

- (3) Repita (2) para $V = 5 \text{ m}^3$. (4) Plote Q_r , Q_c e $-r_A$ em função de V para todos os quatro casos no mesmo gráfico e descreva o que você encontrou. (5) Para cada um dos casos de trocador de calor, investigue a adição de um inerte I com calor específico de $500 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$, mantendo F_{A0} constante, ajustando as outras condições de entrada apropriadamente (por exemplo, ϵ). (6) Varie a vazão molar de entrada do composto inerte (isto é, $0,0 < \Theta_I < 3,0 \text{ mol/s}$). Plote X em função de Θ_I e analise os resultados. (7) Finalmente, varie a temperatura do fluido de troca térmica T_{d0} ($1000^\circ\text{F} < T_{d0} < 1350^\circ\text{F}$). Escreva um parágrafo descrevendo o que você encontrou, destacando qualquer perfil ou resultado interessante.

Exemplo 12-2. Formulação em AspenTech. Repita o item P12-2(b) usando o software AspenTech.

Exemplo 12-3. Descreva como suas respostas mudariam se a vazão molar de metanol fosse aumentada 4 vezes.

Exemplo 12-4. Outros dados mostram que $\Delta H_{R_A} = -38.700 \text{ Btu/lbmol}$ e $C_{pA} = 29 \text{ Btu/(lbmol}\cdot\text{F)}$. Como esses valores mudariam seus resultados? Faça um gráfico da conversão em função da área de troca térmica [$0 < A < 200 \text{ ft}^2$].

Exemplo 12-5. Como os seus resultados mudariam se houvesse (1) uma perda de carga com $\alpha = 1,05 \text{ dm}^{-3}$; (2) reação (1) é reversível com $K_c = 10$ a 450 K ; (3) Como a seletividade mudaria se U_A aumentasse? E se diminuísse?

Exemplo 12-6. (1) Varie T_{d0} para fazer um gráfico da temperatura do reator, T , em função de T_{d0} . Quais são as temperaturas de extinção e ignição? (2) Varie τ entre $0,1$ e $0,001 \text{ min}$ e descreva o que você encontrou. (3) Varie U_A entre 4.000 e $400.000 \text{ J/(min}\cdot\text{K)}$ e descreva o que você encontrou.

Exemplo 12-7. (1) **Segurança.** Plote Q_r e Q_c em função de V . Como você poderia manter a temperatura abaixo de 700 K ? A adição de inerte iria ajudar? Se a resposta for sim, qual seria a vazão se $C_{pI} = 10 \text{ cal/mol}\cdot\text{K}$? (2) Veja os gráficos. O que aconteceu com a espécie D? (3) Faça uma tabela da temperatura (por exemplo, T máxima, T_0) e vazão molar para dois ou três volumes, comparando as diferentes formas de operação com trocador de calor. (4) Como você explica que a vazão molar de C não passa por um máximo? Varie alguns dos parâmetros para verificar se em alguma condição ela passa por um máximo. Comece aumentando F_{A0} com um fator de 5 vezes. (5) Inclua pressão neste problema. Varie o parâmetro de perda de carga ($0 < \alpha p_0 < 0,0999 \text{ dm}^{-3}$) e descreva o que você encontrou.

SITE DA LTC EDITORA SO. Exemplo PRS-R12-4-1. Carregue o programa LEP R12-1 sobre a oxidação do SO_2 . Como seus resultados mudariam se (1) o diâmetro da partícula de catalisador fosse reduzido à metade? (2) se a pressão dobrasse? Para qual tamanho de partícula, a perda de carga começa a ser um problema, para uma mesma massa total de catalisador, assumindo que a porosidade não muda? (3) se você variasse a temperatura inicial e a temperatura do fluido refrigerante? Escreva um parágrafo descrevendo o que você encontrou.

(j) SACHE. Vá ao site do SACHE: www.sache.org. No menu do lado esquerdo, selecione "SACHE Products" (Produtos SACHE). Após, selecione "All" (Todos), dê entrada e vá ao módulo "Safety, Health and Environment" (S, H & E) (Segurança, Saúde e Ambiente). Os problemas são de KINETICS (CINÉTICA) (isto é, ERQ). Há alguns problemas marcados com "K" e explicações em cada uma das seções S, H & E. Soluções para os problemas estão em uma diferente seção do site. Veja, especificamente: *Loss of Cooling Water* (K-1) (Perda de Água de Refrigeração), *Runaway Reactions* (HT-1) (Reações Fora de Controle), *Design of Relief Valves* (D-2) (Projeto de Válvulas de Alívio de Pressão), *Temperature Control* and *Runway* (K-4) e (K-5) (Controle de Temperatura e Situação Fora de Controle), e *Runway and the Critical Temperature Regime* (K-7) (Situação Fora de Controle e Região de Temperatura Crítica). Estude os problemas K e escreva um parágrafo sobre o que você aprendeu. Seu professor, ou o chefe do departamento, devem ter o nome de usuário e senha de acesso ao site do SACHE, para que assim você possa obter o módulo com os problemas.

P12-3_h Carregue o programa LEP 12-T12-3 com a Tabela T12-2 do site da LTC Editora para reação exotérmica reversível, com temperatura variável do fluido refrigerante. As reações elementares



mostram os seguintes valores dos parâmetros para o caso base:

$$E = 25 \text{ kcal/mol}$$

$$C_{pA} = C_{pB} = C_{pC} = 20 \text{ cal/mol}\cdot\text{K}$$

$$\Delta H_{R_A} = -20 \text{ kcal/mol}$$

$$C_{pI} = 40 \text{ cal/mol}\cdot\text{K}$$

$$k = \frac{0,004 \text{ dm}^6}{\text{mol} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}} @ 310 \text{ K} \quad \frac{U_A}{p_b} = 0,5 \frac{\text{cal}}{\text{kg} \cdot \text{s} \cdot \text{K}} \quad T_0 = 330 \text{ K}$$

$$K_c = 1000 @ 303 \text{ K}$$

$$T_d = 320 \text{ K}$$

$$\alpha = 0,0002 / \text{kg}$$

$$\dot{m}_c = 1,000 \text{ g/s}$$

$$F_{A0} = 5 \text{ mol/s}$$

$$C_{pI} = 18 \text{ cal/g}\cdot\text{K}$$

$$C_{T0} = 0,3 \text{ mol/dm}^3$$

$$\Theta_I = 1$$

Varie os seguintes parâmetros nas faixas mostradas nas Partes (a) a (i). Escreva um parágrafo descrevendo as tendências que você encontrou para cada parâmetro que foi variado e por que elas têm as formas que foram obtidas. Use o caso base para os parâmetros não variáveis. [Dica: Veja *AutoTérmico* e *Libro-Texto* nas *Notas de Resumo* do Capítulo 12 do site da LTC Editora.]

