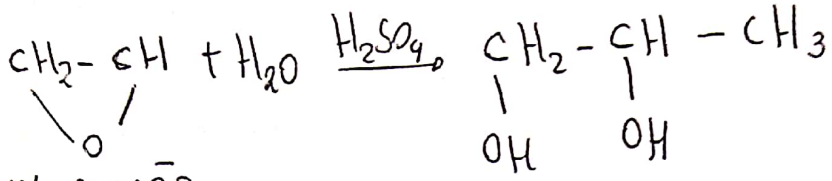
Exemplo

Produção de propileno glicol



→ Declarar reação

A = óxido de propileno

B = H_2O

C = Propileno Glicol

M = metanol

$aA + bB \rightarrow cC$

a = 1

b = 1

c = 1

→ declarar infos

$C_{pA} = 35$ BTU/lbmol · °F

$C_{pB} = 18$ "

$C_{pC} = 46$ "

$C_{pM} = 19.5$ "

$H^\circ_A(68°F) = -66\,600$ BTU/lbol

$H^\circ_B(68°F) = -123000$

$H^\circ_C(68°F) = -226000$

→ Balanço molar

CSTR $\quad V = \dfrac{F_{A0} \cdot X}{-r_A}$

* Desejo conversão

$V \cdot (-r_A) = F_{A0} \cdot X$

1. $f(x) \quad V \cdot (-r_A) - F_{A0} \cdot X = 0$

$X(0) = 0.8$ → chute

$V = 40.1\ ft^3 \rightarrow 300$ gal

$F_{A0} = 43.04$ lbmol/h

2. Lei de Velocidade

$$r_A = -(k \cdot C_A)$$

$$k = A \cdot \exp(-E/R.T)$$

$A = 16.96 \cdot 10^{12}$ h^{-1}

$E = 32400$ BTU/lbmol

$R = 1.987$ BTU/lbmol.°R

3. Estequiometria

Reação fase líquida

$$C_A = C_{A0}(1 - x)$$

$C_{A0} = F_{A0}/\nu_0$ lbmol/ft^3

$\nu_0 = \nu_{A0} + \nu_{b0} + \nu_{m0}$ ft^3/h

$\nu_{A0} = 46.62$ ft^3/h

$\nu_{b0} = 233.1$ ft^3/h

$\nu_{m0} = 46.62$ ft^3/h

4. Balanço de energia

adiabático, trabalho de eixo desprezível

$$f(T) = -F_{A0} \cdot \Sigma \theta_i C_{pi} (T - T_0) - \Delta H_{Rx} \cdot F_{A0} \cdot X = 0$$

$T(0) = 600$ °R

$$\Delta H_{Rx} = \Delta H^{\circ}_{Rx}(T_R) + \Delta C_p (T - T_R)$$

$$\Delta H^{\circ}_{Rx}(T_R) = \frac{c}{a} H^{\circ}_C - \frac{b}{a} H^{\circ}_B - H^{\circ}_A$$

$$\Delta C_p = \frac{c}{a} C_{pC} - \frac{b}{a} C_{pB} - C_{pA}$$

$T_R = 528\ ^{\circ}R \rightarrow 68^{\circ}F$

$T_0 = 535\ ^{\circ}R \rightarrow 75^{\circ}F$

$$\Sigma \theta_i C_{pi} = C_{pA} + \theta_B C_{pB} + \theta_M C_{pM}$$

$$\theta_B = \frac{F_{B0}}{F_{A0}}$$

$$\theta_M = \frac{F_{M0}}{F_{A0}}$$

$F_{B0} = 802.8$ lbmol/h

$F_{M0} = 71.87$

Inserindo a serpentina

B. E

$$\frac{\dot{\theta}}{F_{A0}} - \Sigma \theta_i \phi_i (T - T_0) - \Delta H_{Rx} \cdot X = 0$$

$$q = UA (T_a - T)$$

$$F(T) = \frac{UA}{F_{A0}} \cdot (T_a - T) - X \cdot \Delta H_{Rx} - \Sigma \theta_i \phi_i (T - T_0)$$

$$T(0) = 600^\circ R$$

$$\frac{UA}{F_{A0}} = \frac{(100 \times 40)}{F_{A0}}$$

$$T_a = 545^\circ R$$