

# Projeto 1 - EQ502

Abril de 2023

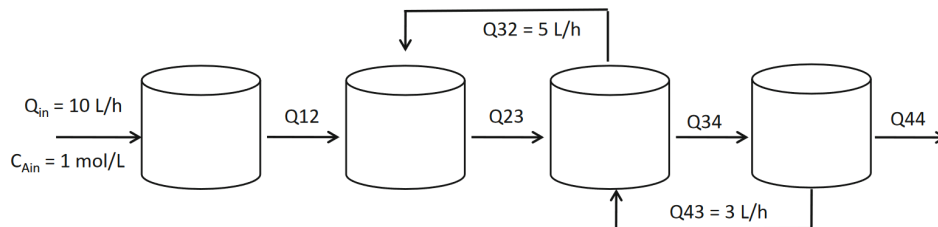
Para a apresentação da resolução deste projeto insira os seguintes arquivos no Moodle com a seguinte nomenclatura `RA1_RA2_Projeto_1.extensao`, em que `extensao` pode variar de acordo com o documento gerado:

- as resoluções feitas em Excel deverão estar contidas em apenas uma planilha com uma aba referente a cada questão. Os comentários podem ser feitos na planilha também;
- as resoluções feitas em Python deverão estar contidas em um único arquivo `.ipynb` (notebook de Python gerado via Colab ou Jupyter). Separe cada questão usando apropriadamente o recurso de texto por marcação. Os comentários podem ser inseridos no mesmo arquivo usando tal recurso;
- se necessitar, os comentários ou resumo de suas resoluções podem ser reunidos em um único documento PDF.

## 1 CSTRs em série com reciclo

Esse problema é adaptado de Chapra e Canale (2005), ao estudar um sistema de quatro CSTRs isolados termicamente nos quais uma reação irreversível de primeira ordem  $A \longrightarrow B$  acontece. Uma solução com reagente A a uma concentração de 1 mol/L alimenta o primeiro reator a uma vazão volumétrica de 10 L/h. Estão presentes reciclos do reator 3 para o reator 2 e do reator 4 para o reator 3, cujas vazões volumétricas são 5 L/h e 3 L/h, respectivamente.

**Figura 1:** CSTRs em série com reciclo.



Os reatores possuem diferentes volumes e operam em temperaturas distintas. A Tabela 1 mostra o volume e a constante de reação para cada reator.

Reator	$V$ (L)	$k$ (1/h)
1	25	0.075
2	75	0.15
3	100	0.4
4	25	0.1

**Tabela 1:** Volume e constante de reação de cada CSTR.

Encontre a concentração do reagente A em cada reator no estado estacionário:

- resolvendo o sistema de equações algébricas lineares usando inversão de matrizes no Excel;
- usando a ferramenta *Solver* do Excel;
- resolvendo o sistema de equações algébricas lineares usando inversão de matrizes em Python;
- usando a função `fsolve` da biblioteca do python `scipy`.

## Sugestão: Rotina em Python para a resolução de um Sistema de EANL

Os próximos exercícios exigirão que sistemas de equações algébricas não lineares de tamanhos diversos (números de equações) sejam resolvidas pelo método de Newton-Raphson, utilizando matriz jacobiana determinada ou analiticamente, ou numericamente. Assim, sugere-se criar uma função em Python para isso que seja independente do número de equações conforme os seguintes passos:

1. Desenvolva uma função em Python denominada `newton_raphson` usada para resolver um sistema de  $n$  equações algébricas não lineares que satisfaça os seguintes requisitos:
  - a. receba como argumentos:
    - uma função que retorne um vetor com o valor de cada uma das  $n$  equações, assim como aquela que é necessária para o método `fsolve`;
    - uma função que retorne a matriz  $n \times n$  jacobiana determinada analítica ou numericamente;
    - um vetor com o chute inicial de cada variável;
    - um critério de parada a ser avaliado ou com a tolerância aplicada a  $f(x)$  ou com o erro relativo estimado;
  - b. retorne a solução do sistema de equações resolvida usando o método de Newton-Raphson e o número de iterações necessário de acordo com o critério de parada definido.
2. Para a determinação da matriz jacobiana  $n \times n$  determinada numericamente, crie uma função denominada `derivada_numerica` que satisfaça os seguintes requisitos:
  - a. receba como argumentos:
    - uma função que retorne um vetor com o valor de cada uma das  $n$  equações, assim como aquela que é necessária para o método `fsolve`;
    - um vetor com o valor das  $n$  variáveis em que a derivada numérica será avaliada;
    - o valor do passo  $h$  usado no cálculo da derivada numérica por diferença progressiva;
  - b. retorne uma matriz jacobiana  $n \times n$  determinada por diferença progressiva a ser usada na resolução da função `newton_raphson`.

## 2 Reação isotérmica em um CSTR

Considere que uma reação irreversível  $A + B \xrightarrow{k} C + D$  acontece em CSTR isotérmico que opera em estado estacionário. A constante de taxa  $k$  é igual a  $0.855 \text{ L/mol} \cdot \text{s}$ . Uma solução com os reagentes A e B foi adicionada ao reator a uma vazão volumétrica  $F$  de  $5 \text{ L/min}$  e a concentrações de A e B iguais a  $0.7$  e  $0.4 \text{ mol/L}$ , respectivamente ( $C_{C_1} = 0.7 \text{ mol/L}$  e  $C_{B_1} = 0.4 \text{ mol/L}$ ). Não há produtos C e D sendo alimentados no reator ( $C_{C_1} = C_{D_1} = 0$ ). A vazão volumétrica na saída também é  $5 \text{ L/min}$  e o volume do líquido dentro do reator permanece igual a  $40 \text{ L}$  durante toda a reação. O modelo que representa este sistema é descrito abaixo:

$$F(C_{A_1} - C_A) - 0.855C_A C_B V = 0 \quad (1)$$

$$F(C_{B_1} - C_B) - 0.855C_A C_B V = 0 \quad (2)$$

$$F(C_{C_1} - C_C) + 0.855C_A C_B V = 0 \quad (3)$$

$$F(C_{D_1} - C_D) + 0.855C_A C_B V = 0 \quad (4)$$

Resolva o sistema de equações que representa esse CSTR e encontre as concentrações de A, B, C e D no estado estacionário:

- a. usando a função `fsolve` da biblioteca do python `scipy`;
- b. usando uma função desenvolvida por você em Python que empregue o método Newton-Raphson com a matriz Jacobiana:
  - i. determinada analiticamente;
  - ii. determinada numericamente.
- c. usando a ferramenta *Solver* do Excel.

### 3 CSTR com jaqueta de resfriamento

Considere o CSTR com uma jaqueta de resfriamento da Figura 2 operando em estado estacionário no qual uma reação exotérmica  $A + B \xrightarrow{k} C$  acontece. Os balanços de massa e de energia que representam esse reator estão reescritas como a seguir:

**Balanco de massa para A (mol/min):**

$$Q(C_{A_{in}} - C_A) - kC_AC_BV = 0 \quad (5)$$

**Balanco de massa para B (mol/min):**

$$Q(C_{B_{in}} - C_B) - kC_AC_BV = 0 \quad (6)$$

**Balanco de massa para C (mol/min):**

$$Q(C_{C_{in}} - C_C) + kC_AC_BV = 0 \quad (7)$$

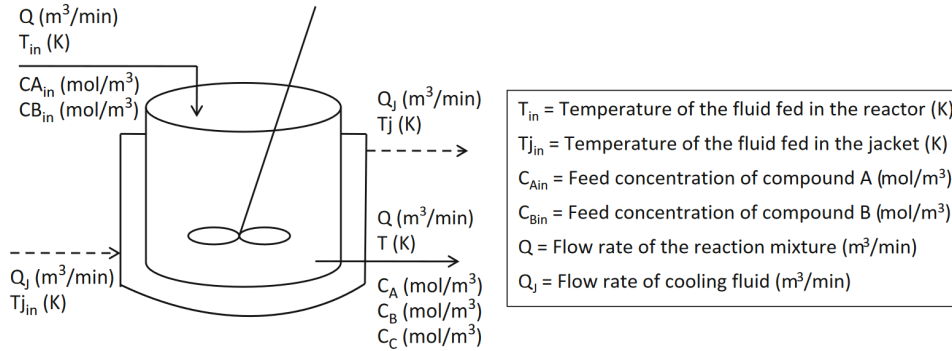
**Balanco de energia para o reator (J/min):**

$$Q\rho c_p(T_{in} - T) + UA(T_j - T) + kC_AC_BV(-\Delta H)_R = 0 \quad (8)$$

**Balanco de energia para o fluido refrigerante (J/min):**

$$Q_j\rho_j c_{pj}(T_{jin} - T_j) + UA(T - T_j) = 0 \quad (9)$$

**Figura 2:** CSTR com jaqueta de resfriamento.



**Tabela 2:** Parâmetros de reação necessários para simular o CSTR.

$\rho$	$C_p$	$A$	$V$	$k_0$	$E_A$	$R$	$\Delta H_R$	$U$
kg/m <sup>3</sup>	J/kg·K	m <sup>2</sup>	m <sup>3</sup>	m <sup>3</sup> /mol·min	J/mol	J/mol·K	J/mol	J/min·m <sup>2</sup> ·K
880	1750	5	40	$8.2 \times 10^5$	48500	8.314	-72800	680

**Tabela 3:** Parâmetros da jaqueta de resfriamento e condições de alimentação.

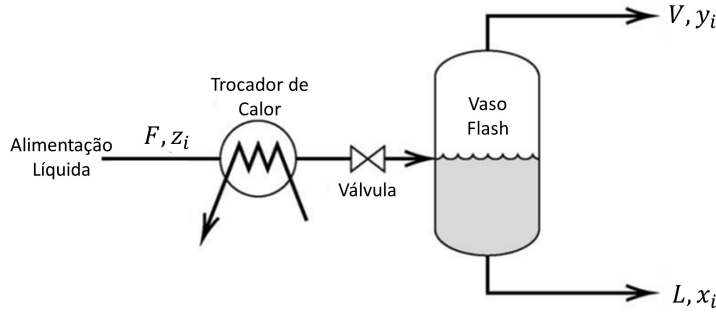
$c_{ji}$	$\rho_j$	$Q$	$Q_j$	$C_{Ain}$	$C_{Bin}$	$C_{Cin}$	$T_{in}$	$T_{jin}$
J/kg·K	kg/m <sup>3</sup>	m <sup>3</sup> /min	m <sup>3</sup> /min	mol/m <sup>3</sup>	mol/m <sup>3</sup>	mol/m <sup>3</sup>	K	K
4180	1000	3	0.01	200	200	0	300	280

Usando os valores numéricos das Tabelas 2 e 3, resolva os sistemas de equações algébricas não lineares a fim de obter as concentrações A, B e C e as temperaturas do reator e da jaqueta de resfriamento no estado estacionário:

- usando a função `fsolve` da biblioteca do python `scipy`;
- usando uma função desenvolvida por você em Python que empregue o método Newton-Raphson com a matriz Jacobiana determinada numericamente;
- usando a ferramenta *Solver* do Excel e observe que esta abordagem não é robusta devido à alta característica não linear do sistema.