(a) F_{A0} : $1 \leq F_{A0} \leq 8 \text{ mol/s}$

(b) Θ_I : $0,5 \leq \Theta_I \leq 4$

Nota: O programa contém $\Theta_I = 1,0$. Portanto, quando você variar Θ_I , precisará considerar o aumento ou redução de C_{T0} porque a concentração total, C_{T0} , é constante.

(c) $\frac{U_A}{p_b}$: $0,1 \leq \frac{U_A}{p_b} \leq 0,8 \frac{\text{cal}}{\text{kg} \cdot \text{s} \cdot \text{K}}$

(d) T_d : $310 \text{ K} \leq T_d \leq 350 \text{ K}$

(e) T_0 : $300 \text{ K} \leq T_0 \leq 340 \text{ K}$

(f) \dot{m}_c : $1 \leq \dot{m}_c \leq 1000 \text{ g/s}$

(g) Repita (f) para o caso de fluido refrigerante em contracorrente.

(h) Determine a conversão para um CSTR com leite fluidizado de 5000 kg em que $U_A = 500 \text{ cal/(s}\cdot\text{K)}$ com $T_d = 320 \text{ K}$ e $p_b = 2 \text{ kg/m}^2$.

(i) Repita (a), (b) e (d) como se a reação fosse endotérmica com $K_c = 0,01$ a 303 K e $\Delta H_{R_A} = +20 \text{ kcal/mol}$.

Carregue os Jogos Iterativos de Computador (ICG) do DVD-ROM, indicados nos itens (a) e (b). Execute cada jogo e então anote o seu número de desempenho para o módulo; ele identifica o seu nível de aprendizagem do material. **Observação:** Para a simulação (b), faça apenas os três primeiros reatores, pois o Reator 4 e outros casos de número maior não funcionam.

(a) ICG Efeitos Térmicos no Basquetebol 1 Desempenho n° _____

(b) ICG Simulação de Efeitos Térmicos 2 Desempenho n° _____

Problema de Segurança O texto que segue é uma passagem de *The Morning News*, Wilmington, Delaware (3 de agosto de 1977): "Investigadores penetraram os escombros da explosão em busca da causa [que destruiu a nova planta de óxido nítrico]. Um porta-voz da empresa disse que a explosão [fatal] provavelmente foi causada por outro gás – nitrato de amônio – usado na produção de óxido nítrico." Uma solução contendo 83% (m/m) de nitrato de amônio e 17% de água é alimentada a 200°F ao CSTR, que é operado na temperatura de 510°F . Nitrato de amônio derretido se decompõe diretamente a óxido nítrico gasoso e vapor d'água. Acredita-se que flutuações na pressão foram observadas no sistema e, como resultado disso, a alimentação de nitrato de amônio derretido ao reator pode ter sido interrompida 4 min antes da explosão.

Assuma que, no momento em que a alimentação do CSTR foi interrompida, havia 500 lb_m de nitrato de amônio no reator. Acredita-se que a conversão do reator seja praticamente completa, aproximadamente $99,99\%$.

Informações adicionais (aproximadas, mais próximas do caso real):

$$\Delta H_{R_A} = -336 \text{ Btu/lb}_m \text{ de nitrato de amônio a } 500^\circ\text{F (constante)}$$

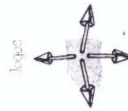
$$C_{pI} = 0,38 \text{ Btu/(lb}_m \cdot ^\circ\text{F)} \text{ de nitrato de amônio } ^\circ\text{F)}$$

$$C_{pV} = 0,47 \text{ Btu/(lb}_m \cdot ^\circ\text{F)} \text{ de vapor } ^\circ\text{F)}$$

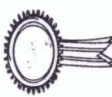
$$-r_A V = k C_A V = k \frac{M}{V} V = k M (\text{lb}_m/\text{h})$$



Mãos de Resposta



Labovitch de Computador



Galvão da Trava

em que M é a massa de nitrato de amônio no CSTR (lb_m) e k é dada pela relação

T ($^{\circ}\text{F}$)	510	560
k (h^{-1})	0,307	2,912

As entalpias da água líquida e vapor são

$$H_w(200^{\circ}\text{F}) = 168 \text{ Btu/lb}_m$$

$$H_g(500^{\circ}\text{F}) = 1202 \text{ Btu/lb}_m$$

- (a) Você é capaz de explicar a causa da explosão? [Dica: Veja o Problema P13-3.]
 (b) Se a vazão de alimentação do reator antes do desligamento fosse 310 lb_m de solução por hora, qual era a temperatura exata do reator no instante precedente à sua parada? [Dica: Plote Q_c e Q_g em função da temperatura no mesmo gráfico.]
 (c) Como você daria a partida ou desligaria e controlaria tal reação?
 (d) Explore este problema e descreva o que você encontrou. [Por exemplo, acrescente um trocador de calor $UA(T - T_c)$, escolha os valores de UA e T_c e então plote $R(T)$ em função de $G(T)$.]
 (e) Discuta o que você acredita que seja o objetivo deste problema. A ideia deste problema surgiu de um artigo escrito por Ben Horowitz.

