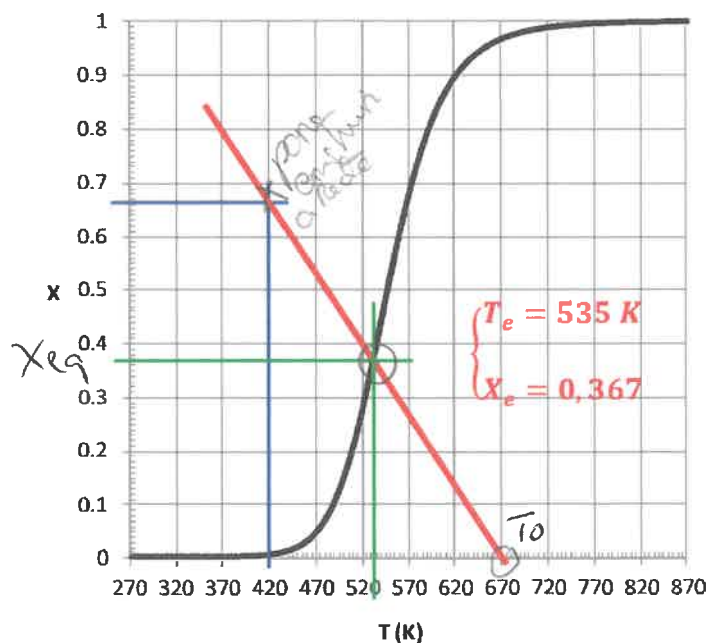
Balanço de energia:

$$X = \frac{(Cp_A + \theta_I Cp_I) (T - T_0)}{-\Delta H_R^0} = \frac{\left( Cp_A + \frac{y_{I0}}{y_{A0}} Cp_I \right) (T - T_0)}{-\Delta H_R^0}$$

$$X = \frac{\left( 5 + \frac{0.8}{0.2} \times 12 \right) (T - 673)}{-20337.7}$$

Dois pontos da recta:

$$\begin{cases} T = 673 \text{ K}, & X = 0 \\ T = 420 \text{ K}, & X = 0.659 \end{cases} \quad (T \text{ para encerrar a recta})$$



Prob 1e

2. equilíbrio

Lei cinética:

$$-r_A = k \left( C_A - \frac{C_B}{K_e} \right)$$

$$C_A = \frac{F_A}{v} = \frac{F_{A0} (1-X)}{v_0 \frac{T}{T_0}} = C_{A0} (1-X) \frac{T_0}{T}$$

$$C_B = \frac{F_B}{v} = \frac{F_{A0} X}{v_0 \frac{T}{T_0}} = C_{A0} X \frac{T_0}{T}$$

$$-r_A = k \left( C_{A0} (1-X) \frac{T_0}{T} - \frac{C_{A0} X \frac{T_0}{T}}{K_e} \right) = k C_{A0} \frac{T_0}{T} \left( 1 - X - \frac{X}{K_e} \right)$$

Balço molar:

$$F_A - (F_A + dF_A) + r_A dV = 0$$

$$dV = F_{A0} \frac{dX}{-r_A} \quad \therefore V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A}$$

Equação condensada:

$$V = \int_0^X \frac{v_0}{k(T) \frac{T_0}{T} \left( 1 - X - \frac{X}{K_e(T)} \right)} dX = \int_0^X \frac{100}{k(T) \frac{673}{T} \left( 1 - X - \frac{X}{K_e(T)} \right)} dX$$

Lei de Arrhenius:

$$k(T) = k(T_R) e^{-\frac{E}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right)} = 50 e^{-\frac{20000}{1.987} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{673} \right)} \quad \checkmark$$

Lei de van't Hoff:

$$K_e(T) = K_e(T_R) e^{-\frac{\Delta H_R}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right)} = 30 e^{-\frac{20337.7}{1.987} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{673} \right)} \quad \checkmark$$

