



Princípios de processos químicos

Princípios de processos químicos

Delba Nisi Cosme Melo

© 2017 por Editora e Distribuidora Educacional S.A.
Todos os direitos reservados. Nenhuma parte desta publicação poderá ser reproduzida ou transmitida de qualquer modo ou por qualquer outro meio, eletrônico ou mecânico, incluindo fotocópia, gravação ou qualquer outro tipo de sistema de armazenamento e transmissão de informação, sem prévia autorização, por escrito, da Editora e Distribuidora Educacional S.A.

Presidente

Rodrigo Galindo

Vice-Presidente Acadêmico de Graduação

Mário Ghio Júnior

Conselho Acadêmico

Alberto S. Santana
Ana Lucia Jankovic Barduchi
Camila Cardoso Rotella
Cristiane Lisandra Danna
Danielly Nunes Andrade Noé
Emanuel Santana
Grasiele Aparecida Lourenço
Lidiane Cristina Vivaldini Olo
Paulo Heraldo Costa do Valle
Thatiane Cristina dos Santos de Carvalho Ribeiro

Revisão Técnica

Francine de Mendonça Fábrega
Roberta Lopes Drekenner

Editorial

Adilson Braga Fontes
André Augusto de Andrade Ramos
Cristiane Lisandra Danna
Diogo Ribeiro Garcia
Emanuel Santana
Erick Silva Griep
Lidiane Cristina Vivaldini Olo

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

M517p Melo, Delba Nisi Cosme
Princípios de processos químicos / Delba Nisi Cosme
Melo. – Londrina : Editora e Distribuidora Educacional S.A.,
2017.
224 p.

ISBN 978-85-8482-864-7

1. Processos químicos. I. Título.

CDD 660.28

2017

Editora e Distribuidora Educacional S.A.
Avenida Paris, 675 – Parque Residencial João Piza
CEP: 86041-100 – Londrina – PR
e-mail: editora.educacional@kroton.com.br
Homepage: <http://www.kroton.com.br/>

Sumário

Unidade 1 Fundamentos gerais sobre processos químicos	7
Seção 1.1 - Fundamentos gerais sobre processos químicos: conceitos de sistemas de unidade e cálculos de análise dimensional	9
Seção 1.2 - Principais variáveis dos processos químicos	25
Seção 1.3 - Exemplos sobre a aplicação dos conceitos de processos químicos	41
Unidade 2 Balanços de massa estacionários sem reações químicas	57
Seção 2.1 - Definição de balanço de massa em uma operação unitária	59
Seção 2.2 - Balanço de massa em múltiplas operações unitárias	77
Seção 2.3 - Exemplos sobre a aplicação dos balanços de massa sem reação química	99
Unidade 3 Balanços de massa estacionários com reações químicas	117
Seção 3.1 - Definição e tipos de balanço de massa com reação química	119
Seção 3.2 - Aplicações de balanço de massa com reação química em reações de combustão	137
Seção 3.3 - Aplicações de balanço de massa com reação química em reações múltiplas	153
Unidade 4 Balanços de massa em regime transiente	173
Seção 4.1 - Definição do balanço de massa em regime transiente	175
Seção 4.2 - Balanço de massa em regime transiente sem reação química	187
Seção 4.3 - Balanço de massa em regime transiente com reação química	203

Palavras do autor

O objetivo deste livro didático é apresentar os fundamentos e as ferramentas necessárias para o desenvolvimento das competências relacionadas à disciplina de *Princípios de Processos Químicos*. Para isto, serão estudados os processos, os conceitos fundamentais para a compreensão dos fenômenos físicos e químicos que ocorrem nestes para a conversão das matérias-primas em produtos. O livro abrange a experiência com a manipulação de unidades e dimensões, variáveis operacionais de processos, o aprendizado da formulação e da resolução de balanços materiais em estado estacionário e transiente com e sem reação química. Ao final de cada seção, o aluno poderá absorver aspectos práticos dos processos associados com os aspectos fundamentais dos princípios envolvidos com os conteúdos ministrados. Iniciaremos com uma breve introdução do que são processos químicos e suas aplicações, bem como a apresentação dos conceitos de dimensões e unidades e de grupos adimensionais e do princípio fundamental da homogeneidade dimensional das equações, que é a consistência homogênea e dimensional. Serão apresentadas as principais variáveis operacionais, seus conceitos e como manipulá-las dependendo da situação-problema contextualizada. E, por fim, será apresentado o recurso de utilização de planilhas eletrônicas no Excel, que é bastante conhecido, se tornando adequado para ser usado em simulações numéricas. O uso desses aplicativos computacionais na realização de simulações é uma tendência cada vez mais crescente nos currículos de Engenharia Química.

Os conceitos introduzidos e ministrados durante o curso constituirão a base para o entendimento e a aplicação dos princípios da Engenharia Química, então, deseja-se que o aluno os assimile e os transfira, contribuindo para o aspecto prático na aplicação dos princípios fundamentais estudados. Para a sua formação profissional, esse embasamento se faz necessário para o completo êxito na resolução dos problemas de Engenharia Química, já que esse curso abrange um amplo campo de aplicação, desde processos industriais relacionados à indústria de petróleo, de materiais e de alimentos. Desenvolver uma compreensão intuitiva dos mecanismos presentes nesses processos será um grande feito para o estudante, pois dessa forma podemos nos comunicar com ele e formar os engenheiros de amanhã, incentivando-os ao pensamento criativo e ao conhecimento mais profundo, claro e seguro dos princípios básicos e práticos desta disciplina, que servirão de base para as disciplinas futuras da sua grande curricular.

Espera-se, caro aluno, que, ao final deste livro, você tenha tido uma boa aprendizagem e tenha desenvolvido habilidades suficientes de raciocínio lógico, analítico e de uma boa prática de interpretação dos conteúdos ministrados.

Fundamentos gerais sobre processos químicos

Convite ao estudo

O objetivo desta unidade é introduzir ao estudante os princípios básicos e as técnicas de cálculos preliminares a serem usadas para construir e adquirir os fundamentos da aplicação dos balanços materiais que será visto nas próximas unidades. Para isso, serão estudados os fundamentos gerais sobre processos químicos, os sistemas de unidades e a análise dimensional.

Serão estudadas também as principais variáveis operacionais de processos e aplicações dos conhecimentos adquiridos em um determinado processo químico. Então, questões devem ser respondidas como: o que são processos químicos? Eles podem ser oriundos de processos bem elementares e simples ou mais complexos? O que é uma planta química? Uma dimensão pode ser reconhecida pelas suas unidades, podendo ser uma grandeza qualquer ou até uma variável de processo, quando se trata de um processo químico, e, portanto, precisa ser estudada.

Entender um processo químico, que faz parte de um típico processo industrial ou uma planta química será crucial para o desenvolvimento desta disciplina. Nesta unidade, uma breve introdução será dada aos processos químicos, quais são os elementos necessários para a sua análise, a obtenção dos produtos e propriedades a partir da matéria-prima e a identificação das principais variáveis envolvidas. Uma planta química é um conjunto de unidades de processamento que converte matérias-primas em produtos, chamadas operações unitárias, envolvendo transformações

físicas e/ou químicas (reatores, colunas de destilação, trocadores de calor, absorvedores, misturadores etc.), integradas umas com as outras de maneira sistemática e lógica. Diante do grau de complexidade ao lidar com uma planta química, o profissional necessita de uma sólida formação em todos os aspectos da Química, e os assuntos abordados nesta disciplina consistem na base para a sua formação.

Mediante os conteúdos abordados na presente unidade, você vai conhecer e compreender os principais conceitos e variáveis envolvidas em processos químicos, bem como as metodologias para os cálculos de balanço de massa, e conhecer e ser capaz de identificar e analisar os principais conceitos e variáveis envolvidas em processos químicos, alcançando os seguintes objetivos de aprendizagem: (1) apresentar os princípios básicos e introdutórios de processos químicos; (2) conhecer as dimensões e unidades e suas padronizações em processos químicos; (3) aprender a manipular e a converter determinadas variáveis operacionais de processos químicos; (4) desenvolver habilidades em conversão de unidades e homogeneidade dimensional de equações para a análise de processos químicos; e (5) introduzir e desenvolver o raciocínio lógico e prático na solução de problemas.

Você é convidado como analista de processos de uma empresa para fazer os cálculos das variáveis operacionais de entrada e de saída de um processo, devendo-se atentar para a análise dimensional e a conversão das unidades no processo envolvido. Especificamente, você foi convidado pelo engenheiro de projetos, que tinha como tarefa projetar uma tubulação subterrânea para o escoamento de óleo diesel que devia ser trocada de uma rede de distribuição desse óleo. O engenheiro de projetos pediu que você analisasse as condições de escoamento que a referida tubulação iria suportar e, como princípio básico, você precisa analisar as características de escoamento para aquela tubulação. Para isto, é necessário conhecer uma grandeza adimensional (sem dimensão) muito importante no estudo do escoamento, que é o número de Reynolds. É ela que define o regime de escoamento de fluidos no interior de tubulações.

Caro aluno, o desafio está lançado, e gostaria de convidá-lo a ler esta seção de estudos com interesse e entusiasmo, que ela não sirva somente para ser um guia para resolução de problemas, mas desperte em você um raciocínio criativo, intuitivo e profundo na sua percepção da disciplina.

Seção 1.1

Fundamentos gerais sobre processos químicos: conceitos de sistemas de unidade e cálculos de análise dimensional

Diálogo aberto

Para alguns profissionais, quando se fala em unidades ou conversão de unidades, o que vêm à mente é que elas não têm importância, e que é desnecessário o seu conhecimento na resolução dos problemas. No entanto, engana-se quem não atribui o devido valor ao tratá-las com negligência, e a confusão entre elas pode ter consequências catastróficas, como aconteceu com a Nasa (agência espacial americana), em 1999, quando admitiu que a desintegração da sonda enviada à Marte foi devido a um erro de conversão de unidades, em que o valor do raio da órbita foi fornecido em metros, e este deveria estar em pés (ft), o que levou a sonda a não resistir ao calor gerado pelo atrito ao ingressar na atmosfera marciana, já que o raio da órbita ficou menor, gerando um prejuízo à Nasa de US\$ 125 milhões de dólares. A habilidade na conversão das unidades deve ser desenvolvida, haja visto que nem sempre as dimensões são expressas nas unidades adequadas para que os cálculos das quantidades das variáveis envolvidas na análise de processos químicos sejam realizados adequadamente. O estudante, no fim desta unidade, será capaz de absorver os conceitos de dimensões, unidades e conhecer uma significativa seleção das variáveis de processos (propriedades) que serão muito importantes no decorrer da disciplina.

