

• **Material de Referência Profissional**

R11.1 *Calor Específico Variável.* A seguir, deixamos encontrar uma forma para o balanço de energia para o caso em que os valores específicos são funções fortemente dependentes da temperatura sobre um grande intervalo de temperatura. Sob essas condições, os valores médios do calor específico podem não ser adequados para a relação entre conversão e temperatura. Combinando a entalpia de reação com a forma quadrática do calor específico,

$$C_p = \alpha_i + \beta_i T + \gamma_i T^2$$

encontramos

$$\Delta H_{R_A}(T) = \Delta H_{R_A}^\circ(T_R) + \Delta \alpha(T - T_R) + \frac{\Delta \beta}{2}(T^2 - T_R^2) + \frac{\Delta \gamma}{3}(T^3 - T_R^3)$$

O Exemplo 11-4 é revisito para o caso de valores específicos variáveis.

QUESTÕES E PROBLEMAS

O subíndice de cada um dos números dos problemas indica o seu nível de dificuldade: A, menos difícil; D, mais difícil.

A = ● B = ■ C = ◆ D = ◆◆

Em cada uma das questões e problemas abaixo, em vez de somente assinalar sua resposta, descreva em uma ou duas sentenças como você solucionou o problema, as suposições que você fez, a coerência de sua resposta, o que você aprendeu, e quaisquer outros fatos que você queira incluir. Veja no Prefácio as partes adicionais genéricas relativas (X), (Y), (Z) para os exercícios propostos.

P11-1. Leia todos os problemas no final deste capítulo. Construa e resolva um problema original que use os conceitos apresentados neste capítulo. Para obter uma solução:

- Invente seus dados e a reação.
- Utilize uma reação e dados reais. Veja as diretrizes dadas no Problema P5-1A.
- Prepare uma lista de considerações de segurança para o projeto e operação de reatores químicos. Quais seriam os primeiros quatro itens de sua lista? (Veja www.nacche.org e www.siri.org/graphics.) A edição de agosto de 1985 da revista *Chemical Engineering Progress* pode ser de utilidade.

P11-2. Leia as questões de Autoteste e Autoavaliação do Capítulo 11 no site da LTC Editora, e escolha a mais difícil.

(e) Qual dos exemplos das Notas de Aula do Capítulo 11 no site da LTC Editora foi o mais difícil?

(f) E se você fosse solicitado a dar um exemplo do dia a dia que demonstrasse os princípios deste capítulo? (Provar uma colher de chá de Tabasco ou outro molho picante seria um bom exemplo?)

(g) Refaça o Problema P2-11_b (no Capítulo 2) para o caso de operação adiabática.

Carregue os seguintes programas do Polymath do site da LTC Editora onde apropriado:

(a) Exemplo 11-1. Como este exemplo mudaria se um CSTR fosse utilizado no lugar de um PFR?

(b) Exemplo 11-2. Qual seria a entalpia de reação se 50% de inertes (por exemplo, hélio) fossem adicionados ao sistema? Qual seria o erro percentual se o termo ΔC_p fosse desprezado?

(c) Exemplo 11-3. E se a reação do butano fosse conduzida em um PFR de 0,8 m³ que pudesse ser pressurizado a pressões muito altas? Qual a temperatura de entrada que você recomendaria? Existe uma temperatura ótima de entrada? Grafique o calor que precisará ser removido ao longo do comprimento do reator [\dot{Q} vs. V] para manter a operação isotérmica.

(d) AspenTech Exemplo 11-3. Carregue o programa AspenTech do site da LTC Editora. (1) Repita o Problema P11-2_b (c) usando o AspenTech. (2) Varie a vazão e a temperatura de entrada e descreva o que você encontrou.

(e) Exemplo 11-4. (1) Faça um gráfico da conversão de equilíbrio como uma função da temperatura de entrada, T_{in} . (2) O que você observa para valores altos e baixos

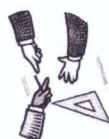


Problema Exemplo de Simulação

Calor específico como uma função da temperatura

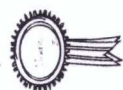


Problemas Propostos



Problemas Quizzes

Antes de resolver os problemas, sugira ou esboce qualitativamente os resultados ou tendências esperados.



