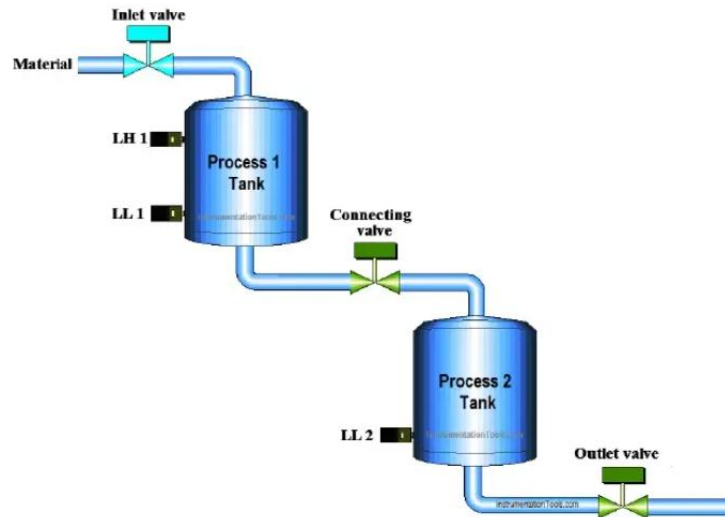


Lista de Exercícios EQE-776
Modelagem e simulação de processos

Questão 1

Dois tanques cilíndricos são colocados em série como apresentado na seguinte figura.



São conhecidos os seguintes dados:

$Q_0 = 20 \text{ m}^3/\text{h}$; Vazão de alimentação para o TK1

$D_1 = 4 \text{ m}$; Diâmetro do TK1

$D_2 = 3 \text{ m}$; Diâmetro do TK2

$k_1 = 14 \text{ m}^{2.5}/\text{h}$; Parâmetro da válvula saída do TK1

$k_2 = 12 \text{ m}^{2.5}/\text{h}$; Parâmetro da válvula saída do TK2

$h_{10} = 3 \text{ m}$; Nível de líquido inicial no TK1

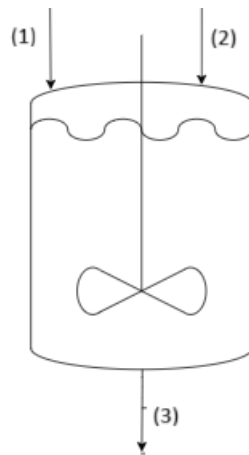
$h_{20} = 2 \text{ m}$; Nível de líquido inicial no TK2

As vazões de saída de cada tanque podem ser estimadas em função do nível de líquido no próprio tanque mediante a seguinte equação: $Q_i = k_i \sqrt{h_i}$; em que h_i é o nível de líquido no tanque i

Elabore o modelo dinâmico do processo e realize a simulação das primeiras 20 horas de operação para obter o gráfico do perfil temporal do nível de líquido em cada tanque.

Questão 2

Um tanque de mistura perfeitamente agitado recebe duas correntes de entrada e tem uma corrente de saída como apresentado na figura.



São conhecidos os seguintes dados:

$F_1 = 10 \text{ kg/min}$; Vazão da corrente 1

$x_{A1} = 0,6$; Fração mássica do componente A na corrente 1

$x_{B1} = 0,0$; Fração mássica do componente B na corrente 1

$x_{C1} = 0,4$; Fração mássica do componente C na corrente 1

$F_2 = 8 \text{ kg/min}$; Vazão da corrente 2

$x_{A2} = 0,0$; Fração mássica do componente A na corrente 2

$x_{B2} = 0,7$; Fração mássica do componente B na corrente 2

$x_{C2} = 0,3$; Fração mássica do componente C na corrente 2

$\rho_A = 1200 \text{ kg/m}^3$; Densidade do componente A

$\rho_B = 1400 \text{ kg/m}^3$; Densidade do componente B

$\rho_C = 1000 \text{ kg/m}^3$; Densidade do componente C

$A = 0,2 \text{ m}^2$; Área da seção transversal do tanque

$k = 0,02 \text{ m}^{2.5}/\text{min}$; Parâmetro da válvula saída do tanque

$m_{A0} = 20 \text{ kg}$; Quantidade inicial do componente A dentro do tanque

$m_{B0} = 20 \text{ kg}$; Quantidade inicial do componente B dentro do tanque

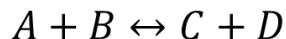
$m_{C0} = 40 \text{ kg}$; Quantidade inicial do componente C dentro do tanque

A vazão de saída pode ser estimada em função do nível de líquido no tanque mediante a seguinte equação: $F_3 = \rho_3 k \sqrt{h}$; em que ρ_3 é a densidade da corrente 3 e h é o nível de líquido no tanque.