Como analista de processos de uma empresa, em uma primeira etapa, você deverá analisar os valores das características do projeto e das propriedades do óleo, pois o engenheiro de projetos as forneceu em unidades incompatíveis entre si, $\rho = 876 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$, $\mu = 0,2177 \frac{\text{kg}}{\text{m.s}}$, $D = 1,48 \text{ pé (ft)}$, a velocidade média de escoamento é de $v = 47.160 \frac{\text{m}}{\text{h}}$. Foi pedido, que as unidades fossem preparadas no SI (sistema internacional de unidades) tanto das propriedades quanto dos parâmetros de projeto fornecidos pelo engenheiro para você obter o número de Reynolds e analisar as condições de escoamento. É bom ressaltar que as unidades básicas,

no sistema internacional de unidades (SI), do comprimento é o metro (m), da massa é o quilograma (kg) e do tempo é o segundo (s).

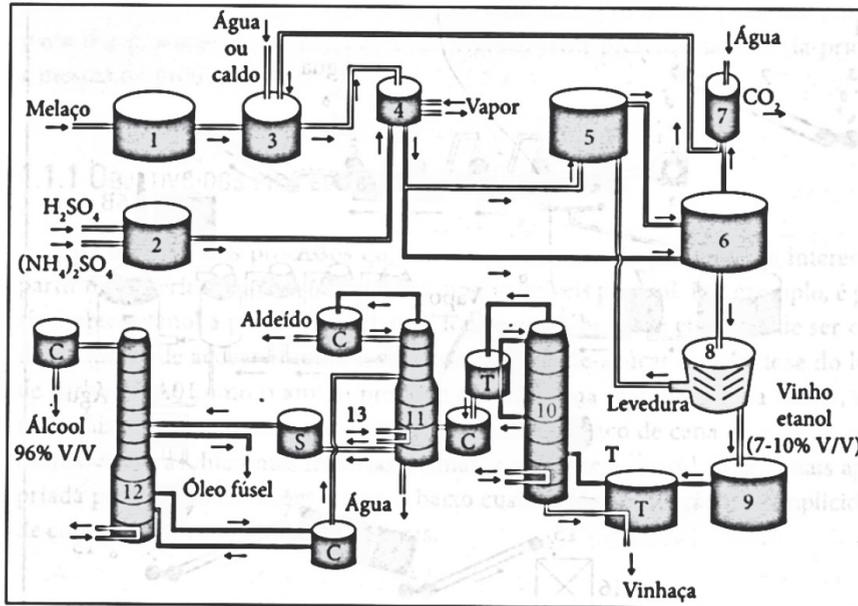
Em uma segunda etapa, para que você possa analisar o regime de escoamento que deve ser estabelecido no projeto da troca de tubulação necessário que o engenheiro irá projetar, você deve obter o valor do número de Reynolds e, de acordo com o valor encontrado, o regime de escoamento poderá ser do tipo laminar ou turbulento. O regime de escoamento é considerado laminar se $Re \leq 2300$, e o regime de escoamento é considerado turbulento se $Re > 2300$. Você terá oportunidade de estudar faixas mais amplas dessa grandeza em uma etapa mais avançada do seu curso de graduação e verificar que essa faixa estabelecida não será uma verdade absoluta, podendo variar na confecção de algumas correlações que serão utilizadas em outras disciplinas fundamentais, como as que envolvem os fenômenos de transferência de calor e de massa. A grandeza adimensional do número de Reynolds é que define o regime de escoamento de fluidos no interior de tubulações. Ele representa fisicamente a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas e, matematicamente, é definido como sendo $Re = \frac{\rho v D}{\mu}$, em que ρ é a massa específica do fluido (densidade), v é a velocidade média de escoamento, D é o diâmetro da tubulação e μ é a viscosidade do fluido, que é uma propriedade física dos fluidos que determina a sua resistência ao escoamento.

Com a contextualização do problema e das ferramentas de resolução, pretende-se comunicar com você, aluno, de uma maneira que o desperte não só para o aprendizado dos princípios básicos dos processos químicos, mas o incentive a aprender com a prática, levando você a revisar conceitos e intuições adquiridos na sua vida enquanto estudante.

Não pode faltar

Como definir um processo químico? Define-se como sendo qualquer operação ou conjunto de operações coordenadas que provocam transformações químicas e/ou físicas (as operações unitárias) de matérias-primas em produtos. O processo da produção do álcool é um processo bastante tradicional da indústria de processo químico e pode ser tomado como exemplo. Etapas como a moagem da cana, a filtração do caldo, a sua fermentação e a destilação deste filtrado fazem parte do processo como um todo. Assim, o conjunto de etapas necessárias para a realização de um determinado fim chama-se processo. Na Figura 1.1, a seguir, Badino Júnior e Cruz (2010) ilustraram o processo químico industrial de produção do álcool a partir da cana-de-açúcar.

Figura 1.1 | Fluxograma de produção de etanol: (1) tanque de pesagem, (2) tanque de mistura de nutrientes, (3) tanque de preparação do mosto, (4) tanque de esterilização do mosto, (5) tanque de tratamento de levedura, (6) dorna de fermentação, (7) coluna de lavagem de CO₂, (8) centrífuga, (9) dorna volante, (10) coluna de destilação, (11) coluna de purificação, (12) coluna de retificação, (13) vapor de água, (T) trocador de calor, (C) condensador, (S) separador

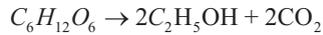


Fonte: adaptada de Badino Júnior e Cruz (2010).

Nesse processo, encontram-se diversas correntes que diferem entre si nas suas grandezas (propriedades), como quantidades ou vazões, e nas suas composições. E cada etapa de processamento, promove uma dada transformação química e/ou física, a partir da sua corrente de alimentação. Etanol ou bioetanol pode ser produzido de uma grande variedade de carboidratos com a fórmula geral de $(\text{CH}_2\text{O})_n$. A fonte de açúcares mais comum para a produção do etanol é a sacarose da cana-de-açúcar, devido ao seu baixo custo e à sua facilidade de obtenção por meio da conversão em etanol pelas leveduras. A fermentação da sacarose é realizada usando uma levedura comercial chamada de *Saccharomyces cerevisiae*. A reação química é composta pela hidrólise enzimática da sacarose seguida pela fermentação simples dos açúcares (GNANSOUNOU; DAURIAT; WYMAN, 2005). No processo de fabricação do etanol, primeiro, a sacarose presente no caldo clarificado e no mel final (melão) é inicialmente hidrolisada pela enzima invertase, produzida pela levedura *Saccharomyces cerevisiae*, gerando glicose ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$) e frutose ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$), conforme a reação a seguir:



Segundo, zimase, outra enzima também presente na levedura, converte a glicose e a frutose em etanol e dióxido de carbono, conforme a reação:



Na reação geração da glicose e frutose, as matérias-primas são transformadas em produtos por etapas, compostas por equipamentos específicos, cada um com a sua função e suas respectivas entradas e saídas. Conhecer as variáveis envolvidas e as leis fundamentais de conservação envolvidos é de fundamental importância para o entendimento dos fenômenos, e dos cálculos necessários para a análise dos processos. Esse processo será contextualizado em outras seções desse livro didático, quando todos os elementos necessários ao processo ensino-aprendizagem forem previamente apresentados. O objetivo até o momento é apresentar para você, aluno, um dos processos mais tradicionais da indústria química e mostrar os equipamentos que serão estudados ao longo da disciplina, como colunas de destilação, secadores, evaporadores, estão presentes nesse processo e poderão ser estudados individualmente ou interligados.

Dimensões, unidades e conversões

Como já citado anteriormente, o fato ocorrido com a Nasa, com o erro de transformação de unidades no lançamento da sonda à Marte, reforça a importância de se estabelecer normas técnicas, e uma das maneiras é o estabelecimento de unidades (ou dimensões) para medir, pesar e determinar a grandeza de outras propriedades que fazem parte do universo. Essa é uma das razões para que este assunto seja abordado.

Uma unidade é uma forma de atribuir um valor numérico a uma propriedade. Existe uma diferença básica entre dimensões e unidades; dimensão é uma medida de uma quantidade física (grandeza ou propriedade) sem valores numéricos, enquanto que unidade é uma forma de atribuir um número àquela dimensão. Assim, algumas propriedades apresentam dimensões características, que podem estar em unidades de diferentes sistemas. Não se realizam operações com valores numéricos de uma mesma grandeza em unidades distintas. As unidades em quaisquer operações devem ser homogêneas.

Existem sete dimensões primárias em todos os campos da ciência e da engenharia. São elas: a massa (M), o comprimento (L), o tempo (θ), a temperatura (T), a corrente elétrica (I), a quantidade de luz (cd) e a quantidade de matéria (N). Todas as outras dimensões podem ser formadas pela combinação das sete dimensões primárias e são chamadas dimensões secundárias. As três primeiras serão mostradas nesta seção,

como a temperatura e a quantidade de matéria, serão apresentadas na Seção 1.2.

Os sistemas de unidades para uso científico ou técnico devem ser correlacionados com as leis fundamentais da física, como a Segunda Lei de Newton, cujos sistemas físicos podem ser modelados por esta lei:

$$\text{Força} = \text{massa} \times \text{aceleração} = m \times g$$

Essa equação representa a força exercida por uma unidade de massa ao nível do mar, e a aceleração gravitacional g é a gravidade ao nível do mar.

Em função dessa correlação, pode-se definir três dimensões básicas: massa (M), comprimento (L), tempo (θ), e a partir da combinação dessas dimensões ou unidades, define-se a força, que satisfaz a Segunda Lei de Newton. Então, as dimensões de força (F) são $(M.L/\theta^2)$.