## 4 Destilação flash

Os vasos flashs são equipamentos essenciais na indústria química, sendo amplamente utilizados em processos de separação, como destilação, extração, recuperação de solventes, purificação de produtos químicos e separação de misturas azeotrópicas. O funcionamento básico de um vaso flash consiste em alimentar uma mistura líquida aquecida em alta pressão para o vaso e, em seguida, permitir que essa mistura seja rapidamente liberada em uma região de pressão inferior, chamada de zona de flash. A rápida redução de pressão leva à evaporação instantânea dos componentes mais voláteis da mistura, formando um vapor, o qual é separado do líquido remanescente. Um esquema representativo do funcionamento dessa operação unitária é mostrado na Figura 3.



**Figura 3:** Esquema de operação de um vaso flash.

Caso o vaso flash possa ser aproximado por um estágio de equilíbrio total, a composição de saída da fase vapor e da fase líquida podem ser relacionada através do equilíbrio líquido-vapor. Considerando que tanto a fase líquida, quanto a fase vapor, se comportam idealmente, a composição de vapor  $y_i$  se relaciona com a composição do líquido  $x_i$  através da lei de Raoult:

$$y_i = K_i x_i, \quad (10)$$

onde  $K_i$  representa a constante de partição, que é dada pela razão entre a pressão de saturação  $P_i^S$  do componente  $i$  na dada condição e a pressão de operação do flash  $P$ .

Considere que uma alimentação de 100 kmol/h consistindo de 10, 20, 30, e 40 % (base molar) de propano, n-butano, n-pentano, e n-hexano, respectivamente, entra em um vaso flash que opera em  $P = 689,5$  kPa e  $T = 366,5$  K. Assuma equilíbrio, que as fases vapor e líquida são ideais e que a pressão de vapor de cada componente é dada pela equação de Antoine:

$$\log_{10} P_i^S = A - \frac{B}{T + C} \quad (11)$$

em que os parâmetros  $A$ ,  $B$  e  $C$  são dados na Tabela 4.

**Tabela 4:** Parâmetros de Antoine para a pressão de saturação dos hidrocarbonetos abordados. Para usar esse conjunto de constantes,  $T$  deve ser usado em °C e  $P_i^S$  é dado em mmHg.

Componente	A	B	C
Propano	6,82970	813,2008	247,99
n-Butano	6,80897	935,86	238,73
n-Pentano	6,85221	1064,63	232
n-Hexano	6,8776	1171,53	234,366

- Determine as 10 variáveis desconhecidas e as 10 equações necessárias para modelar esse problema? Esse sistema de equações é linear ou não linear? (**Dica:** são necessários um balanço de massa e uma equação de equilíbrio para cada componente, mais uma restrição  $\sum z_i = 1$  para cada fase desconhecida)
- Usando uma função desenvolvida por você em Python que empregue o método Newton-Raphson, determine a fração da alimentação que é vaporizada nesse flash e a composição de cada uma das fases. (**Dica:** é mais prático implementar as derivadas numericamente do que analiticamente, por ser um sistema de equações grande.)
- Problemas de vasos flash isotérmicos com  $N$  componentes também podem ser resolvidos através de uma única equação não linear com o método de Rachford-Rice:

$$\sum_{i=1}^N \frac{z_i (1 - K_i)}{1 + \Psi (K_i - 1)} = 0, \quad (12)$$

onde  $\Psi$  é a fração vaporizada ( $V/F$ ) e é a única variável desconhecida. A partir de  $\Psi$ , a composição da fase líquida e vapor é dada por:

$$x_i = \frac{z_i}{1 + \Psi(K_i - 1)} = 0, \quad (13)$$

$$y_i = \frac{K_i z_i}{1 + \Psi(K_i - 1)} = 0. \quad (14)$$

Implemente a resolução do problema proposto em python utilizando o método de Rachford-Rice e o método de Newton-Raphson.

- d. Como seria a separação dessa mesma mistura nesse mesmo flash caso a temperatura de operação fosse igual a 375 K? E o que aconteceria se a pressão de operação reduzisse para 550 kPa (mantendo a temperatura inicial)?