3. Staff da LTC

Ligação com as operações unitárias

$$\dot{Q} = UA \frac{[(T_{h2} - T_{c2}) - (T_{h1} - T_{c1})]}{\ln \left(\frac{T_{h2} - T_{c2}}{T_{h1} - T_{c1}} \right)} \quad (\text{E11-5.7})$$

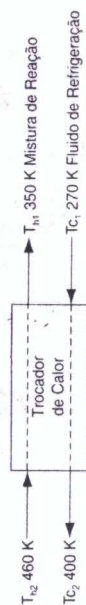


Figura P11-2_b (e) Trocador de calor contracorrente.

P11-3. A reação elementar, irreversível, em fase líquida orgânica,



é conduzida adiabaticamente em um reator de escoamento contínuo. Uma alimentação equimolar de A e B entra a 27°C, e a vazão volumétrica é de 2 dm³/s, com $C_{w0} = 0,1$ kmol/m³.

Informação adicional:

$$H_A^\circ(273 \text{ K}) = -20 \text{ kcal/mol}, H_B^\circ(273 \text{ K}) = -15 \text{ kcal/mol}, H_C^\circ(273 \text{ K}) = -41 \text{ kcal/mol}$$

$$C_{p_A} = C_{p_B} = 15 \text{ cal/mol} \cdot \text{K} \quad C_{p_C} = 30 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$$

$$k = 0,01 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}} \text{ a } 300 \text{ K} \quad E = 10.000 \text{ cal/mol}$$

(a) Grafique e então analise a conversão e a temperatura como função do volume para um PFR até onde $X = 0,85$. Descreva as tendências.

(b) Qual é a máxima temperatura de entrada que se poderá ter para que o ponto de ebulição do líquido (550 K) não seja ultrapassado, mesmo para uma conversão completa?

(c) Plote a quantidade de calor que precisará ser removida ao longo do reator [\dot{Q} vs. V] para manter a operação isotérmica.

(d) Plote e analise os perfis de conversão e temperatura até um volume de PFR de 10 dm³ para o caso em que a reação é reversível com $K_c = 10$ m³/kmol a 450 K. Plote o perfil da conversão de equilíbrio. Como as tendências se diferenciam da parte (a)?

P11-4. A reação elementar irreversível em fase gasosa



é conduzida adiabaticamente em um PFR recheado com catalisador. Reagente A puro entra no reator a uma vazão volumétrica de 20 dm³/s, pressão de 10 atm, e temperatura de 450 K.

Informação adicional:

$$C_{p_A} = 40 \text{ J/mol} \cdot \text{K} \quad C_{p_B} = 25 \text{ J/mol} \cdot \text{K} \quad C_{p_C} = 15 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$H_A^\circ = -70 \text{ kJ/mol} \quad H_B^\circ = -50 \text{ kJ/mol} \quad H_C^\circ = -40 \text{ kJ/mol}$$

Todas as entalpias de formação são relativas a 273 K.

$$k = 0,133 \exp \left[\frac{E}{R} \left(\frac{1}{450} - \frac{1}{T} \right) \right] \frac{\text{dm}^3}{\text{kg} \cdot \text{cat} \cdot \text{s}} \text{ com } E = 31,4 \text{ kJ/mol}$$

- (a) Plote e então analise a conversão e a temperatura ao longo do reator de escoamento uniforme até que uma conversão de 80% (se possível) seja alcançada. (A quantidade máxima de catalisador que pode ser empacotada no reator é de 50 kg.) Assuma que $\Delta P = 0$.

- (b) Varie a temperatura de entrada e descreva o que você encontrou.
(c) Plote a quantidade de calor que precisará ser removida ao longo do reator $[\dot{Q}]$ vs. V para manter a operação isotérmica.

- (d) Leve em consideração agora a perda de pressão em um PBR, com $7 \text{ pb} = 1 \text{ kg/dm}^3$. O reator pode ser recheado com partículas de apenas um entre dois tamanhos. Escolha um.

$$\alpha = 0,019/\text{kg cat. para a partícula com diâmetro } D_1$$

$$\alpha = 0,0075/\text{kg cat. para a partícula com diâmetro } D_2$$

- (e) Plote e analise a temperatura, conversão e pressão ao longo do comprimento do reator. Varie os parâmetros α e P_0 para descobrir o intervalo de valores em que eles afetam drasticamente a conversão.