As unidades são valores específicos definidos por padronização para expressar as dimensões, a partir das dimensões básicas. Os sistemas de unidades mais usuais são os sistemas SI (Sistema Internacional de Unidades) e o Sistema Americano de Engenharia (SAE). O Sistema Internacional de Unidades (SI) é um conjunto sistematizado e padronizado de definições de unidades de medidas utilizado em quase todo o mundo moderno, que visa uniformizar as unidades e a comunicação entre países. O sistema SI é utilizado em mais de 30 países. O Reino Unido adotou oficialmente o SI, mas seu sistema usual de medidas é usado intensamente, como o pé (grafado como ft ou '), a polegada (grafada como inch, in ou ") e a libra (grafada como lb), e são unidades muito utilizadas em países da língua inglesa. Devido a um grande volume de textos em inglês, principalmente técnico-científicos e especificações de equipamentos, se faz necessário ainda o conhecimento dessas unidades de medidas. Uma unidade de uma mesma propriedade pode ser transformada ou convertida em outra unidade, por exemplo, 1 pé (feet) = 0,3048 m. A Tabela 1.1 apresenta as principais dimensões e suas unidades relacionadas nos diferentes sistemas de unidades.

Tabela 1.1 | Dimensões e unidades dos principais sistemas

Sistema de Unidades	Sistema Internacional (SI)		Sistema americano de engenharia (SAE)	
	Unidade	Símbolo	Unidade	Símbolo
Comprimento (L)	metro	m	pé	ft
Massa (M)	quilograma	kg	libra-massa	lbm
Tempo (θ)	segundo	s	segundo	s
Força (ML/ θ^2)	newton (kg.m/s ²)	N	libra-força	lbf
Pressão (M/L θ^2)	pascal (N/m ²)	Pa	lbf/in ²	psi

Fonte: elaborada pelo autor.

Os sistemas de unidades para uso científico ou técnico devem ser correlacionados com as leis fundamentais da física, por exemplo, com a Segunda Lei de Newton, cujos sistemas físicos podem ser modelados por esta lei de acordo com a equação que relaciona massa e aceleração, apresentada anteriormente.

A força se relaciona com a massa e com a aceleração da gravidade por uma constante inversamente proporcional chamada g_c , muito importante para garantir a coerência dimensional e numérica entre as grandezas. O valor dessa constante e da sua unidade dependem dos padrões utilizados para as grandezas básicas: massa e comprimento, e as derivadas delas, como a força, e o g_c , cujas dimensões são $g_c = M.L/F.\theta^2$. Assim, a força é relacionada com g_c da seguinte forma:

$$\text{Força} = \text{massa} \times \text{aceleração} = m \times g/g_c$$

Nos sistemas que têm como grandezas fundamentais ou primárias comprimento, massa e tempo (referidos como Absolutos) ou comprimento, força e tempo (referidos como Gravitacionais), o valor de g_c é 1, nas devidas unidades. Quando usam como grandezas fundamentais, comprimento, massa, força e tempo (tidos como Gravitacionais Mistos), o valor de g_c é diferente de 1, nas devidas unidades. Para sistemas gravitacionais mistos, a própria aceleração da gravidade padrão (ao nível do mar) é o valor de g_c expressa nas unidades do sistema considerado.

Para qualquer sistema, g_c é o símbolo de conversão de unidades, que ao multiplicar ou dividir uma determinada grandeza por g_c o valor numérico da grandeza não muda, mas apenas as suas unidades e, neste caso, $g_c = 1,0$. Portanto, ao usarmos o sistema internacional de unidades para a massa, o quilograma, o comprimento, o metro, o tempo e o segundo, a unidade de força correspondente para acelerar um quilograma de massa por um metro por segundo ao quadrado é:

$$\text{Força} = 1(\text{kgm}) \times 1(\text{m} / \text{s}^2) \equiv \text{N(newton)} \Rightarrow \text{da análise dimensional de } g_c = \left(\frac{1\text{kgm} \times \text{m}}{\text{N} \times \text{s}^2} \right) = 1 \text{ (ou seja, valor unitário)}$$



Assimile

Considerando o sistema de unidades inglesas, com a massa estando em lbm, o comprimento em ft e o tempo em s.

$$\text{Força} = 1(1 \text{ lbm}) \times 1(\text{ft} / \text{s}^2) \equiv \text{poundal (unidade de força)}$$

$$\text{da análise dimensional de } g_c = \frac{(1\text{lbm} \times \text{ft})}{\text{poundal} \times \text{s}^2} = 1 \text{ (ou seja, valor unitário, } g_c = 1)$$

Na conversão de unidades, para se converter uma unidade de uma dada dimensão que está expressa em determinado sistema de unidades em outra unidade num sistema de unidades diferente, basta multiplicar a dimensão pelo fator de conversão de unidades (FC), que relaciona a unidade nova e a unidade velha. O importante de ser observado nessa conversão é que sempre as unidades velhas irão desaparecer, elas se cancelam.

$$\text{Fator de Conversão (FC)} = [\text{Unidade nova} / \text{Unidade velha}]$$

A Tabela 1.2 apresenta um resumo dos fatores de conversões de unidades relacionadas com as principais dimensões encontradas nos processos químicos.

Tabela 1.2 | Fatores de conversões entre dimensões e unidades

Dimensões	Fatores de Conversão
Massa (M)	$1\text{kg} = 1.000\text{ g} = 2,20462\text{ lb}_m$; $(1)\text{ lb}_m = 453,593\text{ g}$
Comprimento (L)	$1\text{ m} = 100\text{ cm} = 1.000\text{ mm} = 39,37\text{ in} = 3,2008\text{ ft}$ $(1\text{ft} = 0,3048\text{m}, 1\text{ft} = 12\text{in})$
Volume (L ³)	$(1\text{ m}^3 = 1.000\text{ L (litros)} = 10^6\text{ cm}^3 = 10^6\text{ mL} = 35,3145\text{ ft}^3)$ $(1\text{ft}^3 = 1,728\text{in}^3 = 0,028317\text{m}^3 = 28,317\text{L})$
Força (ML/θ ²)	$(1\text{N} = 1\text{kg}\cdot\text{m}/\text{s}^2 = 10^5\text{ dinas} = 10^5\text{ g}\cdot\text{cm}/\text{s}^2 = 0,22481\text{ lbf})$ $(1\text{ lbf} = 32,174\text{ lbm}\cdot\text{f}/\text{s}^2 = 4,4482\text{ N} = 4,4482 \times 10^5\text{ dina})$
Pressão (M/Lθ ²)	$1\text{ atm} = 1,01325 \times 10^5\text{ N}/\text{m}^2\text{ (Pa)} = 101,325\text{ kPa} = 1,01325 \times 10^6\text{ dina}/\text{cm}^2$ $1\text{ atm} = 760\text{ mmHg} = 14,697\text{ lbf}/\text{in}^2\text{ (psi)}$

Fonte: elaborada pelo autor.



Exemplificando

Exemplo 1.1: Converter as seguintes quantidades, usando a Tabela 1.2 de conversão:

a. 1.000 g em kg.

Solução:

$$1.000\text{g} \cdot \left(\frac{1\text{kg}}{1000\text{g}} \right) = \underline{\underline{1\text{kg}}}$$

b. 36 polegadas em ft.

Solução:

$$36 \text{ in} \cdot \left(\frac{1 \text{ ft}}{12 \text{ in}} \right) = \underline{\underline{3 \text{ ft}}}$$

c. 30 lbm/s em kg/min.

Solução:

$$\frac{30 \text{ lbm}}{\text{s}} \cdot \left(\frac{1 \text{ kg}}{2,205 \text{ lbm}} \right) \left(\frac{60 \text{ s}}{1 \text{ min}} \right) = \underline{\underline{816,3 \frac{\text{kg}}{\text{min}}}}$$

d. Converter 3.000 g.m/min² em lbf.

Solução:

$$3.000 \text{ g} \cdot \frac{\text{m}}{\text{min}^2} \cdot \left(\frac{1 \text{ lbm}}{453,593 \text{ g}} \right) \cdot \left(\frac{3,2808 \text{ ft}}{1 \text{ m}} \right) \cdot \left(\frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \right)^2 \cdot \left(\frac{1 \text{ lbf}}{32,174 \text{ lbm} \cdot \text{ft}/\text{s}^2} \right) = \underline{\underline{1,87 \cdot 10^{-4} \text{ lbf}}}$$

Observamos nesses exemplos que é possível converter várias unidades em uma mesma linha, utilizando-se apenas os diferentes fatores de conversão, bem como pode-se desprezar a regra de três na conversão de unidades, pois com o uso dos fatores de conversão torna-se a tarefa de conversão de unidades mais fácil e precisa. O fato é que, nos cálculos, o desenvolvimento de habilidades na conversão de unidades deve ser uma constante, em função dos inúmeros cálculos presentes de projeto e de processos envolvendo os processos químicos, de um modo geral, dificultando-se, assim, o simples uso da regra de três. Você também se beneficia com o constante conhecimento das dimensões e das unidades das quantidades envolvidas e pode atentar-se para a reflexão do significado físico de cada uma quantidade envolvida, minimizando os riscos de erros nos seus cálculos.



Refleta

Novamente o sistema de unidades inglesas é escolhido para as grandezas básicas que relacionam a força, mas a unidade de força é considerada como sendo a força exercida por uma unidade de massa ao nível do mar e a aceleração é a da gravidade ao nível do mar (sistemas gravitacionais). Portanto, será que g_c continuará assumindo valores unitários? Nesse caso, $g = 32,2 \text{ ft}/\text{s}^2$, e a unidade de força é o libra-força (lbf). Então,

$$(1)(1 \text{ lbf}) = (1)(\text{lbm}) \times (32,2) \left(\frac{\text{ft}}{\text{s}^2} \right) \equiv (\text{unidade de força})$$

$$e \quad (1) = \frac{(32,2 \text{ lbm} \times \text{ft})}{1 \text{ lbf} \times \text{s}^2} = g_c = 32,2 \text{ (ou seja, } g_c \neq 1)$$



Faça você mesmo

Considere uma nova situação, em que a unidade de força é definida a partir de uma força exercida por um kg de massa ao nível do mar, e as unidades de comprimento e tempo são metro, segundo, respectivamente. Nesse caso, $g = 9,80 \text{ m/s}^2$. Quais são as unidades de força e o novo valor de g_0 ?

Homogeneidade dimensional

As dimensões em ambos os lados do sinal de igualdade de uma equação devem ser as mesmas. Em outras palavras, isso quer dizer que essa equação deve ser dimensionalmente homogênea. Assim, só se pode aplicar as operações matemáticas básicas de soma e de subtração das quantidades de uma equação, se tais quantidades apresentarem as mesmas dimensões e unidades. A equação, para ser dimensionalmente homogênea ou ter consistência dimensional, é necessário que todos os termos apresentem as mesmas dimensões e unidades, mas nem sempre toda equação dimensionalmente homogênea é válida. Isso decorre do princípio de que toda equação válida é dimensionalmente homogênea, mas nem sempre é verdadeiro que ela seja dimensionalmente homogênea e válida.



Exemplificando

Exemplo 1.2: Quais das seguintes equações são dimensionalmente homogêneas?

$$\text{a) } x(m) = x_0(m) + 0,3048 \left(\frac{m}{ft} \right) v \left(\frac{ft}{s} \right) t(s) + 0,5a \left(\frac{m}{s^2} \right) t(s^2)$$

Solução: uma equação é dimensionalmente homogênea se ambos os lados da equação tiverem as mesmas unidades.

Análise:

$$x(m) = x_0(m) + 0,3048 \left(\frac{m}{s} \right) v \left(\frac{m}{s} \right) t(s) + 0,5a \left(\frac{m}{s^2} \right) t(s^2)$$

$$m \quad [=] \quad m + \quad m \quad + \quad m$$

Portanto, **essa equação é dimensionalmente homogênea**, porque cada termo tem a unidade de comprimento (m).

$$\text{b) } P \left(\frac{kg}{m.s^2} \right) = 101.325 \left(\frac{Pa}{atm} \right) 1 \left(\frac{kg / m.s^2}{Pa} \right) P_0(atm) + \rho \left(\frac{kg}{m^3} \right) v \left(\frac{m}{s} \right)$$

Solução: uma equação é dimensionalmente homogênea se ambos os lados da equação tiverem as mesmas unidades

Análise:

$$P\left(\frac{kg}{m.s^2}\right) = 101.325\left(\frac{Pa}{atm}\right)1\left(\frac{kg/m.s^2}{Pa}\right)P_0(atm) + \rho\left(\frac{kg}{m^3}\right)v\left(\frac{m}{s}\right)$$

$$\frac{kg}{m.s^2} [=] \quad \frac{kg}{m.s^2} \quad + \frac{kg}{m^2.s}$$

Portanto, **essa equação não é dimensionalmente homogênea**, porque cada termo teria que ser dimensionalmente consistente e, nesse caso, eles não são.

a) A seguinte relação é dimensionalmente homogênea e consistente. Suponha que a composição C varia com o tempo, de acordo com a seguinte expressão:

$$C = 0,03e^{(-2t)}, C \text{ tem as unidades } kg/L \text{ e } t \text{ está em segundos.}$$

Quais são as unidades associadas com C e as constantes $0,03$ e 2 ?

Solução: Como a equação é dimensionalmente homogênea e consistente, significa que ambos os lados da igualdade da equação têm as mesmas unidades, em outras palavras, pela lei da homogeneidade dimensional. Neste caso, a constante deve ter as mesmas dimensões de cada termo da equação.

Se a unidade de C é kg/L , isso implica que as unidades de $0,03$ também devem ser kg/L , já que existe o argumento de que a função exponencial deve ter um resultado adimensional (sem dimensão). Como o tempo está em segundos, as unidades de 2 é s^{-1} , o que torna a função exponencial sem dimensão. Conclui-se, portanto, que:

$$C\left(\frac{kg}{L}\right) = 0,03\left(\frac{kg}{L}\right)e^{\left(\frac{-2t(s)}{s}\right)},$$

$$\left(\frac{kg}{L}\right) = \left(\frac{kg}{L}\right)$$

Quantidades adimensionais

O número de Reynolds, que mede o tipo de escoamento de fluidos, é uma clássica grandeza adimensional, ou seja, sem dimensão. Sabe-se que:

$$Re = \rho \cdot v \cdot D / \mu$$

onde ρ é a densidade ou massa específica do fluido; v é a velocidade média do fluido; D é o diâmetro da tubulação e μ é a viscosidade dinâmica do fluido.

Existem duas maneiras de se verificar a adimensionalidade:

Primeiro, pelas dimensões individuais das grandezas que se correlacionam com o número de Reynolds, com a dimensão de:

$$\rho = M/L^3; v = L/\theta; D = L \text{ e } \mu = M/L\theta$$

$$Re = \rho \cdot v \cdot D / \mu = \left(\frac{M}{L^3}\right) \cdot \left(\frac{L}{\theta}\right) \cdot (L) / \left(\frac{M}{L\theta}\right) = \text{adimensional (não tem dimensão)}$$

Segundo, ao considerar que as unidades presentes nas grandezas que relacionam o número de Reynolds estão no sistema internacional de unidades:

$$\rho = \text{kg}/\text{m}^3; v = \text{m}/\text{s}; D = \text{m} \text{ e } \mu = \text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$$

$$Re = \rho \cdot v \cdot D / \mu = \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) \cdot \left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right) \cdot (\text{m}) / \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}}\right) = \text{adimensional} \Leftrightarrow \text{as unidades se cancelam}$$



Exemplificando

A viscosidade é uma propriedade do fluido que relaciona a sua resistência ao escoamento. A viscosidade dinâmica (μ) de um fluido tem dimensões de massa por comprimento por tempo ($M/L\theta$). No sistema CGS (unidades básicas como (cm-g-s), o poise (g/(cm.s)) é a unidade derivada definida ou equivalente de viscosidade. Sabendo-se que a água a 25 °C apresenta viscosidade de 1 centipoise (cp), em que 1 cp = 10⁻² poise, obtenha a viscosidade da água em Pa.s e em psi.h.

Solução:

μ em Pa.s →

$$\mu = 1 \text{ cp (centipoise)} \times \frac{\text{poise}}{100 \text{ cp}} \times \frac{\text{g}}{\text{cm}\cdot\text{s}\cdot\text{poise}} \times \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} \times \frac{100 \text{ cm}}{1 \text{ m}} = 0,001 \frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}} \text{ (sistema SI)}$$

$$\text{ou } \mu = 0,001 \frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}} \times \frac{1 \text{ Pa}\cdot\text{s}}{1 \text{ N}\cdot\text{s}/\text{m}^2} \times \frac{1 \text{ N}}{1 \text{ kg}\cdot\text{m}/\text{s}^2} = \underline{\underline{0,001 \text{ Pa}\cdot\text{s}}} \text{ (sistema SI)}$$

em psi.h em que psi = lbf/in² →

$$\mu = 1 \text{ cp (centipoise)} \times \frac{\text{poise}}{100 \text{ cp}} \times \frac{\text{g}}{\text{cm}\cdot\text{s}\cdot\text{poise}} = 0,01 \frac{\text{g}}{\text{cm}\cdot\text{s}}$$

$$\mu = 0,01 \frac{\text{g}}{\text{cm}\cdot\text{s}} \times \frac{1 \text{ lbm}}{454 \text{ g}} \times \frac{30,5 \text{ cm}}{1 \text{ ft}} \times \frac{1 \text{ lbf}}{\text{lbm}\cdot\text{ft}/\text{s}^2} = 0,000671806 \frac{\text{lbf}}{\text{ft}^2} \frac{\text{s}}{\text{s}}$$

$$\mu = 0,000671806 \frac{\text{lbf}\cdot\text{s}}{\text{ft}^2} \times \frac{1^2 \text{ ft}^2}{(12)^2 (\text{in}^2)} = 0,00004665 \frac{\text{lbf}\cdot\text{s} \times \frac{1 \text{ h}}{3.600 \text{ s}}}{\text{in}^2} = \underline{\underline{1 \times 10^{-9} \text{ psi}\cdot\text{h}}}$$



Pesquise mais

Sobre conversão de unidades com tabelas mais amplas de conversão de unidades, consultar o livro de David M. Himmelblau, James B. Riggs, disponível em: <<https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/978-85-216-2711-1/cfi/6/32!/4/60/18/2/2@0:0>>. Acesso em: 6 dez. 2016. E o livro de Terron, disponível em: <<https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/978-85-216-2174-4/cfi/3!/4/2@100:0.00>>. Acesso em: 6 dez. 2016.

Você pode acessar os links acima fazendo login em sua área do estudante!



Vocabulário

θ é a dimensão de tempo.

T é a dimensão de temperatura.

L é a dimensão da grandeza básica comprimento.

L é o símbolo para litro, quando se tratar da unidade de volume adotado pela Conferência Geral de Pesos e Medidas (CGPM).

Sem medo de errar

A sua atuação como analista de processos na empresa obriga você a atender às solicitações do seu colega, o engenheiro de projeto, para que ele desempenhe satisfatoriamente a tarefa de projetar uma tubulação subterrânea para o escoamento de óleo diesel na rede de distribuição de óleo na empresa. O engenheiro de projetos pediu que você analisasse as condições de escoamento que a referida tubulação iria suportar e, como princípio básico, você precisa analisar as características de escoamento da tubulação. Para isso, é necessário conhecer uma grandeza adimensional (sem dimensão) muito importante no estudo do escoamento, que é o número de Reynolds, pois ela é que define o regime de escoamento de fluidos no interior de tubulações.



Atenção

Passos para resolver o problema:

1. Identifique o sistema de unidades-base do problema em questão.

2. Verifique se os dados fornecidos estão nas mesmas unidades de medidas. Se sim migre para o passo 3. Se não, procure nas tabelas de conversão de unidades os fatores de conversão necessários para preparar as suas variáveis no mesmo grupo de unidades.
3. Use a equação que define o cálculo do número de Reynolds e substitua os valores numéricos das propriedades e dos parâmetros envolvidos, bem como os fatores de conversão, se necessário.
4. Realize os cálculos do número de Reynolds.