P12-6_b A reação endotérmica elementar em fase líquida

$$A + B \rightarrow 2C$$

é conduzida, substancialmente até se completar, em um único reator contínuo de mistura perfeita, com jaqueta térmica a vapor (Tabela P12-6_b). Calcule a temperatura do reator em regime permanente, utilizando os dados que seguem:

Volume do reator: 125 gal

Área de troca térmica da jaqueta de vapor: 10 ft^2

Vapor da jaqueta: 150 psi (temperatura de saturação: 365,9 $^{\circ}\text{F}$)

Coefficiente global de troca térmica da jaqueta, U : 150 $\text{Btu}/(\text{h}\cdot\text{ft}^2\cdot^{\circ}\text{F})$

Potência do eixo de agitação: 25 hp

Calor de reação, $\Delta H_{Rx} = +20.000 \text{ Btu/lbmol}$ de A (independente da temperatura)

TABELA P12-6_b CONDIÇÕES E PROPRIEDADES DA ALIMENTAÇÃO

	Componentes		
	A	B	C
Alimentação (lbmol/h)	10,0	10,0	0
Temperatura de alimentação ($^{\circ}\text{F}$)	80	80	—
Calor específico ($\text{Btu/lbmol}\cdot^{\circ}\text{F}$)	51,0	44,0	47,5
Massa molar	128	94	111
Massa específica (lb_m/ft^3)	63,0	67,2	65,0

*Independente da temperatura. [Resposta: $T = 199^{\circ}\text{F}$]

(Cortesia: California Board of Registration for Professional & Land Surveyors.)

P12-7_A Use os dados do Problema P11-3_A para as seguintes questões:
 Informações adicionais

$$Ua = 20 \text{ cal}/(\text{m}^2\cdot\text{s}\cdot\text{K}) \quad \dot{m}_c = 50 \text{ g/s}$$

$$T_{c0} = 450 \text{ K} \quad C_{p,c} = 1 \text{ cal}/\text{g}\cdot\text{K}$$

- (a) Calcule a conversão quando a reação é conduzida adiabaticamente em um CSTR de 500 dm^3 e, então, compare os resultados quando há dois reatores CSTR em série, cada um de 250 dm^3 .

A reação reversível (Parte (d) do P11-3_A) agora é conduzida em um PFR com trocador de calor. Plote e então analise X , X_c , T , T_c , Q_c , Q_g e a velocidade $-r_A$ para os seguintes casos:

- (b) Temperatura constante do fluido de troca térmica, T_c
 (c) Trocador de calor cocorrente, T_c
 (d) Trocador de calor contracorrente, T_c

(e) Operação adiabática

- (f) Faça uma tabela comparando todos os seus resultados (por exemplo, X , X_c , T , T_c). Escreva um parágrafo descrevendo o que você encontrou.

(g) Plote Q_c e T_c em função de V , em condições de manter operação isotérmica. Para a reação



e os dados do Problema P11-6_b desenvolva as seguintes atividades: Plote e então analise os perfis de X , X_c , T , T_c e de velocidade de reação ($-r_A$) em um PFR, para os casos de (a) a (f). Em cada caso, explique por que as curvas têm as formas com que foram obtidas.

(a) Trocador de calor cocorrente

(b) Trocador de calor contracorrente

(c) Temperatura constante do fluido de troca térmica, T_c

(d) Compare e contraste cada um dos resultados dos itens (a), (b) e (c) com os resultados de operação adiabática (por exemplo, faça uma tabela de X e X_c obtidos em cada caso).

(e) Varie alguns parâmetros, por exemplo, ($\theta < \theta_1 < 10$), e descreva o que você encontrar.

(f) Plote Q_c e T_c em função de V , em condições de manter operação isotérmica. Repita o Problema P11-7_b com a reação



Plote X , X_c , T , T_c e $-r_A$ ao longo do comprimento do PFR, para os casos:

(a) Trocador de calor cocorrente

(b) Trocador de calor contracorrente

(c) Temperatura constante do fluido de troca térmica, T_c

(d) Compare e contraste os resultados para os itens (a), (b) e (c), juntamente com aqueles do caso de operação adiabática, e escreva um parágrafo descrevendo o que você encontrou.

P12-10_b Use os dados e a reação do Problema P11-3_A para as seguintes situações:

(a) Plote e analise os perfis de conversão, Q_c , Q_g e de temperatura para um reator PFR de 10 dm^3 para o caso em que a reação é reversível com $K_c = 10 \text{ m}^3/\text{kmol}$ a 450 K. Plote e então analise o perfil de concentração de equilíbrio.

(b) Repita (a) incluindo um trocador de calor, $Ua = 20 \text{ cal}/(\text{m}^2\cdot\text{s}\cdot\text{K})$, e com temperatura constante do fluido refrigerante, $T_{c0} = 450 \text{ K}$.

(c) Repita (b) para ambos os casos contracorrente e cocorrente de um trocador de calor. A vazão do fluido refrigerante é 50 g/s, $C_{p,c} = 1 \text{ cal}/\text{g}\cdot\text{K}$, e a temperatura de alimentação do fluido refrigerante é $T_{c0} = 450 \text{ K}$. Varie a vazão do fluido de refrigeração ($10 < \dot{m}_c < 1000 \text{ g/s}$).

(d) Plote Q_c e T_c em função de V , em condições de manter operação isotérmica.

(e) Compare as suas respostas de (a) a (d) e descreva o que você encontrou. Quais generalizações podem ser feitas?

(f) Repita (c) e (d) quando a reação é irreversível, mas endotérmica, com $\Delta H_{Rx} = 6000 \text{ cal/mol}$. Escolha $T_{c0} = 450 \text{ K}$.

P12-11_b Use os dados do Problema P11-4_A para o caso em que calor é removido por um trocador de calor do tipo jaqueta. A vazão de fluido refrigerante através da jaqueta térmica é suficientemente alta para manter a temperatura ambiente do trocador a $T_c = 50^{\circ}\text{C}$.

(a) Plote e então analise os perfis de temperatura, conversão, Q_c e Q_g para um PFR com

$$Ua = 0,08 \frac{\text{J}}{\text{s}\cdot\text{kg cat}\cdot\text{K}}$$

em que

ρ_b = massa específica do leito de catalisador (kg/m^3)

a = área de troca de calor por unidade de volume do reator (m^2/m^3)

U = coeficiente global de troca térmica ($\text{J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot\text{K})$)

(2) Como os perfis mudariam se o valor de Ua/ρ_b fosse aumentado por um fator de 3000?

