## Exemplo - Produção de propilenoglicol

Ainda é inverno e, embora você sonhasse com uma transferência para a fábrica na costa tropical do sul da Flórida, infelizmente você ainda é o engenheiro do CSTR do Exemplo 12.3, empregado na produção de propilenoglicol.

$$CH_2$$
— $CH$ — $CH_3$ + $H_2O$ 
 $H_2SO_2$ 
 $CH_2$ — $CH$ — $CH_3$ 
 $OH$   $OH$ 
 $OH$ 

Você está considerando a possibilidade de instalar um novo e atraente CSTR, revestido internamente de vidro e com um volume de 1.000 dm3. Você decide então fazer uma rápida verificação da cinética da reação e da temperatura adiabática máxima. Para essa finalidade, você conta com um elegante e bem equipado reator em batelada agitado de 40 dm3 (~10 gal), que você solicitou de uma empresa. Você carrega (ou seja, enche) esse reator com 4 dm3 (~1 gal) de óxido de etileno, 4 dm3 (~1 gal) de metanol e 10 dm3 (~2,5 gal) de água contendo 0,1% em massa de H2SO4. Por motivos de segurança, o reator é instalado em um galpão às margens do Lago Walloon (você não gostaria que toda a planta industrial fosse destruída, caso o reator explodisse).

Nessa época do ano, no norte de Michigan, a temperatura inicial de todos esses materiais é 276 K (3°C). Temos que ter cuidado aqui! Se a temperatura do reator aumentar acima de 350 K (77°C), uma reação secundária, mais exotérmica, acontecerá, causando descontrole e explosão subsequente, semelhante à ocorrida na explosão da fábrica da T2 Laboratory, na Flórida.

Embora você tenha solicitado a obtenção de dados para essa reação ao laboratório nacional de pesquisa de Jofostan, o departamento de compras decidiu economizar dinheiro e comprá-lo da Internet. Os valores obtidos são:

$$E = 18.000\,\mathrm{cal}\,/\,\mathrm{mol}, \Delta H_\mathrm{Rx}^0 = -20.202\,\mathrm{cal}\,/\,\mathrm{mol}, C_\mathrm{P_A} = 35\,\mathrm{cal}\,/\,\mathrm{mol}\,/\mathrm{K}, \\ C_\mathrm{P_B} = 18\,\mathrm{cal}\,/\,\mathrm{mol}\,/\mathrm{K}, C_\mathrm{P_C} = 46\,\mathrm{cal}\,/\,\mathrm{mol}\,/\,\mathrm{Ke}\,C_\mathrm{P_M} = 19, 5\,\mathrm{cal}\,/\,\mathrm{mol}\,/\mathrm{K}$$

O Prof. Dr. Sven Köttlov se opôs a esta compra pela Internet e disse que deveria ser registrado que ele é cético em relação aos valores desses parâmetros. As concentrações iniciais do óxido de etileno puro e do metanol são 13,7 mol/dm3 e 24,7 mol/dm3, respectivamente. Consequentemente, os números iniciais de mols adicionados ao reator são

A: 
$$\acute{O}xido\ de\ etileno$$
:  $N_{A\,0} = (13.7\ {
m mol/dm}^3)\ (4\ {
m dm}^3) = 54.8\ {
m mol}$ 

B: Água: 
$$N_{\rm B0} = (55.5 \text{ mol/dm}^3) (10 \text{ dm}^3) = 555 \text{ mol}$$

M: Metanol : 
$$N_{\rm M} = (24.7~{
m mol/dm^3})~(4~{
m dm^3}) = 98.8~{
m mol}$$



O catalisador ácido sulfúrico ocupa um espaço insignificante; então, o volume total é de 18 dm3, enquanto os dados e a equação da taxa de reação estão no Exemplo 12.3. Trabalharemos com dois cenários: (1) conhecer o quão rápido a temperatura sobe e quanto tempo leva para atingir 350 K para uma operação adiabática, e, (2) quanto tempo demoraria para atingir 345 K se adicionarmos um trocador de calor.

- (a) **Operação Adiabática**: Faça o gráfico de conversão e temperatura, X e T, em função do tempo para operação adiabática. Quantos minutos seriam necessários para a mistura, dentro do reator, atingir uma conversão de 51,5%? Qual seria a temperatura adiabática correspondente?
- (b) **Troca de Calor**: Faça o gráfico de temperatura e conversão em função do tempo quando o trocador de calor for adicionado. O produto do coeficiente global de transferência de calor e da superfície de troca é UA = 10 cal/s/K, com Ta1 = 290 K e a taxa de resfriamento de 10 g/s, com um calor específico de 4,16 cal/g/K.