Então, como analista de processos, em uma primeira etapa, é necessário que você analise e prepare os valores das características de projeto e das propriedades do óleo fornecidos pelo engenheiro de projetos: $\rho = 876 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$, $\mu = 0,2177 \frac{\text{kg}}{\text{m.s}}$, $D = 1,48 \text{ pé (ft)}$, a velocidade média de escoamento é de $v = 47.160 \frac{\text{m}}{\text{h}}$ e calcule o número de Reynolds com o objetivo de analisar as condições de escoamento.

Solução:

- Sistema de unidade padrão? Sistema Internacional de Unidades.
- Sistema com mesma unidade? Miscelânea de unidades.
- Precisa o uso de fatores de conversão de unidades? Sim.
- Dados fornecidos: $\rho = 876 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$, $\mu = 0,2177 \frac{\text{kg}}{\text{m.s}}$, $D = 1,48 \text{ pé (ft)}$ e $v = 47.160 \frac{\text{m}}{\text{h}}$
- Cálculo do número adimensional Re:

$$\text{Re} = \frac{\rho \cdot v \cdot D}{\mu} = \frac{\left(876 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) \cdot \left(47.160 \frac{\text{m}}{\text{h}}\right) \cdot (1,48 \text{ ft}) \times \left(\frac{0,3048 \text{ m}}{1 \text{ ft}}\right) \times \frac{1 \text{ h}}{3.600 \text{ s}}}{0,2177 \frac{\text{kg}}{\text{m.s}}} =$$

$$\text{Re} = 2,377 \times 10^4 \text{ (a dimensional)}$$

Observando o cálculo realizado, conclui-se que o regime é turbulento, pois o valor é maior do que 2.000.

Resolução da situação-problema

Para verificar se o etanol tem a especificação para ser comercializado, você deve analisar e/ou calcular a densidade dos fluidos envolvidos e verificar se os valores encontrados estão dentro das especificações exigidas pela Agência Nacional de Petróleo (ANP), que estabelece que a densidade dos fluidos envolvidos não deve ultrapassar $0,812 \text{ g/cm}^3$ a 20°C .

Solução

Considere a densidade ou massa específica de um fluido definida pela razão entre a massa de uma substância e o seu volume: $\rho = \frac{m}{V}$, cujas dimensões são: $\rho = \frac{M}{L^3}$, em que **a massa = M e o Volume = L³**. O valor de referência dado no problema da densidade está no sistema de unidades CGS (g-cm-s). Portanto, todas as unidades devem estar nesse sistema: $\rho = \frac{m}{V} = \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$. Então, você resume os seus cálculos na Tabela 1.3, a seguir:

Tabela 1.3 – Resumo de cálculos

Grandezas	Posto A	Posto B
Massa (m)	201,8 g	205,8 g
Volume (V)	250 mL	250 mL
Densidade (ρ)	$\rho_A = \frac{m_A}{V_A}$ $\rho_A = \frac{201,8\text{g}}{(250 \text{ mL})} \cdot \frac{10^6 \text{ mL}}{10^6 \text{ cm}^3}$ $\rho_A = \underline{\underline{0,8072 \text{ g/cm}^3}}$	$\rho_B = \frac{m_B}{V_B}$ $\rho_B = \frac{205,8\text{g}}{(250 \text{ mL})} \cdot \frac{10^6 \text{ mL}}{10^6 \text{ cm}^3}$ $\rho_B = \underline{\underline{0,8232 \text{ g/cm}^3}}$

Fonte: elaborada pelo autor.

Logo, ao calcular a densidade dos fluidos envolvidos e comparar com as especificações exigidas, você pode concluir que o etanol hidratado destinado ao posto B está fora da especificação e a distribuidora não deverá repassar o produto para ser comercializado.

Faça valer a pena

1. No sistema internacional, a unidade de força é o newton (N) e representa a força necessária para acelerar uma massa de 1 kg a uma taxa de 1 m/s^2 . No sistema inglês, a unidade de força é a libra-força (lbf), definida como sendo a força necessária para acelerar uma massa de 32,174 lbf a uma taxa de 1 ft/s^2 . O peso também é uma força, sendo definido como a força gravitacional aplicada a um corpo, calculado pela Segunda Lei: $W = m \times g$ (N).

Nas condições expressas no texto-base, para o sistema internacional, a força é de 1 N, e no sistema inglês, é de 1 lbf. Se na Terra um determinado

corpo pesa 1 lbf, será que ele terá a mesma massa correspondente à força de 1 lbf? Considere $g = 32,174 \text{ ft/s}^2$ como sendo a aceleração da gravidade na Terra.

- a) Sim, como a força é de 1 lbf e o seu peso também, a massa é de 32,174 lbm.
- b) Sim, a massa é a mesma independente de sua localização.
- c) Não, o peso de 32,174 lbm é 32,174 lbf.
- d) Sim, para um peso de 1 lbf, a massa correspondente é de 32,174 lbm.
- e) Não, a massa correspondente a 1 lbf em peso é 1 lbm.

2. A dimensão das grandezas é de grande importância não só na análise da consistência dimensional das equações (homogeneidade dimensional), mas também no desenvolvimento dos métodos para adimensioná-las, bem como para identificar possíveis grupos adimensionais, como é o caso da grandeza adimensional número de Reynolds. Para isso, ao executar uma análise dimensional, uma das primeiras etapas é listar as dimensões primárias (básicas) de cada parâmetro relevante.

Se força (F), comprimento (L) e tempo (θ) são selecionadas como sendo três dimensões fundamentais, qual é a dimensão da massa?

- a) L. c) M. e) θ .
- b) N. d) F.

3. Define-se a constante do gás ideal como R, para determinado gás, e a lei do gás ideal pode ser reescrita da seguinte maneira: $P = \rho.R.T$, onde P é a pressão, V é o volume, T é a temperatura e ρ é a densidade do gás.

Quais são as dimensões primárias de R?

- a) $L^2 / \theta^2.T$
- b) $N / M.\theta$
- c) $M.L / \theta^2.T$
- d) $M^2.L / N$
- e) $M.L^2 / \theta^2.N.T$

Seção 1.2

Principais variáveis dos processos químicos

Diálogo aberto

Em processos químicos é muito usual a presença de fluidos, que são constituídos de substâncias puras ou misturas de substâncias envolvendo as fases líquida ou gasosa, ou soluções e suspensões de sólidos em líquidos ou gases. Esses fluidos são transportados de um ponto para outro do processo por tubulações, por isso, é necessário conhecer a quantidade conduzida desses fluidos ou de algum soluto presente nas soluções ou suspensões que são transportadas. A quantidade de matéria transportada por unidade de tempo pelas tubulações é uma variável de processo muito importante não só no estudo do escoamento dos fluidos, mas também para os cálculos de balanços de massa em processos químicos. Essa variável é conhecida como sendo a vazão, que pode ser definida em termos mássico, molar ou volumétrico. Na prática, muitas vezes essa grandeza é medida utilizando-se instrumentos de medição de vazão como medidores de vazão, do tipo rotâmetro, medidor placa de orifício, medidor de Venturi, entre outros. É importante, no estudo do transporte desses fluidos, conhecer o tipo de escoamento presente, algumas propriedades físicas e detalhes de projeto das tubulações. Para definir o tipo de regime de escoamento, se é laminar ou turbulento, entra no estudo um grupo adimensional chamado número de Reynolds que, para o seu cálculo, é necessário conhecer as propriedades físicas do fluido transportado, a sua velocidade média e o diâmetro da tubulação. Para a conversão da vazão do fluido transportado, seja ela em termo mássico ou volumétrico, é importante conhecer uma propriedade física do fluido, nesse caso, a densidade do fluido, que é utilizada como um fator de conversão dessa grandeza, já que ela relaciona diretamente a vazão mássica de escoamento do fluido com a sua vazão volumétrica. Para a vazão molar, uma variável importante é a quantidade de substância, o mol, bem como a sua massa molar ou peso molecular, que é um fator de conversão de unidades de massa em unidades de mol e vice-versa.

Para calcular o valor de Reynolds, você necessita do cálculo da massa específi-

ca que, por sua vez, relaciona a vazão mássica, proporcionalmente, com a massa específica e a vazão volumétrica. A relação entre a vazão mássica (\dot{m}) e a vazão volumétrica (\dot{V}), com uma constante de proporcionalidade (massa específica), é representada pela equação: $\dot{m} = \rho \cdot \dot{V}$. O engenheiro de projetos forneceu os valores das seguintes grandezas, a vazão mássica ($\dot{m} = 1830,84 \text{ kg/s}$) e a vazão volumétrica ($\dot{V} = 2,09 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$), que são variáveis de processos dentro do estudo e da aplicação em processos químicos. Sendo um analista de processos, como você analisaria as condições de escoamento?

Não pode faltar

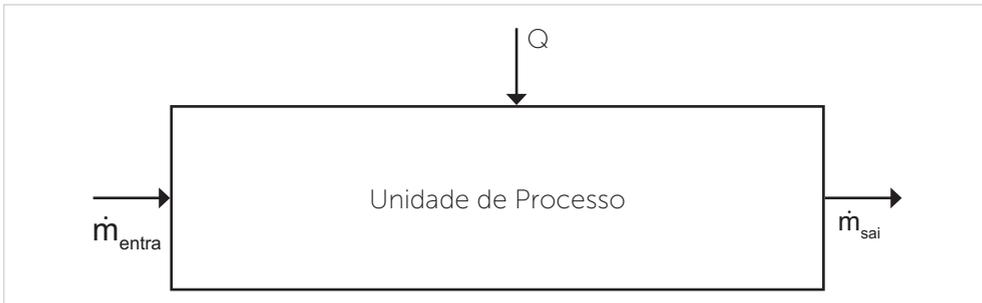
Processo e variável de processo

Um processo é qualquer operação ou série de operações que causa mudanças físicas ou químicas em uma substância ou uma mistura de substâncias.