(3) E se houvesse uma perda de carga com $\alpha = 0,019 \text{ kg}^{-1/2}$?

(b) Repita a parte (a) para trocador de calor com escoamento cocorrente e contracorrente, e operação adiabática com $\dot{m}_c = 0,2 \text{ kg/s}$, $C_{p,c} = 5000 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ e temperatura de entrada do fluido refrigerante a 50°C .

- (c) Encontre X e T para um CSTR “fluidizado” [veja a figura ao lado] com 80 kg de catalisador.

$$U/A = 500 \frac{\text{J}}{\text{s} \cdot \text{K}}, \quad \rho_b = 1 \text{ kg/m}^3$$

- (d) Repita as partes (a) e (b) para $W = 80.0 \text{ kg}$, admitindo uma reação reversível com uma velocidade específica da reação reversa de

$$k_r = 0.2 \exp \left[\frac{E_r}{R} \left(\frac{1}{450} - \frac{1}{T} \right) \right] \left(\frac{\text{dm}^6}{\text{kg cat} \cdot \text{mol} \cdot \text{s}} \right); \quad E_r = 51.4 \text{ kJ/mol}$$

Varie a temperatura de entrada, T_0 , e descreva o que foi encontrado.

- (e) Utilize ou modifique os dados deste problema para sugerir outra questão ou cálculo. Explique por que sua questão requer pensamento crítico ou criativo. Veja no Prefácio as Seções B.2 e B.3, e o site <http://www.engin.umich.edu/scps>.

P12-12. Deduza o balanço de energia para um reator de membrana de leito de recheio. Aplique o balanço à reação do problema P11-4_b para o caso em que a reação é reversível com $K_c = 1.0 \text{ mol/dm}^3$ a 300 K. A espécie C difunde-se para fora da membrana com $k_c = 1.5 \text{ s}^{-1}$.

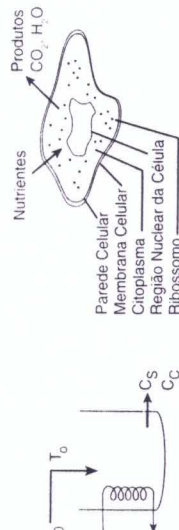
- (a) Plote e analise os perfis de concentração para diferentes valores de K_c quando a reação é conduzida adiabaticamente.

- (b) Repita a parte (a) para a condição em que o coeficiente de troca térmica seja $Ua = 30 \text{ J/(s} \cdot \text{kg cat} \cdot \text{K)}$ com $T_0 = 50^\circ \text{C}$.

P12-13. A reação da biomassa



é conduzida em um quimiostato de 6 dm^3 com trocador de calor.



A vazão volumétrica é $1 \text{ dm}^3/\text{h}$ e a concentração de substrato na entrada e a temperatura são, respectivamente, 100 g/dm^3 e 280 K . A velocidade de crescimento em função da temperatura é dada por Aiba et al. Equação (9-63):

$$r_g = \mu C_C$$

e

$$-r_S = r_g / Y_{CS}$$

$$\mu(T) = \mu(310 \text{ K}) \left[\frac{0.0038 \cdot T \cdot \exp[21.6 - 6700/T]}{1 + \exp[153 - 48000/T]} \right] \frac{C_S}{K_S + C_S} \quad (\text{P12-14.1})$$

- (a) Plote $G(T)$ e $R(T)$ para operação adiabática e para operação não adiabática, neste caso assumindo uma vazão de fluido refrigerante muito alta (isto é, $\dot{Q} = UA(T_0 - T)$ com $A = 1.1 \text{ m}^2$ e $T_0 = 290 \text{ K}$).

- (b) Qual deveria ser a área de troca de calor utilizada para maximizar a concentração de células na saída, no caso de a temperatura de alimentação ser 288 K ? Água de refrigeração é disponível a 290 K , com vazão de até 1 kg/min .

- (c) Identifique a presença de quaisquer múltiplos regimes estacionários e os discuta tendo em vista o que você aprendeu neste capítulo. [Dica: Plote T_0 em função de T_0 da Parte (a).]

- (d) Varie T_0 , m , e T_0 e descreva o que foi encontrado.

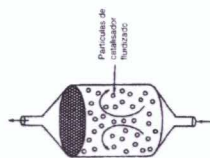
Informações adicionais

$$Y_{CS} = 0.8 \text{ g células/g substrato}, \quad C_1 = C_{s0} Y_{CS} X$$

$$K_S = 5.0 \text{ g/dm}^3$$

$$\mu_{\max} = 0.5 \text{ h}^{-1} \text{ (note que } \mu = \mu_{\max} \text{ a } 310 \text{ K)}$$

$$C_{r_3} = \text{Calor específico da solução incluindo todas as células} = 5 \text{ J/(g} \cdot \text{K)}$$



m_s = Massa da solução do substrato no quimiostato = 6.0 kg

$$\Delta H_{Rk} = -20,000 \text{ J/g célula}$$

$$U = 50,000 \text{ J/(h} \cdot \text{K} \cdot \text{m}^2)$$

$$C_{p_1} = \text{Calor específico da água de refrigeração } 5 \text{ J/(g} \cdot \text{K)}$$

$$m_c = \text{vazão do fluido de refrigeração (até } 60,000 \text{ kg/h)}$$

$$\rho_s = \text{massa específica da solução} = 1 \text{ kg/dm}^3$$

$$\text{Nota:} \quad \dot{Q} = m_c \dot{C}_{p_1} [T - T_0] \left[1 - e^{-\frac{UA}{m_c C_{p_1}}} \right]$$

P12-14. A reação irreversível



é conduzida adiabaticamente em um CSTR. As curvas do “calor gerado” $G(T)$ e do “calor removido” $R(T)$ são mostradas na Figura P12-14.

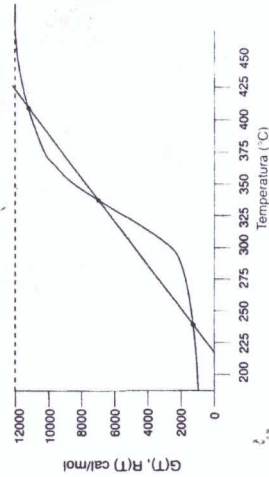


Figura P12-14. Curvas do calor removido $R(T)$ e calor gerado $G(T)$.