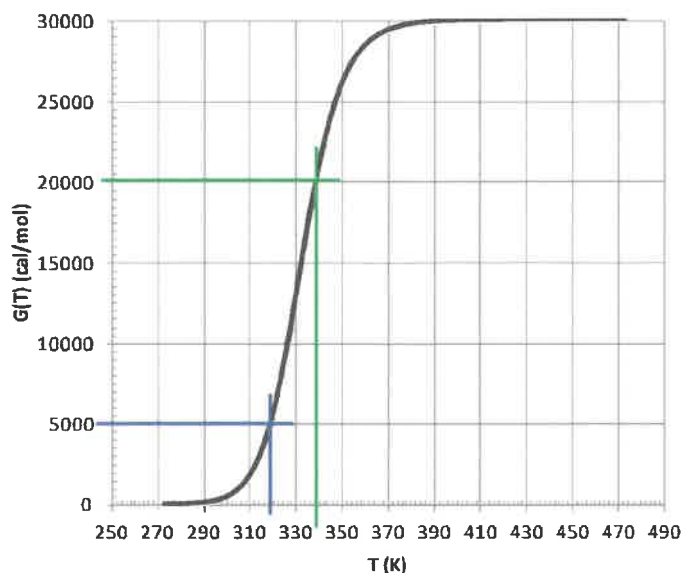
Balanco de energia:

$$X = \frac{\left(5 + \frac{0.8}{0.2} \times 12\right) (T - 673)}{-20337.7} \quad \therefore T = 673 - \frac{20337.7 X}{\left(5 + \frac{0.8}{0.2} \times 12\right)}$$

X	$T = 673 - \frac{20337.7 X}{\left(5 + \frac{0.8}{0.2} \times 12\right)}$	$k(T) = 50 e^{-\frac{20360}{1.987} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{673}\right)}$	$K_e(T) = 30 e^{-\frac{20337.7}{1.987} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{673}\right)}$	$\frac{100}{k(T) \frac{673}{T} \left(1 - X - \frac{X}{K_e(T)}\right)}$	Simpson
0	673	50	30	2	2
0.183	604.1	9.082	5.294	12.62	50.5
0.365	535.2	1.063	0.598	3122	3122

$$V = \frac{0.183}{3} (2 + 4 \times 50.5 + 3122) = 193.2 L$$

Prob 2a



Dois pontos da curva:

$$G(318\text{ K}) = -\Delta H_R X(318\text{ K}) = 5000\text{ cal/mol}$$

$$X(318\text{ K}) = \frac{5000}{-\Delta H_R} = \frac{5000}{-(-30000)} = 0.167$$

$$X(318\text{ K}) = \frac{\tau k(318\text{ K})}{1 + \tau k(318\text{ K})} = 0.167 \quad \therefore k(318\text{ K}) = \frac{0.167}{\tau(1 - 0.167)}$$

$$k(318\text{ K}) = \frac{0.167}{\frac{10000}{200}(1 - 0.167)} = 0.00401\text{ min}^{-1}$$

$$G(338\text{ K}) = -\Delta H_R X(338\text{ K}) = 20000\text{ cal/mol}$$

$$X(338\text{ K}) = \frac{20000}{-\Delta H_R} = \frac{20000}{-(-30000)} = 0.667$$

$$X(338\text{ K}) = \frac{\tau k(338\text{ K})}{1 + \tau k(338\text{ K})} = 0.667 \quad \therefore k(338\text{ K}) = \frac{0.667}{\tau(1 - 0.667)}$$

$$k(338\text{ K}) = \frac{0.667}{\frac{10000}{200}(1 - 0.667)} = 0.04006\text{ min}^{-1}$$

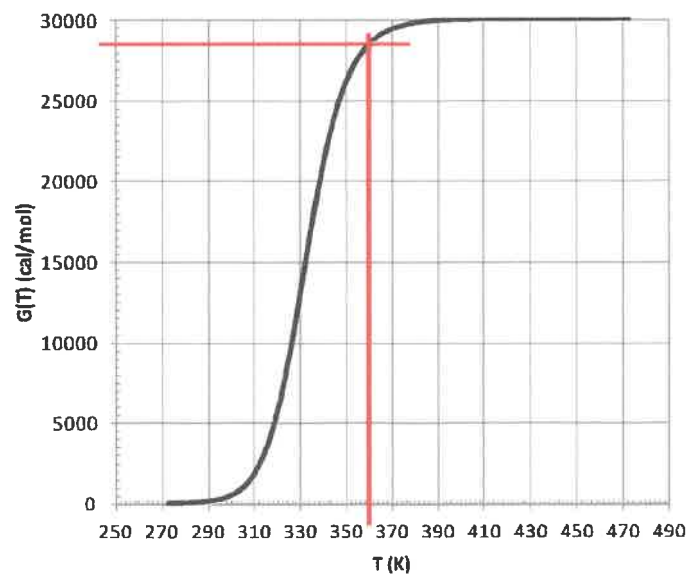
Lei de Arrhenius:

$$k(338) = k(318) e^{-\frac{E}{R} \left( \frac{1}{338} - \frac{1}{318} \right)}$$

$$E = \frac{R}{\left( \frac{1}{338} - \frac{1}{318} \right)} \ln \frac{k(319)}{k(338)} = \frac{1.987}{\left( \frac{1}{338} - \frac{1}{318} \right)} \ln \frac{0.00401}{0.04006} = 24577.6 \text{ cal/mol}$$

Prob 2b

$$G(T) = -\Delta H_R X = 30000 \times 0.95 = 28500 \text{ cal/mol}$$



$$T = 360 \text{ K}$$

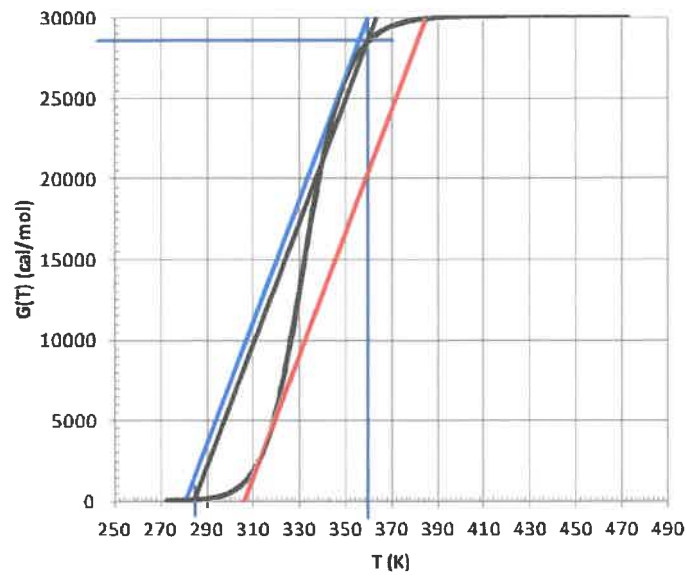
Prob 2c

$$R(T) = \left( C p_A + \frac{y_{I0}}{y_{A0}} C p_I \right) (T - T_0) = \left( 20 + \frac{0.9}{0.1} \times 40 \right) (360 - T_0) = 28500$$

$$T_0 = 360 - \frac{28500}{20 + \frac{0.9}{0.1} \times 40} = 285 \text{ K}$$



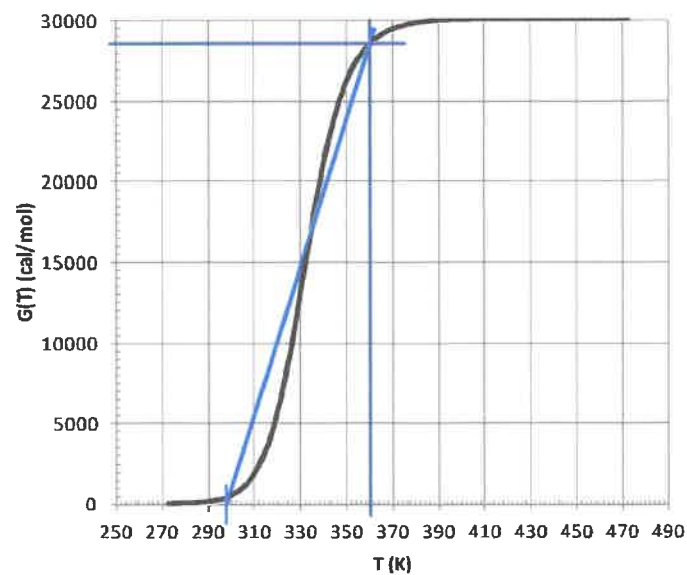
Prob 2d



$$T_{\text{ignição}} = 306 \text{ K}$$

$$T_{\text{extinção}} = 281 \text{ K}$$

Prob 2e



$$R(T) = \left( c p_A + \frac{y_{I0}}{y_{A0}} c p_I \right) (T - T_0) = \left( 20 + \frac{y_{I0}}{y_{A0}} 40 \right) (360 - 298) = 28500$$

$$\begin{cases} \frac{y_{I0}}{y_{A0}} = \frac{\frac{28500}{(360 - 298)} - 20}{40} = 10.992 \\ y_{I0} + y_{A0} = 1 \end{cases} \therefore \begin{cases} y_{I0} = 0.917 \\ y_{A0} = 0.083 \end{cases}$$