- (f) Aplique uma ou mais das seis ideias da Tabela P-3, no Prefácio deste livro, a este problema.

P11-5_B A reação seguinte, endotérmica, irreversível e em fase vapor, segue uma lei de velocidade elementar



- e é conduzida adiabaticamente em um PFR de 500 dm^3 . A espécie A é alimentada ao reator a uma vazão de 10 mol/min e à pressão de 2 atm . Uma corrente inerte também é alimentada ao reator a 2 atm , como mostrado na Figura P11-5_B. A temperatura de entrada de ambas as correntes é de 1100 K .

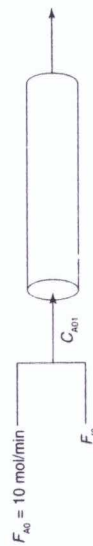


Figura P11-5_B PFR adiabático com inertes.

Informação adicional:

$$k = \exp(34,34 - 34,222/T) \text{ dm}^3/\text{mol} \cdot \text{min} \quad C_{p_i} = 200 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

(T em Kelvin)

$$C_{p_A} = 170 \text{ J/mol} \cdot \text{K} \quad C_{p_B} = 90 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$C_{p_C} = 80 \text{ J/mol} \cdot \text{K} \quad \Delta H_{R_A}^\circ = 80,000 \text{ J/mol}$$

- (a) Primeiramente, derive uma expressão para C_{A0} como uma função de C_{A0} e Θ_T .
(b) Faça um esboço dos perfis de conversão e temperatura para o caso em que não há presença de inertes. Usando uma linha tracejada, esboce os perfis para quando uma quantidade moderada de inertes é adicionada. Usando uma linha pontilhada, esboce os perfis para quando uma grande quantidade de inertes é adicionada. Esboços qualitativos são suficientes. Descreva as semelhanças e diferenças entre as curvas.
(c) Esboce ou plote e então analise a conversão de saída como uma função de Θ_T . Existe alguma razão entre as vazões molares de entrada de inertes e de A (isto é, $\Theta_I = F_{I0}/F_{A0}$) para a qual a conversão é máxima? Explique por que "existe" ou "não existe" um máximo.

- (d) O que mudaria nas partes (b) e (c) se as reações fossem exotérmicas e reversíveis com $\Delta H_{R_A}^\circ = -80 \text{ kJ/mol}$ e $K_C = 2 \text{ dm}^3/\text{mol}$ a 1100 K ?

- (e) Esboce ou plote F_{A0} para as partes (c) e (d) e descreva o que você encontrou.

- (f) Plote a quantidade de calor que será necessário remover ao longo do reator $[\dot{Q}]$ vs. V para manter a operação isotérmica para alimentação com A puro e reação exotérmica.

P11-6_B A reação reversível em fase gasosa



é conduzida sob alta pressão em um reator de leito de recheio com queda de pressão. A alimentação consiste tanto em inertes I e espécie química A, com uma razão de inertes por espécie A de 2 para 1. A vazão molar de A é 5 mol/min à temperatura de 300 K e concentração de 2 mol/dm^3 . Trabalhe este problema em termos de volume [Dica: $V = W/p_B$, $r_A = p_B r'_A$].

Informação adicional:

$$F_{A0} = 5,0 \text{ mol/min} \quad T_0 = 300 \text{ K}$$

$$C_{A0} = 2 \text{ mol/dm}^3 \quad T_1 = 300 \text{ K}$$

$$C_1 = 2 C_{A0} \quad k_1 = 0,1 \text{ min}^{-1} \text{ a } 300 \text{ K}$$

$$C_1 = 18 \text{ cal/mol/K} \quad Ua = 150 \text{ cal/dm}^3/\text{min/K}$$

$$C_{p_A} = 160 \text{ cal/mol/K} \quad T_{A0} = 300 \text{ K}$$

$$E = 10,000 \text{ cal/mol} \quad V = 40 \text{ dm}^3$$

$$\Delta H_{R_A} = -20,000 \text{ cal/mol} \quad \alpha p_b = 0,02 \text{ dm}^{-3}$$

$$K_C = 1,000 \text{ a } 300 \text{ K} \quad \text{Refrigerante}$$

$$C_{p_B} = 160 \text{ cal/mol/K} \quad \dot{m}_C = 50 \text{ mol/min}$$

$$p_B = 1,2 \text{ kg/dm}^3 \quad C_{p_{\text{Refrig}}} = 20 \text{ cal/mol/K}$$

- (a) **Operação Adiabática.** Grafique X , X' , T e a velocidade de consumo como uma função de V até $V = 40 \text{ dm}^3$. Explique por que as curvas são do jeito que são.