- (a) Qual é o ΔH_{Rk} da reação?
(b) Quais são as temperaturas de alimentação de ignição e de extinção?
(c) Quais são todas as temperaturas de operação do reator correspondentes às temperaturas de alimentação de ignição e de extinção?

- (d) Quais são as conversões nas temperaturas de ignição e extinção?
P12-15. A reação irreversível exotérmica, de primeira ordem, em fase líquida,



é conduzida em um CSTR com trocador de calor. A espécie A e um inerte I são alimentados ao reator em proporções equimolares. A vazão molar de alimentação de A é 80 mol/min .

Informações adicionais

$$\text{Calor específico do inerte: } 30 \text{ cal/(mol} \cdot ^\circ\text{C)}$$

$$\Delta H_{Rk} = -7500 \text{ cal/mol}$$

$$\text{Calor específico de A e B: } 20 \text{ cal/(mol} \cdot ^\circ\text{C)}$$

$$U/A: 8000 \text{ cal/(min} \cdot ^\circ\text{C)}$$

$$k = 6.6 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1} \text{ a } 350 \text{ K}$$

$$E = 40,000 \text{ cal/(mol} \cdot \text{K)}$$

$$\text{Temperatura ambiente, } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de extinção: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de ignição: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de extinção: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de ignição: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de extinção: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de ignição: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de extinção: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de ignição: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de extinção: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de ignição: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de extinção: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de ignição: } T_0: 300 \text{ K}$$

$$\text{Temperatura de extinção: } T_0: 300 \text{ K}$$

- (a) Deduza uma expressão (ou série de expressões) para calcular $G(T)$ em função do calor de reação, constante de equilíbrio, temperatura e outras variáveis. Mostre como calcular $G(T)$ a $T = 400$ K.
- (b) Quais são as temperaturas de regime estacionário? [Resposta: 310, 377 e 418 K.]
- (c) Quais regimes estacionários são localmente estáveis?
- (d) Qual a conversão correspondente ao regime estacionário superior?
- (e) Varie a temperatura ambiente T_0 e faça um gráfico da temperatura do reator em função de T_0 , identificando as temperaturas de ignição e extinção.
- (f) Se o trocador de calor no reator falha repentinamente (isto é, $UA = 0$), qual seria a conversão e qual a temperatura do reator, quando o novo regime estacionário superior fosse atingido? [Resposta: 431 K.]
- (g) Qual coeficiente de troca térmica UA dará a máxima conversão?
- (h) Escreva uma questão que necessite de raciocínio crítico e então explique por que a sua questão requer raciocínio crítico. [Dica: Veja Prefácio, Seção B.2.]
- (i) Qual é a vazão de extinção, v_0 , para operação adiabática [condição que $R(T)$ passa pelo máximo de $G(T)$]?
- (j) Suponha que você queira operar o reator no regime estacionário inferior. Quais valores dos parâmetros você sugeriria para evitar uma reação fora de controle, por exemplo, o regime estacionário superior?

Informações adicionais

$$\begin{aligned}
 UA &= 3600 \text{ cal} \cdot \text{min} \cdot \text{K} & E/R &= 20.000 \text{ K} \\
 C_{pA} &= C_{pB} = 40 \text{ cal/mol} \cdot \text{K} & V &= 10 \text{ dm}^3 \\
 \Delta H_{RX}^0 &= -80.000 \text{ cal/mol A} & v_0 &= 1 \text{ dm}^3/\text{min} \\
 K_C &= 100 \text{ a } 400 \text{ K} & F_{A0} &= 10 \text{ mol/min} \\
 k &= 1 \text{ min}^{-1} \text{ a } 400 \text{ K}
 \end{aligned}$$

P12-17. A reação irreversível de primeira ordem, em fase líquida, Temperatura ambiente $T_0 = 37^\circ\text{C}$ Temperatura de alimentação, $T_0 = 37^\circ\text{C}$

A \rightarrow B

é conduzida em um reator CSTR com jaqueta térmica. A espécie A pura é alimentada ao reator na vazão de 0,5 g/mol/min. A curva do calor gerado para esta reação e sistema reacional,

$$G(T) = \frac{-\Delta H_{RX}^0}{1 + 1/(T\bar{k})}$$

é mostrada na Figura P12-17.

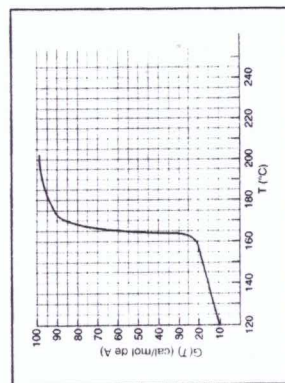


Figura P12-17. Curva $G(T)$.

- (a) Em qual temperatura de alimentação o fluido deve ser preaquecido para que o reator opere com alta conversão? [Resposta: $T_0 \geq 214^\circ\text{C}$.]
- (b) Qual é a temperatura correspondente do fluido no CSTR a essa temperatura de alimentação? [Resposta: $T_s = 164^\circ\text{C}$, 184°C .]
- (c) Suponha que o fluido agora seja aquecido 5°C acima da temperatura da parte (a) e então resfriado 10°C , e depois permanece nesta temperatura. Qual será a conversão? [Resposta: $X = 0,9$.]
- (d) Qual é a temperatura de extinção para este sistema reacional? [Resposta: $T_0 = 160,7^\circ\text{C}$.]

- (e) Escreva uma questão que requiera raciocínio crítico e então explique por que sua questão requer raciocínio crítico. [Dica: Veja Prefácio, Seção B.2.]

Informações adicionais

A curva $G(T)$ para esta reação é mostrada na Figura P12-17.