Diagrama de fluxo ou fluxograma de um processo

Um fluxograma do processo é uma sequência de unidades de processos conectados por correntes de processos. No fluxograma mostram-se os fluxos de material e de energia através de uma unidade de processo, conforme mostra a Figura 1.2, a seguir.

Figura 1.2 | Fluxos materiais e de energia em uma unidade de processo



Fonte: elaborado pelo autor.

Unidade de processo

Uma unidade de processo é um aparelho/equipamento em que uma das operações que constitui um processo é realizado. Cada unidade de processo está associada com um grupo de entradas e saídas de "correntes de processo", que consiste de materiais que entram e saem da unidade.

Corrente de processo

Uma corrente de processo é uma linha que representa o movimento do material para ou de unidades de processo. Tipicamente essas correntes são carregadas com informação de quantidades, por exemplo, composição, temperatura e pressão dos componentes.

Vazão mássica (\dot{m})

Uma vazão mássica ou taxa de fluxo mássico (em uma base tempo) em que um material é transportado pela linha do processo é:

$$\underline{\dot{m} = \rho \cdot \dot{V}}$$

Em que,

\dot{m} é a vazão mássica do fluido.

ρ é a massa específica do fluido.

\dot{V} é a vazão volumétrica do fluido.

$$\text{Análise dimensional } [\dot{m}] = [\rho] \cdot [\dot{V}] \Rightarrow \frac{[m]}{[t]} = \left(\frac{[m]}{[V]} \right) \cdot \left(\frac{[V]}{[t]} \right)$$

$$\frac{M}{\theta} = \left(\frac{M}{L^3} \right) \cdot \left(\frac{L^3}{\theta} \right) \Rightarrow \underline{\underline{\frac{M}{\theta} = \frac{M}{\theta}}}$$

$$\text{Unidades no sistema internacional } \dot{m} \left(\frac{kg}{s} \right) = \left(\frac{kg}{m^3} \right) \cdot \left(\frac{m^3}{s} \right) = \underline{\underline{kg / s}}$$

Vazão volumétrica (\dot{V})

Uma vazão volumétrica ou taxa de fluxo volumétrico (em uma base tempo) em que um material é transportado pela linha de processo é:

$$\text{Vazão volumétrica } (\dot{V}) = \text{volume/tempo em que: } \underline{\underline{\dot{V} = \frac{\dot{m}}{\rho}}}$$

$$\text{Análise dimensional } [\dot{V}] = \frac{[\dot{m}]}{[\rho]} \Rightarrow \frac{\left(\frac{[m]}{[t]} \right)}{\left(\frac{[m]}{[V]} \right)} = \left(\frac{[m]}{[t]} \right) \cdot \left(\frac{[V]}{[m]} \right) = \frac{M}{\theta} \cdot \frac{L^3}{M}$$

$$[\dot{V}] = \underline{\underline{\frac{L^3}{\theta}}}$$

Unidades no Sistema Internacional $\dot{V} \left(\frac{m^3}{s} \right) = \frac{L^3}{\theta} = \underline{\underline{m^3 / s}}$



Assimile

Note que a densidade de um fluido é usada para converter uma vazão volumétrica conhecida de uma corrente de um processo para a vazão mássica da corrente particular ou vice-versa. Densidade (ρ) pode ser escrita como $\underline{\underline{\rho = \frac{m}{V} = \frac{\dot{m}}{\dot{V}}}}$.

Vazão molar (\dot{n})

A vazão molar é uma razão do número de mols por unidade de tempo, ou seja, é uma taxa de fluxo molar ($\dot{n} = \frac{n}{t}$). A relação entre a vazão molar e a vazão mássica é representada por um fator de conversão chamado massa molar média, ou peso molecular médio (\bar{M}_w), representada pela equação ($\dot{n} = \frac{\dot{m}}{\bar{M}_w}$) (para fluidos: líquidos e gases). Ou ainda pode ser definida pela lei dos gases ideais: $\underline{\underline{P\dot{V} = \dot{n}RT}} \Rightarrow \underline{\underline{\dot{n} = \frac{P\dot{V}}{RT}}}$ (para gases).

Frações volumétrica e mássica e molares

A concentração pode ser expressa de várias maneiras: peso/fração em peso (w/w), peso/fração em volume (w/v), concentração molar (M) e fração molar. A concentração em peso/peso é o peso do soluto dividido pelo peso total da solução, e essa é a forma fracional da composição em percentagem por peso. A concentração na forma peso/volume é o peso do soluto dividido pelo volume total da solução. A concentração molar é o número de moles do soluto, expresso em mols, dividido pelo volume da solução. A fração molar é a razão do número de mols do soluto pelo número de mols total de todas as espécies presentes na solução.

Fração mássica e fração molar

As correntes de processo ocasionalmente contêm uma substância; muitas vezes elas consistem de misturas de líquidos ou gases, ou soluções de um ou mais solutos em um solvente líquido. Os seguintes termos são usados para definir essas composições de uma mistura de substâncias, incluindo a espécie A:

Fração mássica

$$\text{Fração mássica: } x_A = \frac{\text{massa de } A}{\text{massa total}}$$

$$\text{no sistema internacional: } x_A = \frac{\text{massa de } A}{\text{massa total}} = \frac{m_A}{m} = \frac{\text{kg de } A}{\text{kg da mistura}} \text{ (portanto é uma fração)}$$

ou em sistemas de unidades distintos:

$$x_A = \left(\frac{g_A}{g}, \frac{kg_A}{kg}, \frac{lbm_A}{lbm} \right)$$

Fração molar

$$\text{Fração molar: } y_A = \frac{\text{mols de } A}{\text{número de mols total}}$$

$$\text{no sistema internacional: } y_A = \frac{n_A}{n} = \frac{\text{mol de } A}{\text{mol da mistura}} \text{ (portanto é uma fração)}$$

ou em sistemas de unidades distintos:

$$y_A = \left(\frac{gmol_A}{gmol}, \frac{kmol_A}{kmol}, \frac{lbmol_A}{lbmol} \right)$$



Assimile

Frações mássicas podem ser convertidas em frações molares ou vice-versa, assumindo uma base de cálculo. E lembre que, como elas expressam uma fração, são sem dimensões e/ou sem unidades (adimensional).

Mols (quantidade de matéria), massa molecular (massa molar) e vazão molar

Peso atômico é a massa de um átomo de um elemento. Mol ou mols é a quantidade das espécies em que a massa em gramas é numericamente igual à sua massa molecular. Um mol de qualquer espécie contém aproximadamente $6,023 \times 10^{23}$ (número de Avogadro) moléculas das espécies. A massa molecular (M_w) é a soma dos pesos atômicos que constitui a molécula do composto (o mesmo que massa molar); as suas unidades são da forma kg/mol, g/mol ou lbm/lbmol e, independentemente da unidade, o seu valor numérico será o mesmo.

A massa molecular média (\bar{M}_w) é baseada na fração molar da seguinte forma para duas espécies químicas A e B:

$$\bar{M}_w = y_A \cdot M_{w,A} + y_B \cdot M_{w,B}$$

Ou a massa molecular média (\bar{M}_w) é baseada na fração mássica da seguinte forma para duas espécies químicas A e B:

$$\frac{1}{\bar{M}_w} = \frac{x_A}{M_{w,A}} + \frac{x_B}{M_{w,B}}$$

Em que:

\bar{M}_w é a massa molecular média.

$M_{w,i}$ é a massa molecular de cada componente "i".

Para as espécies "i" em uma mistura:

x_i é a fração mássica da espécie "i" em uma mistura.

y_i é a fração molar da espécie "i" em uma mistura.



Assimile

A massa molecular (massa molar) é o fator de conversão que relaciona a massa e o número de mols de uma quantidade de uma determinada substância.

Exemplo 1.2.1 – Massa molecular média e vazão molar

Uma corrente líquida fluindo a uma vazão mássica de 100 g/min contém 0,3 molar de fração de benzeno, cuja massa molecular é $M_{w,\text{benzeno}} = 78 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$ e a fração molar do tolueno é de 0,7 e a sua massa molecular é $M_{w,\text{tolueno}} = 92 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$. Calcule a vazão molar de cada componente na corrente:

Solução:

Pode-se partir da massa molecular da mistura baseado na fração molar, já que se tem como informação as frações molares e a vazão mássica da corrente. Assim, essas informações podem ser usadas para converter a vazão mássica na vazão molar, que é o objetivo do problema.

$$\begin{aligned}\bar{M}_w &= y_{\text{benzeno}} \cdot M_{w,\text{benzeno}} + y_{\text{tolueno}} \cdot M_{w,\text{tolueno}} = \\ \bar{M}_w &= 0,3 \times 78 + 0,7 \times 92 = \underline{\underline{87,8 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}}\end{aligned}$$

Converter a vazão mássica em vazão molar:

A vazão molar da corrente é:

$$\begin{aligned}\dot{n} &= \frac{\dot{m}}{\bar{M}_w} = \frac{100 \text{ g/min}}{87,8 \text{ g/mol}} = 1,14 \frac{\text{g}}{\text{min}} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{g}} = 1,14 \text{ mol/min} \\ \dot{n} &= \underline{\underline{1,14 \text{ mol/min}}}\end{aligned}$$

A vazão molar das espécies individuais na corrente é:

$$\dot{n}_{\text{benzeno}} = y_{\text{benzeno}} \times \dot{n} = 0,3 \times 1,14 \frac{\text{mol}}{\text{min}} = 0,342 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$$

$$\underline{\underline{\dot{n}_{\text{benzeno}} = 0,342 \frac{\text{mol}}{\text{min}}}}$$

$$\dot{n}_{\text{tolueno}} = y_{\text{tolueno}} \times \dot{n} = 0,7 \times 1,14 \frac{\text{mol}}{\text{min}} = 0,800 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$$

$$\underline{\underline{\dot{n}_{\text{tolueno}} = 0,800 \frac{\text{mol}}{\text{min}}}}$$

Exemplo 1.2.2 – Conversão de composição molar em mássica e vice-versa

Frações mássicas – Uma corrente líquida contendo somente benzeno, tolueno e p-xileno flui por um conduto que tem área da seção transversal quadrada. A vazão molar total da corrente líquida é de 10 mols/s. Se a fração molar do benzeno é 0,3, a massa molecular, $78 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$, a do tolueno é 0,5, com massa molecular $92 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$ e a do p-xileno é de 0,2 e massa molecular $106 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$, qual é a fração mássica de cada um dos três componentes? Se a densidade do líquido é $0,87 \text{ g/cm}^3$ e o lado do conduto é de 0,1 m, qual é a fração mássica e a vazão volumétrica do líquido dentro do conduto?

Solução:

$$\text{Dados: } \dot{n} = 10 \text{ mols/s}; M_{w,\text{benzeno}} = 78 \frac{\text{g}}{\text{mol}}; M_{w,\text{tolueno}} = 92 \frac{\text{g}}{\text{mol}}; M_{w,\text{p-xileno}} = 106 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Sabe-se que a fração mássica pode ser dada por:

$x_i = \frac{m_i}{m}$ ou $x_i = \frac{\dot{m}_i}{\dot{m}}$ em que: m é a massa da espécie "i" envolvida ou \dot{m}_i é a vazão mássica de "i"; m é a massa total ou \dot{m} é a vazão mássica total.

A vazão mássica para os três componentes pode ser dada também pela relação das frações molares, a vazão molar e a massa molecular individual de cada componente da mistura pela seguinte expressão: $\underline{\underline{\dot{m}_i = y_i \times \dot{n} \times M_{w,i}}}$.

Uma maneira didática de resolvermos o problema é montar uma tabela com as informações dadas no problema, com as suas incógnitas e a exposição dos cálculos realizados, conforme é apresentado na Tabela 1.4.

Tabela 1.4 | Resumo dos cálculos: nomenclatura para as espécies: Benzeno (B), Tolueno (T) e p-xileno

Componente (i)	Fração molar $\left(y_i = \frac{n_i}{n} \text{ ou } y_i = \frac{\dot{n}_i}{\dot{n}}\right)$	Massa molecular $\left(M_{w,i}\right)$	Vazão mássica $\left(\dot{m}_i = y_i \times \dot{n} \times M_{w,i}\right)$	Fração mássica $\left(x_i = \frac{m_i}{m} \text{ ou } x_i = \frac{\dot{m}_i}{\dot{m}}\right)$
Benzeno (B)	0,3	78	234	0,258
Tolueno (T)	0,5	92	460	0,508
p-xileno (X)	0,7	106	212	0,234
Total	$\left(y = \sum_{i=1}^{i=N} y_i\right)$ $y = 0,3 + 0,5 + 0,2 = 1$	$\underline{\underline{\bar{M}_w = 276 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}}$	$\left(\dot{m} = \sum_{i=1}^{i=N} \dot{m}_i\right)$ $\dot{m} = 906 \frac{\text{g}}{\text{s}}$	$\left(x = \sum_{i=1}^{i=N} x_i\right)$ $x = 0,258 + 0,508 + 0,234 = 1$

Fonte: elaborada pelo autor.

Sempre será útil a confecção da tabela quando se tratar da conversão de fração molar para mássica e vice-versa.

Cálculos:

P/benzeno: vazão mássica:

$$\dot{m}_i = y_i \times \dot{n} \times M_{w,i} \Rightarrow \dot{m}_B = y_B \times \dot{n} \times M_{w,B} = 0,3 \times \left(10 \frac{\text{mol}}{\text{s}}\right) \times \left(78 \frac{\text{g}}{\text{mol}}\right) = \underline{\underline{234 \frac{\text{g}}{\text{s}}}}$$

P/tolueno: vazão mássica:

$$\dot{m}_T = y_T \times \dot{n} \times M_{w,T} = 0,5 \times \left(10 \frac{\text{mol}}{\text{s}}\right) \times \left(92 \frac{\text{g}}{\text{mol}}\right) = \underline{\underline{460 \frac{\text{g}}{\text{s}}}}$$

P/p-xileno: vazão mássica:

$$\dot{m}_X = y_X \times \dot{n} \times M_{w,X} = 0,2 \times \left(10 \frac{\text{mol}}{\text{s}}\right) \times \left(106 \frac{\text{g}}{\text{mol}}\right) = \underline{\underline{212 \frac{\text{g}}{\text{s}}}}$$

Vazão mássica total: é a somatória das três vazões individuais:

$$\dot{m} = \sum_{i=1}^{i=N} \dot{m}_i = \dot{m}_B + \dot{m}_T + \dot{m}_X = 234 + 460 + 212 = 906 \frac{\text{g}}{\text{s}}$$

$$\underline{\underline{\dot{m} = 906 \frac{\text{g}}{\text{s}}}}, \text{ em que "N" É o número de componentes}$$

Finalmente, a fração mássica de cada componente é:

$$x_B = \frac{\dot{m}_B}{\dot{m}} = \frac{234 \text{ g/s}}{906 \text{ g/s}} = \underline{\underline{0,258}}; \quad x_T = \frac{\dot{m}_T}{\dot{m}} = \frac{460 \text{ g/s}}{906 \text{ g/s}} = \underline{\underline{0,508}}; \quad x_X = \frac{\dot{m}_X}{\dot{m}} = \frac{212 \text{ g/s}}{906 \text{ g/s}} = \underline{\underline{0,234}}$$



Pesquise mais

Consultar as referências:

BADINO JÚNIOR, Alberto Colli; CRUZ, Antônio José Gonçalves. **Fundamentos de balanços de massa e energia**: um texto básico para a análise de processos químicos. São Carlos: EdUScar, 2010.

HIMMELBLAU, David M.; RIGGS, James B. **Engenharia química**: princípios e cálculos. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.



Exemplificando

Nitrogênio flui de um tanque a uma taxa mássica de 6 lb/min a -350 °F e entra em um trocador onde é aquecido, saindo do trocador na forma de um gás a 150 °F e 600 psia. Calcule a vazão volumétrica e o volume específico do gás saindo do trocador. O peso molecular do N_2 (nitrogênio) é 28 g/mol ou 28 lbm/lbmol. Assuma gás ideal, dado que: $R = 10,73 \text{ ft}^3 \text{ psia/lbmol} \cdot ^\circ R$ (constante dos gases no sistema americano de engenharia).

Solução:

Da equação dos gases ideais: $\underline{\underline{P\dot{V} = \dot{n}RT}} \Rightarrow \underline{\underline{\dot{V} = \frac{\dot{n}RT}{P}}}$. Portanto, a vazão molar: Componente puro \rightarrow

$$\dot{n} = \frac{\dot{m}}{M_w} = \frac{\left(6 \frac{\text{lbm}}{\text{min}}\right)}{\left(28 \frac{\text{lbm}}{\text{lbmol}}\right)} = \left(\frac{6 \text{ lbm}}{\text{min}} \times \frac{\text{lbmol}}{28 \text{ lbm}}\right) = \underline{\underline{0,214 \frac{\text{lbmol}}{\text{min}}}}$$

Assim: a vazão volumétrica do gás é:

$$\dot{V} = \frac{\dot{n}.R.T}{P} = \frac{\left(0,214 \frac{\text{lbmol}}{\text{min}}\right) \left(10,73 \frac{\text{ft}^3 \cdot \text{psia}}{\text{lbmol} \cdot ^\circ\text{R}}\right) (609,7 \text{ } ^\circ\text{R})}{(600 \text{ psia})}$$

$$\underline{\underline{\dot{V} = 2,33 \frac{\text{ft}^3}{\text{min}}}}$$

O volume específico em base mássica (\hat{V}) é:

$$\hat{V} = \frac{V}{m} \text{ ou } v = \frac{\dot{V}}{\dot{m}} = \frac{\left(2,33 \frac{\text{ft}^3}{\text{min}}\right)}{\left(6 \frac{\text{lbm}}{\text{min}}\right)} = 0,39 \text{ ft}^3/\text{lbm}$$

$$\underline{\underline{\hat{V} = 0,39 \text{ ft}^3/\text{lbm}}}$$

O volume específico em base molar (\tilde{V}) é:

$$\tilde{V} = \frac{V}{n} \text{ ou } v = \frac{\dot{V}}{\dot{n}} = \frac{\left(2,33 \frac{\text{ft}^3}{\text{min}}\right)}{\left(0,214 \frac{\text{lbmol}}{\text{min}}\right)} = 10,9 \text{ ft}^3/\text{lbmol}$$

$$\underline{\underline{\tilde{V} = 10,9 \text{ ft}^3/\text{lbmol}}}$$



Faça você mesmo

Uma mistura de metanol (CH_3OH , $M_w = 32,04 \text{ g/mol}$) e etanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $M_w = 46,07 \text{ g/mol}$) está fluindo por uma tubulação circular a uma velocidade de 3 m/s . A mistura contém 30% em peso de metanol e 70% em peso de etanol. A densidade relativa da mistura é 0,8.

Se o diâmetro interno da tubulação é $0,10 \text{ m}$, qual é a vazão da mistura em kg/s e kmol/s ? Calcule as composições da saída da tubulação.

Sem medo de errar

O engenheiro de projetos quer obter o número de Reynolds para que ele possa verificar as condições de escoamento na tubulação que ele vai projetar. Para isso, ele forneceu a vazão mássica ($\dot{m} = 1830,84 \frac{kg}{s}$) e a vazão volumétrica ($\dot{V} = 2,09 \frac{m^3}{s}$), a viscosidade $\mu = 0,2177 \frac{kg}{m.s}$, o diâmetro $D = 1,48 pé (ft)$, e a velocidade média de escoamento é de $v = 47160 \frac{m}{h}$. Como analista de processos, você irá realizar os cálculos para alcançar o objetivo pretendido pelo engenheiro de projetos. Como irá proceder?