- (b) Varie a razão de inertes em relação a A ($0 \leq \Theta_I \leq 10$) e a temperatura de entrada, e descreva o que você encontrou.

- (c) Grafique o calor que precisa ser removido ao longo do reator $[\dot{Q}]$ vs. V para manter a operação isotérmica.

Continuaremos este problema no Capítulo 12.

P11-7_B Algoritmo para reação em um PBR com efeitos térmicos

A Reação Elementar em Fase Gasosa



é conduzida em um reator de leito de recheio. As vazões molares de entrada são $F_{A0} = 5 \text{ mol/s}$, $F_{B0} = 2F_{A0}$, $F_{I0} = 2F_{A0}$, com $C_{A0} = 0,2 \text{ mol/dm}^3$. A temperatura de entrada é 325 K e um fluido de resfriamento está disponível a 300 K .

Informação adicional:

$$C_{p_A} = C_{p_B} = C_{p_C} = 20 \text{ cal/mol/K} \quad k = 0,0002 \frac{\text{dm}^6}{\text{kg} \cdot \text{mol} \cdot \text{s}} @ 300\text{K}$$

$$C_{p_i} = 18 \text{ cal/mol/K} \quad \alpha = 0,00015 \text{ kg}^{-1} \quad Ua = 320 \frac{\text{Cal}}{\text{s} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{K}}$$

$$E = 25 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} \quad \dot{m}_i = 18 \text{ mol/s} \quad p_b = 1400 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$\Delta H_{R_A} = -20 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} @ 298\text{K} \quad C_{p_{\text{Refrig}}} = 18 \text{ cal/mol (refrigerante)}$$

$$K_C = 1000 @ 305\text{K}$$

- (a) Escreva o balanço molar, a lei de velocidade, K_C como uma função de T , k como uma função de T , e C_A , C_B , C_C como uma função de X , y e T .

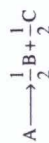
- (b) Escreva a lei de velocidade como uma função de X , y e T .

- (c) Mostre que a conversão de equilíbrio é

$$X_e = \frac{3K_C - \left(\frac{3K_C}{4} \right)^2 - 2K_C \left(\frac{K_C - 1}{4} \right)}{2 \left(\frac{K_C - 1}{4} \right)}$$

Solução

Tomando A como nossa base de cálculo, e dividindo por 2, o coeficiente estequiométrico,



o calor de reação a 298 K por mol da nossa base de cálculo é então

$$\Delta H_{RX} = \frac{1}{2} (-10.000) = -5.000 \text{ cal/mol A.}$$

$$\Delta H_{RX} = \Delta H_{RX}(298) + (2C_{pA} - C_{pB} - C_{pC} - C_{p_{inerte}})(T - 298) = -5.000 + 3(T - 298)$$

A solução Polymath é mostrada abaixo

Equações Diferenciais

$$1 \quad d(X)/d(V) = -r_A/F_{A0}$$

Equações Explícitas

$$1 \quad C_{A0} = 4$$

$$3 \quad F_{A0} = 10$$

$$3 \quad F_{I0} = 10$$

$$4 \quad T = (300 + 6000 \cdot 3 \cdot (298) \cdot X)$$

$$5 \quad C_{pA} = 18$$

$$6 \quad k = .000001 \cdot \exp(5000 \cdot (1/360 - 1/T))$$

$$7 \quad R_A = -k \cdot C_{A0} \cdot (1-X)^2$$

$$8 \quad \text{rate} = -R_A$$

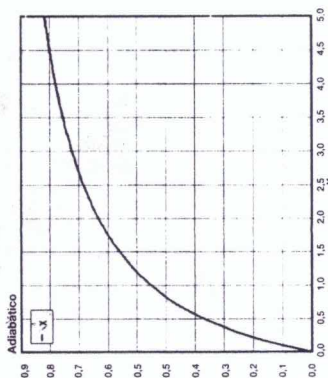


Figura P11-10 Programa Polymath e saída gráfica

LEITURA SUPLEMENTAR

1. Um desenvolvimento excelente sobre balanço de energia é apresentado em

ARIS, R., *Elementary Chemical Reactor Analysis*, Upper Saddle River, N.J.: Prentice Hall, 1969, Cap. 3 e Cap. 6.