Calor de reação (constante): $-100 \text{ cal/(mol de A)}$

Calor específico de A e B: $2 \text{ cal/(mol} \cdot ^\circ\text{C)}$

UA : $1 \text{ cal/(min} \cdot ^\circ\text{C)}$; Temperatura ambiente, T_0 : 100°C

P12-18. A reação reversível em fase líquida

A \rightleftharpoons B

é conduzida em um CSTR de 12 dm^3 com trocador de calor. A temperatura de entrada, T_0 , e a temperatura do fluido de troca térmica, T_s , são iguais a 330 K . Uma mistura equimolar de A e inerte são alimentados ao reator.

- (a) Qual o valor do produto do coeficiente de troca térmica pela área de troca térmica (UA) que levaria a máxima conversão?

- (b) Qual a conversão máxima?

Informações adicionais

$$C_{pA} = C_{pB} = 100 \text{ cal/(mol} \cdot \text{K)}, \quad C_{pI} = 150 \text{ cal/(mol} \cdot \text{K)}$$

$$F_{A0} = 10 \text{ mol/h}, \quad C_{A0} = 1 \text{ mol/dm}^3, \quad v_0 = 10 \text{ dm}^3/\text{h}$$

$$\Delta H_{RX}^0 = -42.000 \text{ cal/mol}$$

$$k = 0,001 \text{ h}^{-1} \text{ a } 300 \text{ K com } E = 30.000 \text{ cal/mol}$$

$$K_C = 5.000.000 \text{ a } 300 \text{ K}$$

P12-19. A reação elementar em fase gasosa

2A \rightarrow C

é conduzida em um reator de leito de recheio (PBR). A espécie A pura entra no reator a 450 K , com vazão de 10 mol/s e concentração de $0,25 \text{ mol/dm}^3$. O PBR contém 90 kg de catalisador e é envolvido por um trocador de calor, com fluido refrigerante disponibilizado a 500 K . Compare a conversão alcançada para os quatro tipos de operações com o trocador de calor: adiabática, T_0 constante, escoamento cocorrente e escoamento contracorrente.

Informações adicionais

$$\alpha = 0,019/\text{kg cat.}$$

$$UA/p_s = 0,8 \text{ J/(kg cat.} \cdot \text{K)}$$

$$\Delta H_{RX}^0 = -20.000 \text{ J/mol}$$

$$C_{pA} = 40 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$C_{pC} = 20 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$F_{A0} = 10 \text{ mol/h}$$

$$C_{A0} = 1 \text{ mol/dm}^3$$

$$v_0 = 10 \text{ dm}^3/\text{h}$$

P12-20. A reação é conduzida em um reator de leito de recheio como mostra a Figura P12-20.

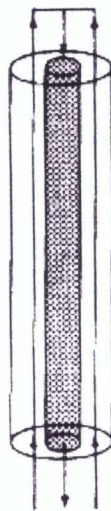


Figura P12-20. PBR com trocador de calor.

Os reagentes entram num espaço anular entre uma tubulação exterior termicamente isolada e um tubo interno contendo o catalisador. Nenhuma reação ocorre na região de fluxo anular. Calor é transferido ao longo do reator entre os gases na região do reator de leito de recheio e o gás que escoia em contracorrente no espaço anular. O coeficiente

de troca térmica global é $5 \text{ W/(m}^2\text{K)}$. Plote a conversão e a temperatura em função do comprimento do reator para os dados fornecidos em

(a) Problema P11-3.

(b) Problema P12-10_b (a).

P12-21_b As reações irreversíveis em fase líquida



$$r_{1C} = k_{1C} C_A C_B$$

$$r_{2D} = k_{2D} C_B C_C$$

são conduzidas em um PFR com trocador de calor. Os perfis de temperatura da Figura P12-21_b foram obtidos para o meio reacional e para o fluido refrigerante.

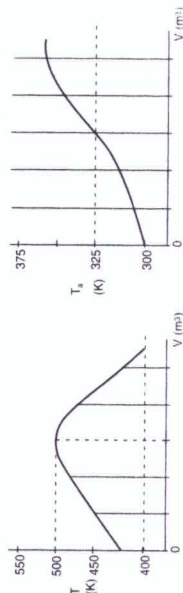


Figura P12-21_b Perfis de temperaturas do meio reacional T e do fluido refrigerante T_r .

As concentrações de A, B, C e D foram medidas no ponto do reator no qual a temperatura do líquido do meio reacional, T , atinge um máximo, e esses valores são $C_A = 0,1$; $C_B = 0,2$; $C_C = 0,5$ e $C_D = 1,5$, todos em mol/dm^3 . O produto do coeficiente de troca térmica global pela área de troca térmica por unidade de volume do reator, UA , é $10 \text{ cal/(s} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K)}$.

Informações adicionais

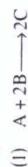
$$C_{pA} = C_{pB} = C_{pC} = 30 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$$

$$C_{pD} = 90 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}, C_{pI} = 100 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$$

$$\Delta H_{R1A} = -50.000 \text{ cal/mol A} \quad k_{1C} = 0,043 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ a } 400 \text{ K}$$

$$\Delta H_{R2B} = +5000 \text{ cal/mol B} \quad k_{2D} = 0,4 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} e^{\frac{5000 \text{ K}}{500} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{500} \right)}$$

P12-22_b (a) Qual é a energia de ativação da Reação (1)?
(b) A reação elementar em fase líquida



é conduzida adiabaticamente em um PFR de 10 dm^3 . Depois que as correntes A e B são misturadas, a espécie A entra no reator com concentração de $C_{A0} = 2 \text{ mol/dm}^3$ e a espécie B com concentração de 4 mol/dm^3 . A vazão volumétrica de alimentação é $10 \text{ dm}^3/\text{s}$.

Admitindo que você pudesse variar a temperatura de entrada entre 300 e 600 K , qual temperatura de entrada seria recomendada para maximizar a concentração da espécie C na saída do reator? ($\pm 25 \text{ K}$). Assuma que todas as espécies tenham a mesma massa específica.