2) A reacção irreversível de 1ª ordem  $A \longrightarrow B$  é conduzida, em fase líquida num reactor CSTR adiabático. O reagente A puro entra a um caudal molar de 10 mol/min e a uma concentração de 2 mol/dm<sup>3</sup>. A energia de activação é 20 kcal/mol e a constante cinética, k, é 5x10<sup>-3</sup> min<sup>-1</sup> a 100°C. O reactor, com um volume de 5 m<sup>3</sup> e um diâmetro interno de 1,8 m, é revestido lateralmente por uma camisa, até 85% da altura total (tome o reactor como um cilindro).

a) Admitindo operação isotérmica, calcule a conversão, sabendo que o reactor é arrefecido com um caudal de água de 3,57 kg/min, a qual entra na camisa a 25°C e sai a 35°C.

b) Admitindo operação adiabática, determine as temperaturas de ignição e extinção.

Dados:

$C_{pA} = 75 \text{ cal/mol.K}$ ;  $C_{pB} = 75 \text{ cal/mol.K}$ ;  $C_{pH_2O} = 1 \text{ cal/g.°C}$ ;  $\Delta H_R = -15 \text{ kcal/mol}$ ;  
 $R = 1,987 \text{ cal/mol.K}$ ;  $U = 202,1 \text{ cal/m}^2 \cdot \text{min.°C}$ .

Considere:  $\dot{Q} = U A \Delta T$  e  $\Delta T = \frac{T_{a1} - T_{a2}}{\ln[(T_{a1} - T)/(T_{a2} - T)]}$ .

Res 2000/2001  
Teste

Resolução

Quantidade de calor absorvido pela água, na unidade de tempo:

$$\dot{Q} = \dot{M} C_{p_{H_2O}} (T_{a2} - T_{a1})$$

(35-25)

onde  $\dot{M}$  é o caudal mássico da água de arrefecimento.

$$\therefore \dot{Q} = 3570 \times 1 \times 10 = 35700 \text{ cal/min}$$

$$\Delta T = 35 - 25 = 10^\circ\text{C}$$

↓

$$283\text{K}$$

Balanço de energia:

$$\dot{Q} - F_{A0} \sum_i \theta_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) - F_{A0} \left[ \Delta H_R^\circ(T_R) + \sum_i v_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) \right] X = 0$$

Operação isotérmica:

$$T = T_0$$

adiabático

$$\therefore \dot{Q} - F_{A0} \left[ \Delta H_R^\circ(T_R) + \sum_i v_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) \right] X = 0$$

$$\therefore X = \frac{\dot{Q}}{F_{A0} \left[ \Delta H_R^\circ(T_R) + \sum_i v_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) \right]}$$

$$T_0 = 100 + 273 = 373\text{K}$$

Neste caso:

$$\begin{aligned} \sum_i v_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) &= (v_A \bar{C}_{pA} + v_B \bar{C}_{pB}) \cdot (T - T_0) = \\ &= (-\bar{C}_{pA} + \bar{C}_{pB}) \cdot (T - T_0) = (-75 + 75) \cdot (T - T_0) = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore X = \frac{\dot{Q}}{F_{A0} \Delta H_R^\circ(T_R)} = \frac{-35700}{10 \times (-15000)} = 0,238$$

Resolução

Balanco de energia:

$$\dot{Q} - F_{A0} \sum_i \theta_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) - F_{A0} \left[ \Delta H_R^o(T_R) + \sum_i v_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) \right] X = 0$$

Operação adiabática:

$$\underbrace{\sum_i \theta_i \bar{C}_{pi} (T - T_0)}_{R(T)} = - \underbrace{\left[ \Delta H_R^o(T_R) + \sum_i v_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) \right] X}_{G(T)}$$

Neste caso:

$$R(T) = C_{pA} (T - T_0) = 75(T - \underset{373K}{T_0})$$

$$G(T) = -\Delta H_R^o X = -\Delta H_R^o \frac{\tau k}{1 + \tau k} =$$
$$= -\Delta H_R^o \frac{\tau k(T_R) e^{-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)}}{1 + \tau k(T_R) e^{-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)}}$$

$$T_0 = 373K$$

Resolução:

Atribuir-se valores a  $T$   
e calcular  $G(T)$  e  $R(T)$

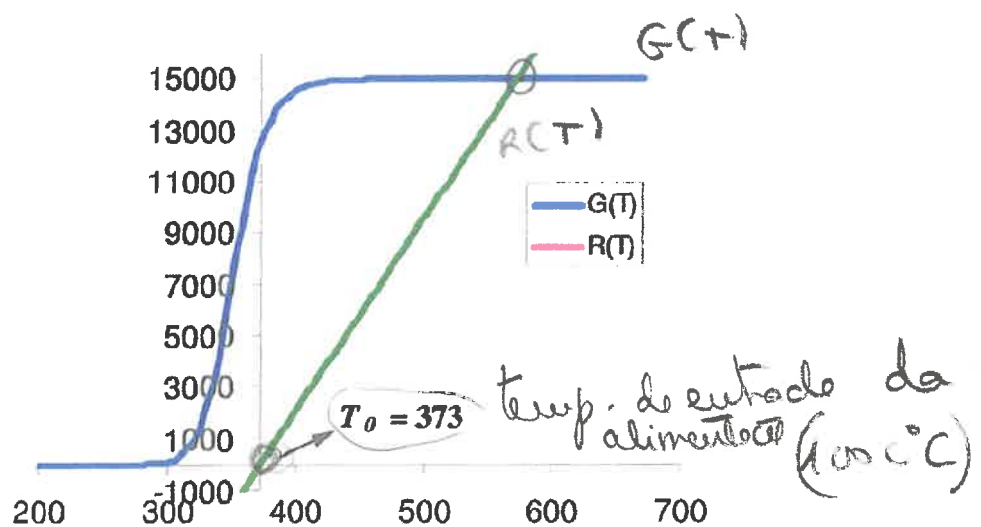
$$v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = \frac{10}{2} = 5 dm^3/min \quad \tau = \frac{V}{v_0} = \frac{5000}{5} = 1000 \text{ min}$$

$$G(T) = -\Delta H_R^o \frac{\tau k(T_R) e^{-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)}}{1 + \tau k(T_R) e^{-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)}} =$$

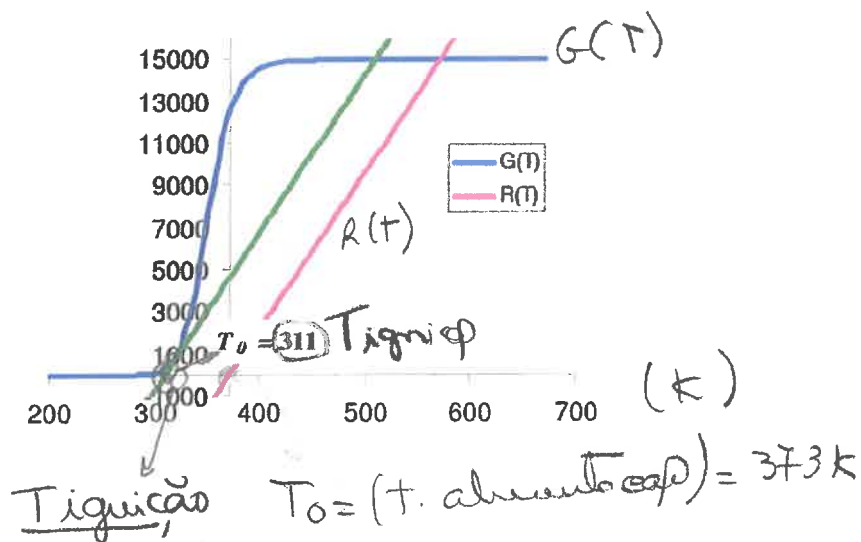
$$= \frac{15000 \times 1000 \times 0.005 \times e^{-\frac{20000}{1.987}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{373}\right)}}{1 + 1000 \times 0.005 \times e^{-\frac{20000}{1.987}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{373}\right)}}$$

$$\therefore G(T) = \frac{75000 e^{-\frac{20000}{1.987}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{373}\right)}}{1 + 5 \times e^{-\frac{20000}{1.987}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{373}\right)}}$$

Graficamente:



Temperatura de ignição:



Temperatura de extinção:

