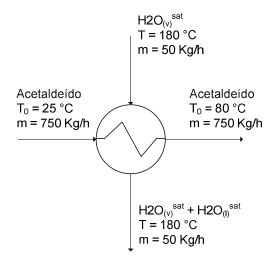
COMPORTAMENTO PVT E PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE FLUIDOS PUROS

NOTA 01: Muito importante para esta lista possuir o livro – texto Smith, Van Ness (7ª edição ou outra). No livro há equações, tabelas e diagramas necessários para a resolução de alguns exercícios.

NOTA 02: Em algumas questões, é necessário realizar cálculos iterativos. Se você possui uma calculadora HP e sabe usar, não terá problemas. Se não sabe usar, você pode pedir ajuda de um colega para aprender. Se você não possui a calculadora, é sugerido ler o apêndice I, o qual explica como resolver equações não – lineares pelo método de Newton – Raphson.

1) Acetaldeído deve ser aquecido em um trocador de calor com vapor d' água saturado como fluido de aquecimento. Um diagrama da operação é mostrado abaixo:



Sabendo que:

$$\begin{split} &\dot{Q}_r = \dot{m}(C_P)(T_f - T_0) \\ &\frac{\langle C_P \rangle}{R} = \frac{1}{\langle T_f - T_0 \rangle} \int_{T_0}^{T_f} \frac{C_P(T)}{R} dT \\ &\frac{C_P}{R} = 1,693 + 17,978 \cdot 10^{-3}T - 6,158 \cdot 10^{-6}T^2 \end{split}$$

Determine a fração de vapor  $\beta$  ( $\beta = \frac{\dot{m}_V}{\dot{m}}$ ) residual na corrente de saída da água de aquecimento. Utilize as tabelas de vapor d' água saturado do livro – texto Smith, Van Ness.

Resposta:  $\beta = 0.534$ 

2) Muito importante para o projeto e avaliação de colunas de destilação é a **Volatilidade Relativa**. A volatilidade relativa é definida por:

$$\alpha_{i,j} = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j}$$

Sabe – se que para gases ideais e soluções ideais, a relação entre a composição do componente na fase vapor e na fase líquida é dada pela **Lei de Raoult** e definida por:

$$y_i = x_i \frac{P_i^{sat}}{P}$$

Para uma mistura de Benzeno – Tolueno a 1 atm, obtenha uma expressão para a volatilidade relativa em função da temperatura, sabendo que a pressão de saturação de um componente segue a **Equação de Antoine**:

$$ln(P^{sat}) = A - \frac{B}{T+C}$$

Construa um gráfico de  $\alpha_{i,j}$  X T, para a faixa de temperatura [80,0 °C; 110,6 °C].

3) Etileno deve ser comprimido para um processo de polimerização para obtenção de polietileno. A vazão mássica de alimentação do compressor é de 210 Kg/h. O etileno é oriundo de um vaso de pressão à temperatura ambiente (25 °C) e 10 atm. O gás deve ser comprimido até 30 atm. Supondo que a Equação do Tipo Virial truncada no primeiro termo modela bem o comportamento PVT do etileno, determine a potência realizada pelo compressor sendo sua eficiência de 72 %.

Considerações:

$$\frac{dB_{(virial)}}{dT} = 0 \qquad \qquad \frac{C_F^{g_1}}{R} = A + BT + CT^2 + DT^{-2}$$

Dados:

B (Virial) =  $-140 \text{ cm}^3/\text{mol}$ 

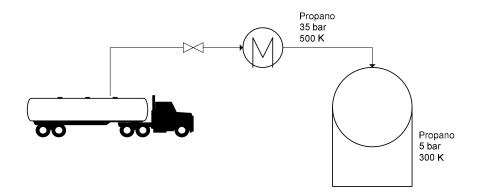
A = 1,424 B (
$$C_P$$
) = 14,394 · 10<sup>-3</sup> C = -4,392 · 10<sup>-6</sup> D = 0

Equações:

$$Z = \frac{PV}{RT} = 1 + \frac{BP}{RT}$$
  $\eta = \frac{\dot{W}_{ideal}}{\dot{W}}$ 

Resposta: 9,87 HP

4) Propano deve ser reabastecido em uma esfera de armazenamento de 500 m³. Um caminhão – tanque contendo propano líquido engata sua saída à linha de carga da esfera. Uma válvula existente na linha e um trocador de calor garantem que o propano à montante da esfera esteja nas condições de 35 bar e 500 K. Um diagrama da operação é mostrado abaixo:



A operação deve ser terminada quando a pressão no interior da esfera alcance 30 bar. Com esta informação e considerando a operação como sendo adiabática, determine:

- a) A temperatura final do propano contido na esfera, em K;
- b) A massa final contida na esfera, em ton;
- c) A energia adicionada à esfera, em KJ.