Elabore o modelo dinâmico do processo e realize a simulação dos primeiros 60 minutos de operação para obter o gráfico do perfil temporal do nível de líquido e das frações mássicas de cada componente na corrente de saída.

Questão 3

Um reator do tipo BSTR (batelada) é utilizado para executar a seguinte reação reversível:



As taxas [$\text{mol.L}^{-1}.\text{min}^{-1}$] das reações direta e inversa podem ser estimadas segundo as seguintes equações:

$$\begin{aligned} r_d &= k_d C_A^{1,1} C_B^{1,4} & k_d &= 50000 e^{\left(-\frac{4000}{T}\right)} \\ r_i &= k_i C_C^{1,3} C_D^{1,2} & k_i &= 30000 e^{\left(-\frac{5000}{T}\right)} \end{aligned}$$

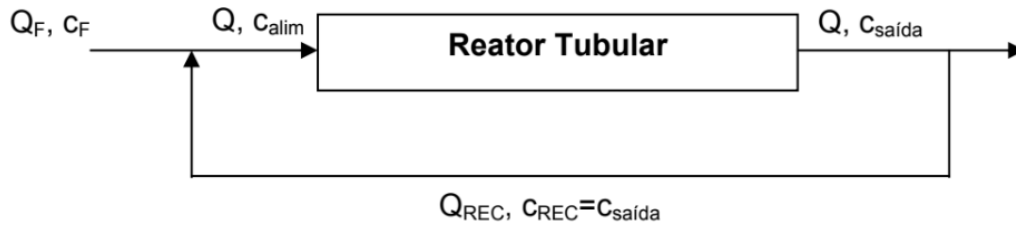
em que C_A , C_B , C_C e C_D são as concentrações [mol/L] e T é a temperatura [K]

Inicialmente são colocados no reator somente os reagentes A e B, com concentrações de 0,5 mol/L e 0,8 mol/L, respectivamente. O reator apresenta um sistema de ajuste de temperatura que inicialmente está fixado em 400 K. Essa temperatura é mantida constante durante os primeiros 5 minutos de batelada. Passado esse tempo, inicia-se uma rampa de diminuição da temperatura de forma que ao final da batelada a temperatura alcança o valor de 350 K.

Elabore o modelo dinâmico do processo e realize a simulação dos 15 minutos de batelada para obter o gráfico do perfil temporal da temperatura, das concentrações de cada componente e da conversão do reagente A.

Questão 4

Considere um sistema com reator tubular de dispersão axial e reciclo apresentado na seguinte figura:



Segue o modelo adimensional do reator é

$$\frac{\partial C(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial C(t, z)}{\partial z} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C(t, z)}{\partial z^2} - Da C(t, z)$$

Sendo as condições de contorno:

$$C(t, 0) - \frac{1}{Pe} \frac{\partial C(t, z)}{\partial z} \Big|_{z=0} = C_{alim}$$

$$\frac{\partial C(t, z)}{\partial z} \Big|_{z=1} = 0$$

Perceba que a alimentação do reator (C_{alim}) deve ser obtida a partir do balanço no ponto de mistura. Discretize a coordenada z em diferenças finitas, utilizando 60 pontos, e resolva o sistema de EDOs resultante, conhecendo os seguintes dados:

$R = 5$; Razão de reciclo ($R = Q_{REC}/Q_F$)

$Pe = 15$; Número adimensional Péclet

$Da = 1$; Número adimensional Damkohler

$C_F = 1$; Concentração do reagente na entrada adimensional

$Q_F = 10$; Vazão de entrada adimensional

O reator está inicialmente vazio.

Simule o comportamento do sistema durante 5 unidades de tempo adimensionais para obter o gráfico do perfil temporal da C_{alim} e da concentração dentro do reator para $z=0,25$; $z=0,50$; $z=0,75$; e $z=1$.