Um grande número de problemas exemplos tratando de reatores não isotérmicos pode ser encontrado em

BURGESS, THORNTON W., *The Adventures of Old Man Coyote*, New York: Dover Publications, Inc., 1916.

BUTT, JOHN B., *Reaction Kinetics and Reactor Design*, Revised and Expanded, 2 ed. New York: Marcel Dekker, Inc., 1999.

WALAS, S. M., *Chemical Reaction Engineering Handbook of Solved Problems*, Amsterdam: Gordon and Breach, 1995. Veja os seguintes problemas resolvidos: 4.10.1, 4.10.8, 4.10.9, 4.10.13, 4.11.02, 4.11.09, 4.11.03, 4.10.11.

Para uma discussão mais completa sobre entalpia de reação e constante de equilíbrio pode-se também consultar

DENNIS, K. G., *Principles of Chemical Equilibrium*, 4 ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1981.

2. Entalpias de formação, $H(T)$, energias livres de Gibbs, $G(T_p)$ e valores específicos de vários compostos podem ser encontrados em

GREEN, D. W. e R. H. PERRY, eds., *Chemical Engineers' Handbook*, 8 ed.

New York: McGraw-Hill, 2008.

REID, R. C., J. M. PRAUSNITZ e T. K. SHERRWOOD, *The Properties of Gases and Liquids*, 3 ed. New York: McGraw-Hill, 1977.

WEAST, R. C., ed., *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 66 ed. Boca Raton, Fla.:

(d) Quais os valores de $\sum \Theta C_p$, ΔC_p , T_0 , temperatura de entrada, T_1 (lei de velocidade) e T_2 (constante de equilíbrio)?

(e) Escreva o balanço de energia para operação adiabática.

(f) **Caso 1 Operação Adiabática.** Plote e então analise X , X_p , X_t e T versus W , quando a reação é conduzida adiabaticamente. Descreva por que os perfis se parecem desse jeito? Identifique os termos que serão afetados pelos inertes. Esboce os perfis que você prevê para X , X_p , X_t e T , antes de rodar o programa Polymath para graficar os perfis.

(g) Grafique o calor que precisará ser removido ao longo do reator [\dot{Q} vs. V] para manter a operação isotérmica.

P11-8_A

é conduzida adiabaticamente em uma série de reatores de leito de recheio em série, com resfriamento interestágio (veja a Figura 11-5). A temperatura mais baixa na qual a corrente reagente pode ser resfriada é 27 °C. A alimentação é equimolar em A e B, e a massa de catalisador em cada reator é suficiente para alcançar 99,9% da conversão de equilíbrio. A alimentação entra a 27 °C e a reação é conduzida adiabaticamente. Se quatro reatores e três resfriadores estiverem disponíveis, que conversão poderá ser alcançada?

Informação adicional:

$$\Delta H_{RX} = -30.000 \text{ cal/mol A} \quad C_p = C_{pB} = C_{pC} = C_{pD} = 25 \text{ cal/g mol} \cdot \text{K}$$

$$K_c(50^\circ\text{C}) = 500.000 \quad F_{A0} = 10 \text{ mol A/min}$$

Primitivamente, prepare um gráfico da conversão de equilíbrio como uma função da temperatura. [Resp. parcial: $T = 360 \text{ K}$, $X_e = 0,984$; $T = 520 \text{ K}$, $X_e = 0,057$.]

P11-9_A A Figura P11-9 mostra a trajetória temperatura-conversão para uma sequência de reatores com aquecimento interestágio. Considere agora substituir o aquecimento interestágio por uma injeção da corrente de alimentação em três porções iguais, como mostrado na Figura 11-9:

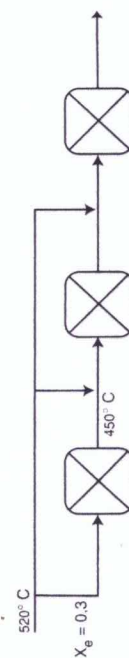


Figura P11-9

Esboce as trajetórias temperatura-conversão para (a) uma reação endotérmica com as temperaturas de entrada como mostrado, e (b) uma reação exotérmica com as temperaturas de entrada e saída do primeiro reator invertidas, isto é, $T_0 = 450^\circ\text{C}$.