Informações adicionais

$$C_p = C_B = 20 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}, C_{pI} = 60 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}, C_{pD} = 80 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$$

$$\Delta H_{R1A} = 20.000 \text{ cal/mol A}, \Delta H_{R2A} = -10.000 \text{ cal/mol A}$$

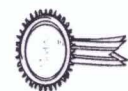
$$k_A = 0,001 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ a } 300 \text{ K} \quad \text{com } E = 5000 \text{ cal/mol}$$

$$k_{2A} = 0,001 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ a } 300 \text{ K} \quad \text{com } E = 7500 \text{ cal/mol}$$



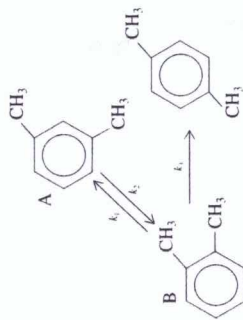
Problemas Propostos

Inscrição
Pendente para
Problema da
Galeria da
Fama



Problemas Propostos

P12-23_c (*Múltiplas reações com efeitos térmicos*) O xileno possui três principais isômeros: *m*-xileno, *o*-xileno e *p*-xileno. Quando *o*-xileno escorrega sobre o catalisador Criotita, as seguintes reações elementares são observadas. A reação que forma *p*-xileno é irreversível:



A alimentação do reator é equimolar em *m*-xileno e *o*-xileno (espécies A e B, respectivamente). Para uma vazão total de alimentação de 2 mol/min e as condições reacionais indicadas a seguir, plote a temperatura e a vazão molar de uma das espécies, em função da massa de catalisador, até 100 kg .

(a) Encontre a menor concentração de *o*-xileno obtida no reator.

(b) Encontre a maior concentração de *m*-xileno alcançada no reator.

(c) Encontre a máxima concentração de *o*-xileno no reator.

(d) Repita as partes de (a) a (c) para uma alimentação de *o*-xileno puro.

(e) Varie alguns dos parâmetros do sistema e descreva o que você obteve.

(f) O que você acredita que seja o objetivo deste problema?

*Informações adicionais**

Todas as capacidades caloríficas são praticamente iguais: $100 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$.

$$\xi_{p0} = 2 \text{ mol/dm}^3$$

$$\Delta H_{R110} = -1800 \text{ J/mol } o\text{-xileno}$$

$$\Delta H_{R230} = -1100 \text{ J/mol } o\text{-xileno}$$

$$k_1 = 0,5 \exp[2(1 - 320/T)] \text{ dm}^3/\text{kg cat} \cdot \text{min. (T está em K)}$$

$$k_2 = k_1/K_C$$

$$k_3 = 0,005 \exp[4,6(1 - (460/T))] \text{ dm}^3/\text{kg cat} \cdot \text{min}$$

$$K_C = 10 \exp[4,8(430/T - 1,5)]$$

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

$$T_a = 500 \text{ K}$$

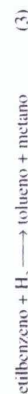
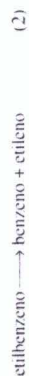
$$UA/p_0 = 16 \text{ J/kg cat} \cdot \text{min} \cdot ^\circ\text{C}$$

$$W = 100 \text{ kg}$$

P12-24_c (*Problema abrangente sobre múltiplas reações com efeitos térmicos*) Estireno pode ser produzido a partir do etilbenzeno pela seguinte reação:



Porém, diversas reações paralelas irreversíveis também ocorrem:



[J. Snyder e S. Subramaniam, *Chem. Eng. Sci.*, 49, 5585 (1994).] Etilbenzeno é alimentado na vazão de $0,00344 \text{ kmol/s}$ em um PFR (PBR) de $10,0 \text{ m}^3$, juntamente com vapor inerte e a uma pressão total de $2,4 \text{ atm}$. A razão molar vapor/etilbenzeno é inicialmente [isto é, partes (a) a (c)] $14,5:1$, mas pode ser variada.

*Obtidas através de dados de periculosidade invisíveis.

Com os seguintes dados, encontre a vazão molar do estireno, benzeno e tolueno na saída do reator e também \dot{S}_{out} para as seguintes temperaturas de alimentação quando o reator é operado adiabaticamente:

- (a) $T_0 = 800 \text{ K}$
 (b) $T_0 = 930 \text{ K}$
 (c) $T_0 = 1100 \text{ K}$

(d) Encontre a temperatura de entrada ideal para a produção de estireno no caso de a razão vapor/estireno ser 58:1. [Dica: Plote a vazão molar de estireno versus T_0 . Explique por que a curva tem a forma obtida.]

(e) Encontre a razão ideal vapor/estireno para a produção de estireno a 900 K . [Dica: Veja a Parte (d).]

(f) Foi proposta a adição de um trocador de calor que opere em contracorrente com $Ua = 100 \text{ kJ/(m}^2\text{-min-K)}$ em que T_c é praticamente constante, com o valor de 1000 K . Para uma razão de entrada vapor/etilbenzeno de 20, qual é a temperatura de entrada que você sugeriria? Plote a vazão molar e \dot{S}_{out} .

(g) O que você acredita que sejam os principais objetivos deste problema?

(h) Faça outra pergunta, ou sugira outro cálculo, que possa ser feito para este problema.

Informações adicionais

Capacidades caloríficas

Metano: 68 J/(mol-K)	Estireno: 273 J/(mol-K)
Etileno: 90 J/(mol-K)	Etilbenzeno: 299 J/(mol-K)
Benzeno: 201 J/(mol-K)	Hidrogênio: 30 J/(mol-K)
Tolueno: 249 J/(mol-K)	Vapor: 40 J/(mol-K)

$$\rho = 2137 \text{ kg/m}^3 \text{ de partículas de catalisador}$$

$$\phi = 0,4$$

$$\Delta H_{\text{R,EB}} = 118.000 \text{ kJ/kmol de etilbenzeno}$$

$$\Delta H_{\text{R,EB}}' = 105.200 \text{ kJ/kmol de etilbenzeno}$$

$$\Delta H_{\text{R,EB}}'' = -53.900 \text{ kJ/kmol de etilbenzeno}$$

$$K_{\text{pl}} = \exp \left\{ b_1 + \frac{b_2}{T} + b_3 \ln(T) + [(b_4 T + b_5) T + b_6] T \right\} \text{ atm}$$

$$b_1 = -17,34$$

$$b_2 = -2,314 \times 10^{-10} \text{ K}^{-3}$$

$$b_3 = -1,302 \times 10^{-6} \text{ K}^{-2}$$

$$b_4 = 5,051$$

$$b_5 = -4,931 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$$

As velocidades de reação de formação de estireno (St), benzeno (B) e tolueno (T), respectivamente, são apresentadas a seguir (EB = etilbenzeno).