Considerações:

$$Z = 1 + \frac{BP}{RT} \qquad \qquad \frac{C_P^{g_1}}{R} = A + BT + CT^2 + DT^{-2} \qquad \qquad B(virial) = b - \frac{a}{RT}$$

Dados:

$$a = 93875,69 J^2/mol^2 bar$$
  $b = 9,047 J/mol bar$ 

A = 1,213 B (
$$C_P$$
) = 28,875 · 10<sup>-3</sup> C = -8,824 · 10<sup>-6</sup> D = 0

Resposta: a) 352 K b) 29,52 ton c) 16,984 KJ

5) Em uma indústria, você (Engenheiro Júnior) achou estranho um barulho na área de produção e verificou que talvez possa haver um vazamento em uma válvula na linha do 1,3 Butadieno. Ao fazer a constatação, comunicou seu chefe (Engenheiro Sênior). O mesmo disse que o barulho era normal e que as variáveis estavam dentro dos limites especificados. Há ou não vazamento na válvula? (Utilize as tabelas generalizadas de Lee/Kesler do livro – texto Smith, Van Ness).



Resposta: Há vazamento na linha.

- 6) Determine o volume do n-Heptano e a fase em que se encontra respectivamente nas condições de 400 °F e 180 psia. Os dados para o n-Heptano se encontram no livro texto. Utilize as equações de estado:
  - a) Van der Waals;
  - b) Redlich/Kwong
  - c) Soave/Redlich/Kwong (SRK)
  - d) Peng Robinson (PR)

## Resposta: fase líquida

- a) 0,002865 mol/cm<sup>3</sup> b) 0,004083 mol/cm<sup>3</sup> c) 0,004344 mol/cm<sup>3</sup> d) 0,0063498 mol/cm<sup>3</sup>
- 7) Uma reação química é processada isotermicamente em um reator batelada de volume constante. A reação é dada por:

$$A + 3B \rightarrow C$$

O reator inicia a reação em t = 0 nas condições de 30 atm e 500 K, com  $y_{A0} = 0.1$ ,  $y_{B0} = 0.9$ . A reação é finalizada quando a mesma atinge a conversão de 65 % em relação ao reagente A ( $X_A = 0.65$ ). O calor de reação padrão (298 K, 1 bar) é  $\Delta H_{298K,1\ bar}^{0} = -123.223 \frac{KJ}{mol.A}$ . Sabendo que:

$$\begin{split} P &= P_0 \frac{T}{T_0} \frac{Z}{Z_0} (\mathbf{1} + \varepsilon_A X_A) \\ \varepsilon_A &= y_{A0} \delta \end{split} \qquad \begin{split} X_A &= \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}} = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \\ \delta &= \left(\frac{1}{a} \sum \vartheta_i\right) \end{split} \qquad \qquad \mathcal{C}_i = y_i \frac{P}{ZRT} \end{split}$$

Onde:

a, é o coeficiente estequiométrico do reagente A;

 $artheta_i$ , é o número estequiométrico da reação. No caso: -A-3B+C=0  $artheta_A=-1$  ,  $artheta_B=-3$  ,  $artheta_C=1$ 

## Determine:

- a) A pressão no final da reação. Utilize a equação de estado SRK;
- b) A composição no final da reação;
- c) Compare os resultados obtidos com os resultados utilizando a equação de gás ideal. Para este tipo de problema, é necessário considerar não idealidade da fase gasosa?

## Considerações:

$$\langle P_C \rangle = \sum_i y_i P_{C,i} \qquad \langle T_C \rangle = \sum_i y_i T_{C,i} \qquad \langle \omega_C \rangle = \sum_i y_i \omega_{C,i}$$

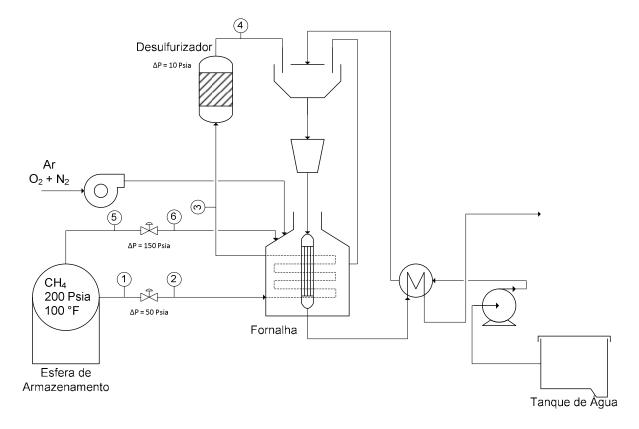
Utilizar as médias ponderadas para o cálculo do coeficiente de compressibilidade. Dados:

Componente	$P_{\mathit{C},i}$ (bar)	$T_{C,i}$ (K)	$\omega_{C,i}$
Α	48,98	562,2	0,210
В	13,13	33,19	-0,216

С	40,73	553,6	0,210

Resposta: a) 13,37 bar b)  $y_{A,f} = 0,043 / y_{B,f} = 0,876 / y_{C,f} = 0,081$  c) Sim,  $P^{gi} = 24,47$  bar

8) (DESAFIO) Gás natural sofre o seguinte processo em uma unidade de geração de gás de síntese:



O processo se baseia na reação de metano com vapor d'água para formação de monóxido de carbono e gás hidrogênio. As seguintes reações químicas ocorrem:

$$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$$

$$CH_4 + 2H_2O \rightarrow CO_2 + 4H_2$$

A reação ocorre nos reatores de leito fixo (PBR's), onde há catalisadores que promovem a reação. A reação ocorre na faixa de temperatura de 700 - 800 °C e pressão variando de 30 a 50 atm. O gás de síntese (CO +  $H_2$ ) é utilizado como um precursor de outros produtos. Dependendo do produto desejado, a primeira reação é desejada em detrimento da segunda e vice – versa.

O processamento do gás natural começa pela passagem em tubulação no interior da fornalha, para que o mesmo possa ser aquecido. A vazão de gás na tubulação é controlada por uma válvula, a qual provoca um diferencial de pressão. Ao sair da fornalha, bem aquecido, o gás é então comprimido até a pressão desejada e alimenta uma coluna de dessulfurização para remoção de compostos sulfurados que possam contaminar o catalisador. Em seguida, o gás é misturado com as correntes de vapor d´água e gases de combustão para alimentar o reator.

Particularmente nesta planta, o objetivo é a produção de metanol. A produção de metanol necessita de uma relação H₂/CO aproximadamente igual à 2, como mostra a reação abaixo:

$$CO + 2H_2 \rightarrow CH_3OH$$

Para tal, a primeira reação deve ser maximizada em relação à segunda. Devido a isso, o combustível utilizado na fornalha é o próprio gás natural.

O gás natural alimenta o interior da fornalha, onde ocorre também a introdução de ar comprimido. O gás natural sofre combustão e o calor liberado serve como fonte de energia para promover a reação e aquecer o gás natural. A corrente dos gases de combustão, que é rica de CO<sub>2</sub>, também alimenta o reator para que segunda reação seja deslocada no sentido dos reagentes. Como conseqüência, a produção de CO é aumentada. Dados:

$$\Delta H_R^0(298,15~K~,~1~b\alpha r)=8500\frac{_{BTU}}{lbm\,CH_4}~~(1^a~reação~de~geração~de~Gás~de~Síntese)$$
 
$$\Delta H_R^0(298,15~K~,~1~b\alpha r)=-15073\frac{_{BTU}}{lbm\,CH_4}~~(Reação~de~combustão~do~metano)$$

Utilizando o diagrama termodinâmico do metano (Considerando que o gás natural é constituído apenas de metano) (Diagrama no apêndice do livro – texto Smith, Van Ness 7ª Ed. ou anexado à lista), determine as variáveis termodinâmicas das correntes selecionadas no fluxograma, considerando que:

- Apenas a 1ª reação de geração de gás de síntese ocorre;
- A combustão do metano na fornalha é completa;
- O Dessulfurizador e Fornalha são adiabáticos;
- A perda de carga nas tubulações é desprezível.

Propriedades	1	2	3	4	5	6
P (Psia)	200				200	
T ( °F)	100			500	100	
H (BTU/lbm)						
S (BTU/lbm °R)						

- a) Determine a relação  $m_1/m_{\tilde{s}}$  de gás natural (metano), isto é, a relação matéria prima/combustível em que a planta opera. Discuta sobre a viabilidade econômica desta planta utilizando apenas critérios de engenharia (i.g comentários sobre aumentar a carga de gás natural, manipular variáveis de processo, etc), sabendo que outros combustíveis poderiam ser utilizados.
- b) Determine a vazão mássica de ar necessária para que ocorra a combustão do metano se a planta opera com uma carga de gás natural (metano) de 80.000 t/ano e que a fornalha opera com 20 % em excesso de ar.

Resposta: a) 
$$m_1/m_{
m B} pprox 0,6$$
 b) 313,55 t/h