P11-10_B O que está errado com esta solução?

A reação elementar em fase líquida



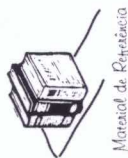
é conduzida adiabaticamente em um PFR adiabático de 5 dm³. A entalpia de reação a 298 K é -10.000 cal/mol A. A alimentação é equimolar em A e em inertes a 77 °C, com $F_A = 10 \text{ mol/min}$ e $C_{A0} = 4 \text{ mol/dm}^3$.

Plote X como uma função do volume do reator.

Informação adicional:

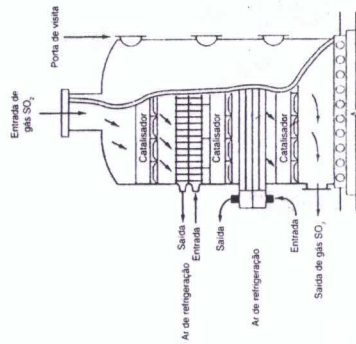
$$C_p = 18 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}, C_{pB} = C_{pC} = 9 \text{ cal/mol} \cdot \text{K} \text{ e } C_{p_{inerte}} = 15 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$$

$$k = 10^{-4} \text{ dm}^3/\text{mol} \cdot \text{min} \text{ a } 360 \text{ K e } E = 6.000 \text{ cal/mol}$$



R12.4. *Produção de Ácido Sulfúrico.* Os detalhes da oxidação industrial do SO_2 são descritos.

Produção de Ácido Sulfúrico. Os detalhes da oxidação industrial do SO_2 são descritos. Aqui a quantidade de catalisador, a configuração do reator e as condições operacionais são discutidas, juntamente com um modelo para prever os perfis de temperatura e conversão.



QUESTÕES E PROBLEMAS

O subíndice de cada um dos problemas numerados indica o seu grau de dificuldade: A, mais fácil; D, mais difícil.

$A = \bullet \quad B = \blacksquare \quad C = \blacklozenge \quad D = \blacklozenge$

Em cada uma das questões e problemas, em vez de apenas circular a sua resposta, escreva uma ou duas sentenças descrevendo como você resolveu o problema, as suposições que você fez, o raciocínio que usou para chegar à sua resposta, o que você aprendeu, e qualquer outro fato que você gostaria de incluir. Veja o Prefácio para resolver as partes genéricas adicionais (x), (y) e (z) dos problemas propostos.

PI2-1_A Leia novamente os problemas no final deste capítulo. Invente um novo problema que

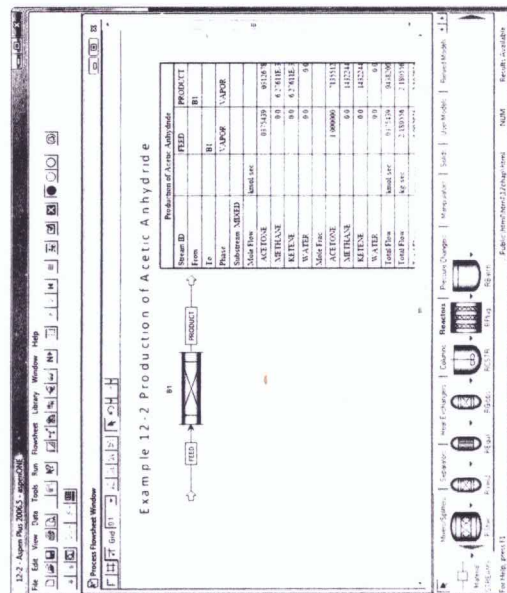
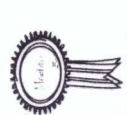
(a) Invente os dados e a reação.