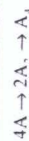
$$r_{\text{St}} = \rho(1 - \phi) \exp \left(-0,08539 - \frac{10.925 \text{ K}}{T} \right) \left(P_{\text{EB}} - \frac{P_{\text{St}} P_{\text{H}_2}}{K_{\text{pl}}} \right) \quad (\text{kmol/m}^3 \cdot \text{s})$$

$$r_{\text{B}} = \rho(1 - \phi) \exp \left(13,2392 - \frac{25.000 \text{ K}}{T} \right) (P_{\text{EB}}) \quad (\text{kmol} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s})$$

$$r_{\text{T}} = \rho(1 - \phi) \exp \left(0,2961 - \frac{11.000 \text{ K}}{T} \right) (P_{\text{EB}} P_{\text{H}_2}) \quad (\text{kmol} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s})$$

A temperatura T é dada em Kelvin e a pressão P em atm.

P12-25_B A reação de adição em série dimero-tetrâmero, em fase líquida.



pode ser escrita como

$$2A \rightarrow A_2 \quad -r_{1A} = k_{1A} C_A^2 \quad \Delta H_{\text{R,1A}} = -32,5 \frac{\text{kcal}}{\text{mol A}}$$

$$A_2 \rightarrow A_4 \quad -r_{2A_2} = k_{2A_2} C_{A_2} \quad \Delta H_{\text{R,2A_2}} = -150 \frac{\text{kcal}}{\text{mol A}_2}$$

é conduzida em um reator PFR de 10 dm^3 . A vazão molar do fluido refrigerante através do trocador de calor, que está colocado em torno do reator, é suficientemente elevada, de forma que a temperatura ambiente do trocador é mantida constante no valor de $T_c = 315 \text{ K}$. Os reagentes entram na temperatura $T_0 = 300 \text{ K}$. A espécie A pura é alimentada ao reator com vazão volumétrica de $50 \text{ dm}^3/\text{s}$ e concentração de 2 mol/dm^3 .

(a) Plote, compare e analise os perfis de F_A , F_{A_2} e F_{A_4} ao longo do reator até um volume de 10 dm^3 .

(b) O produto desejado é A_2 e foi sugerido que o reator utilizado talvez seja muito grande. Que volume de reator você recomendaria para maximizar F_{A_2} ?

(c) Quais variáveis de operação (por exemplo, T_0 e T_c) você mudaria e como mudaria, de forma a diminuir o volume do reator tanto quanto possível, e ainda maximizar F_{A_2} ?

Fique atento a qualquer fator que se oponha à maximização da produção de A_2 . A temperatura ambiente do trocador e a temperatura de entrada do reator devem ser mantidas entre 0 e 177°C .

Informações adicionais

$$k_{1A} = 0,6 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ a } 300 \text{ K com } E_1 = 4.000 \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$$

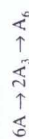
$$k_{2A_2} = 0,35 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ a } 320 \text{ K com } E_2 = 5.000 \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$$

$$C_{pA} = 25 \frac{\text{cal}}{\text{molA} \cdot \text{K}}, \quad C_{pA_2} = 50 \frac{\text{cal}}{\text{molA}_2 \cdot \text{K}}, \quad C_{pA_4} = 100 \frac{\text{cal}}{\text{molA}_4 \cdot \text{K}}$$

$$Ua = 1.000 \frac{\text{cal}}{\text{dm}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{K}}$$

Apresente a sua recomendação de volume do reator para maximizar F_{A_2} e calcule esta vazão molar neste máximo.

P12-26_B A reação de adição em série de trimero-hexâmeros em fase gasosa



pode ser escrita como

$$3A \rightarrow A_3 \quad -r_{1A} = k_{1A} C_A^2 \quad \Delta H_{\text{R,1A}} = -80 \frac{\text{kcal}}{\text{mol A}}$$

$$2A_3 \rightarrow A_6 \quad -r_{2A_3} = k_{2A_3} C_{A_3}^2 \quad \Delta H_{\text{R,2A_3}} = -100 \frac{\text{kcal}}{\text{mol A}_3}$$

é conduzida em um CSTR de 10 dm^3 com trocador de calor. A vazão mássica do fluido de troca térmica através do trocador de calor, que envolve o reator, é suficientemente elevada, de forma que a temperatura ambiente de troca térmica é mantida constante, $T_c = 315 \text{ K}$, e a temperatura de alimentação T_0 é 300 K . A espécie A pura é alimentada ao reator na vazão volumétrica de $50 \text{ dm}^3/\text{s}$ e com concentração de 2 mol/dm^3 . Encontre F_A , F_{A_3} , F_{A_6} e T na saída do reator.

Informações adicionais

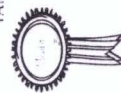
$$k_{1A} = 0,9 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ a } 300 \text{ K com } E_1 = 4000 \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$$

$$k_{2A_3} = 0,45 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ a } 320 \text{ K com } E_2 = 5000 \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$$

$$C_{pA} = 25 \frac{\text{cal}}{\text{molA} \cdot \text{K}}, \quad C_{pA_3} = 75 \frac{\text{cal}}{\text{molA}_3 \cdot \text{K}}, \quad C_{pA_6} = 150 \frac{\text{cal}}{\text{molA}_6 \cdot \text{K}}$$

$$Ua = 100 \frac{\text{cal}}{\text{dm}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{K}}$$

TAME



• **Conjunto Completo de Dados sobre o Problema TAME** disponível no site da LTC Editora

O conjunto de dados sobre o problema da síntese de TAME (tri-amil metil éter) é apresentado no DVD-ROM. Este é um problema muito abrangente; talvez ele possa ser utilizado como um problema para ser resolvido durante o semestre.

• **Bons Problemas Alternativos** no site da LTC Editora (CA). Similares aos Problemas