- (b) Utilize uma reação real e dados reais. Veja o Problema P4-1A para orientação.
- (c) Prepare uma lista de considerações de segurança para o projeto e operação de reatores químicos. (Veja www.sache.org e www.iiri.org/graphics/) A edição de agosto de 1985 da revista *Chemical Engineering Progress* pode ser útil para a parte (c)

P12-2_A Carregue o programa Polymath (ou outro) do site da LTC Editora, conforme apropriado ao item do problema:

(a) **Exemplo 12-1. Segurança.** Suponha que o valor da constante de equilíbrio e o calor de reação tenham sido medidos incorretamente e os valores obtidos foram: $K_p = 1000 \text{ mol/dm}^3$ a 330 K e $\Delta H_{R_{330}} = -20,000 \text{ kJ/mol}$. (1) Refaça o Exemplo 12-1 utilizando esses valores. (2) Suponha que uma segunda reação altamente exotérmica comece a 400 K . Será possível que usando um dos sistemas de troca térmica estudados evita-se que seja atingida a temperatura de 400 K ? Se não, quais as condições que deveriam ser modificadas para prevenir que a reação fuja fora de controle e ocorra uma explosão? (3) Faça $Q_c = r_A \Delta H_{R_{330}}$ e $Q_c = Ua(T - T_c)$ e então plote Q_c e Q_r no mesmo gráfico, em função de T . (4) Varie a vazão do fluido refrigerante ($0 \leq \dot{m}_c < 2000 \text{ kg/h}$) e a temperatura de entrada ($273 \text{ K} < T_{i,c} < 315 \text{ K}$) e descreva o que você encontrará. (5) Varie alguns dos outros parâmetros e veja se você pode encontrar condições perigosas de operação. (6) Plote Q_c e T_c em função de T , em condições de manter operação isotérmica.

- (b) **Exemplo 12-2.** (1) Faça $Q_e = \Delta H_{Ks} + Q_r = Ua(T - T_r)$ e enaio plote Q_r e Q_e no mesmo gráfico em função de V . (2) Mantenha o volume do reator constante em $0,5 \text{ dm}^3$ e as condições de entrada a $(T_0 = 1050 \text{ K}, T_{rr} = 1250 \text{ K})$ e faça uma tabela contendo X_r , X_r e T_r para cada um dos casos de trocador de calor, mude as condições de alimentação e determine qual caso fornece maior diferença na conversão.



Um guia passo a passo para o AspenTech é fornecido no site da LTC Editora.

- B. Exemplo CD12-1 $\Delta H_{R_0}(T)$ para Calores Específicos expressados como Funções Quadráticas da Temperatura

Exemplos de Problemas de Simulação

1. Exemplo 12-1 Isomerização do Isobuteno com Transferência de Calor
2. Exemplo 12-2 Produção de Anidrido Acético
3. Exemplo 12-3 Formulação no AspenTech
4. Exemplo 12-4 CSTR com Serpentina de Refrigeração
5. Exemplo 12-5 Reações Paralelas em um PFR com Efeitos Térmicos
6. Exemplo 12-6 Múltiplas Reações em um CSTR
7. Exemplo 12-7 Reações Complexas
8. Exemplo 12-1 Oxidação Industrial do SO₂
9. Exemplo 12-11-3 PFR com Temperatura Variável do Fluido Refrigerante

Material de Referência Profissional

- R12.1** *Reações Fora de Controle em CSTRs e PFRs*
Gráficos do Plano de Fases. Transformamos os perfis de temperatura e concentração em um plano de fases.

A trajetória que passa por um máximo da "curva de máximos" é considerada *crítica* e, portanto, é a localização de uma condição *crítica* de entrada para C_A e T correspondentes a uma dada temperatura de parede.

R12.2 *Análise de Bifurcação em Regime Estacionário.* Na dinâmica de reatores, é particularmente importante verificar se existem múltiplos pontos de regime estacionário, ou se o sistema pode manter oscilações sustentadas.

Calor Específico em Função da Temperatura. Combinando o calor de reação com a forma quadrática do calor específico,

$$C_{P_i} = \alpha_i + \beta_i T + \gamma_i T^2,$$

encontramos

$$\Delta H_{R_x}(T) = \Delta H_{R_x}^\circ(T_R) + \Delta\alpha(T - T_R) + \frac{\Delta\beta}{\gamma}(T^2 - T_R^2) + \frac{\Delta\gamma}{\gamma}(T^3 - T_R^3)$$

O Exemplo 12.2 é analisado novamente na seção PRS (Professional Reference Shelf), ou seja, Material de Referência Profissional), para o caso em que os valores específicos são variáveis.