Passos de resolução:

1. Verificar se o sistema de unidades está adequado.
 - Sistema de unidades inadequado – as unidades estão mescladas entre os dois sistemas de unidades, o sistema internacional de unidades (SI) e o sistema americano de engenharia (SAE). Portanto, as unidades devem ser padronizadas no mesmo sistema de unidades, neste caso, no Sistema SI.
2. Para sistemas de unidades diferentes utilizarem corretamente os fatores de conversão dessas unidades.
 - Os fatores de conversão a serem utilizados são $1 ft = 0,3048 m$ e $1 h = 3600 s$
3. Verificar o significado e a definição matemática da grandeza vazão mássica e da vazão volumétrica.
 - A vazão mássica é $\dot{m} = \rho \cdot \dot{V}$, o que implica que a vazão volumétrica é $\dot{V} = \frac{\dot{m}}{\rho}$
4. Realizar os cálculos.

$$\dot{m} = \rho \cdot \dot{V} \Rightarrow \rho = \frac{\dot{m}}{\dot{V}} = \frac{1.830,84 \frac{kg}{s}}{2,09 \frac{m^3}{s}} = 876 kg/m^3$$

$$\underline{\underline{\rho = 876 kg/m^3}}$$

Com a densidade calculada, a viscosidade $\mu = 0,2177 \frac{kg}{m.s}$, o diâmetro $D = 1,48 pé (ft)$ e a velocidade média de escoamento é de $v = 47160 \frac{m}{h}$, calcula-se o Reynolds.

- Cálculo do número adimensional Re:

$$\text{Re} = \frac{\rho \cdot v \cdot D}{\mu} = \frac{\left(876 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) \cdot \left(47.160 \frac{\text{m}}{\text{h}}\right) \cdot (1,48 \text{ ft}) \times \left(\frac{0,3048 \text{ m}}{1 \text{ ft}}\right) \times \frac{1 \text{ h}}{3.600 \text{ s}}}{0,2177 \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}}} =$$

$$\text{Re} = 2,377 \times 10^4 \text{ (a dimensional)}$$

Com base nos cálculos realizados, é possível concluir que o escoamento na tubulação que será projetada é turbulento, pois tem um número de Reynolds igual a $2,377 \times 10^4$.



Atenção

Lembre-se de que a vazão mássica deve ser convertida em vazão volumétrica e vice-versa.

Avançando na prática

Cálculo das vazões mássicas e molares envolvidas nos processos de produção de açúcar e de álcool a partir da matéria-prima caldo de cana-de-açúcar

Descrição da situação-problema

Exemplos clássicos em processos químicos estão na produção de açúcar e álcool, em que os fluidos mais importantes e presentes nesses processos são o caldo de cana-de-açúcar, a solução de cal hidratada ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) utilizada na neutralização do caldo após a etapa de sulfitação, somando-se a eles o caldo de fermentação, o álcool hidratado e as correntes de vapor, entre outros. O caldo de cana é composto em média por 18% de sacarose ($\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$) na sua composição em base mássica e uma densidade relativa (DR) igual a 1,08. Dados: a densidade da substância de referência a 4°C é ($\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 1000 \text{ kg/m}^3$).

Diante das informações citadas, você, como analista de processos, foi convidado a testar e decidir as quantidades que deverão ser usadas no processo de fermentação. As quantidades que devem ser testadas e as quantidades requeridas são especificadas nos itens a seguir:

- I. Para um volume de 2.000 L, levando-se em consideração que a vazão volumétrica do caldo é de aproximadamente $0,007 \text{ m}^3/\text{s}$, calcule a massa de caldo de cana e a vazão mássica de sacarose.

- II. Conhecendo-se a vazão volumétrica de $0,055 \text{ m}^3 / \text{s}$ do caldo, dados que a massa molar da sacarose ($M_{w,sacarose} = 342 \text{ g/mol}$) e o número de mols do hidrogênio na molécula de sacarose (22 mols H/mol $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$).

Como você irá proceder para encontrar a vazão molar de hidrogênio presente na sacarose do caldo?

Resolução da situação-problema

- Cálculo da massa de caldo:

Solução:

$$\text{É sabido que } \rho_{caldo} = \frac{m_{caldo}}{V} \Rightarrow m_{caldo} = \rho_{caldo} \times V \quad \therefore$$

$$\text{a densidade do caldo é: } \rho_{caldo} = DR \times \rho_{H_2O} = 1,08 \times 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 1080 \text{ kg/m}^3;$$

$$\underline{\underline{\rho_{caldo} = 1080 \text{ kg/m}^3;}}$$

assim, a massa do caldo :

$$m_{caldo} = \rho_{caldo} \times V = (1080 \text{ kg/m}^3) \times (2000 \text{ L}) \times \left(\frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \right) = 2160 \text{ kg}$$

$$\underline{\underline{m_{caldo} = 2160 \text{ kg}}}$$

- Cálculo da vazão mássica da sacarose dados com a densidade do caldo conhecida ($\rho_{caldo} = 1080 \text{ kg/m}^3$), a fração mássica da sacarose ($0,18 \text{ kg}_{sacarose} / \text{kg}$) e a vazão volumétrica de caldo igual a $0,007 \text{ m}^3/\text{s}$:

Solução:

$$\dot{m}_{sacarose} = \rho_{caldo} \times \dot{V}_{caldo} \times x_{sacarose}$$

$$\dot{m}_{sacarose} = \left(1080 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \times (0,007 \text{ m}^3 / \text{s}) \times \left(0,18 \frac{\text{kg}_{sacarose}}{\text{kg}} \right) = 1,36 \text{ kg/s}$$

$$\underline{\underline{\dot{m}_{sacarose} = 1,36 \text{ kg/s}}}$$

- Cálculo da vazão molar de hidrogênio, cuja vazão volumétrica de caldo é de $0,055 \text{ m}^3 / \text{s}$, levando em consideração os valores da massa molar da sacarose e o número de mols do hidrogênio contido na molécula de sacarose.

Solução:

$$\dot{n}_{H_2} = \left(0,055 \frac{m^3}{s}\right) \cdot \left(1080 \frac{kg}{m^3}\right) \cdot \left(0,18 \frac{kg_{sac}}{kg}\right) \cdot \left(\frac{1 \text{ kmol}_{sac}}{342 \text{ kg}_{sac}}\right) \cdot \left(\frac{22 \text{ kmol}_H}{1 \text{ kmol}_{sac}}\right) =$$

$$\underline{\underline{\dot{n}_{H_2} = 0,68 \frac{kmol_H}{s}}}$$

Faça valer a pena

1. A Lei dos Gases Ideais é muito utilizada para gases escoando a baixas pressões, se tornando útil em problemas envolvendo as propriedades físicas de uma determinada substância. Essa lei pode ser escrita de várias maneiras, de acordo com as informações do problema em questão.

Um gás ideal escoar por uma tubulação a 20 °C. A densidade do gás é de 1,9 kg/m³ e a sua massa molar é 44 kg/kmol. Ao utilizar a Lei dos Gases Ideais, que relaciona as grandezas supracitadas, a pressão do gás é: considere R = 8,314 kPa.m³/kmol.K

- a) 7 kPa.
- b) 72 kPa.
- c) 105 kPa.
- d) 460 kPa.
- e) 4630 kPa.

2. As propriedades individuais e da mistura são muito importantes para a especificação das correntes de entrada e de saída de um determinado processo químico. Ao estudar um gás ou uma mistura de gases, a fração molar é uma grandeza necessária para avaliar a composição das correntes. Ela representa a razão entre o número de mols da substância e o número de mols total da mistura, sendo uma grandeza adimensional, que não pode ser maior que 1.

Uma mistura gasosa consiste em 3 kmol de oxigênio, 2 kmol de nitrogênio e 0,5 kmol de vapor de água. A pressão total da mistura é 100 kPa. A fração molar do vapor de água nessa mistura é:

- a) 0,545.
- b) 0,364.
- c) 1,000.

- d) 0,090.
- e) 1,100.

3. No dia a dia da indústria química, as reações e os processos são feitos utilizando principalmente soluções, aquosas ou não, ou mistura de líquidos. Os cálculos necessários para esse tipo de problema levam em consideração o soluto em uma solução ou mistura como sendo aquele componente em menor proporção, e o solvente, que pode ser um líquido puro ou mistura líquida, está em maior proporção.

Uma solução líquida de n-butano e n-pentano é adicionada a ácido acético, resultando em uma mistura líquida com massa específica igual a 800 kg/m^3 . Admitindo comportamento ideal do sistema, a fração mássica de ácido acético na mistura é, aproximadamente, de:

Dados: $\rho_{\text{ácido acético}} = 1000 \text{ kg/m}^3$

- a) 0,40.
- b) 0,45.
- c) 0,50.
- d) 0,55.
- e) 0,62.

Seção 1.3

Exemplos sobre a aplicação dos conceitos de processos químicos

Diálogo aberto

Nesta seção serão revisados e aplicados os fundamentos estudados nas seções anteriores como exemplos relacionados aos processos químicos, trabalhando com os sistemas de unidades e a análise dimensional, bem como o manuseio e as transformações envolvendo as principais variáveis operacionais de processos, fazendo-se uso da ferramenta de planilhas eletrônicas. Portanto, o objetivo desta seção é introduzir o aluno no uso de uma ferramenta computacional para resolução de problemas de processos químicos, usando o utilitário Excel, do pacote de aplicativos da Microsoft na análise e solução desses problemas, procurando sempre enfatizar os conceitos envolvidos e já apresentados.

A utilização de aplicativos computacionais para a realização de cálculos e simulações é uma tendência para dar ênfase a um ensino mais prático.

Você é analista de processos de uma empresa e está avaliando as condições operacionais da produção. Nesta etapa, você é convidado a validar os cálculos do número de Reynolds a partir da planilha eletrônica do Excel, utilizando as ferramentas necessárias para o seu uso e tomando como base os cálculos analíticos do número de Reynolds e da análise do tipo de escoamento, se é laminar ou turbulento. Os cálculos feitos por você se basearam nos valores das grandezas de processos necessárias ao estudo do escoamento na tubulação utilizada para a distribuição de óleo diesel, bem como de você ter seguido o que o engenheiro de projetos estabeleceu sobre as faixas de Reynolds para o tipo de regime de escoamento: caso o $Re \leq 2300$, o regime de escoamento é considerado laminar, e se o $Re \geq 4000$, o regime de escoamento é considerado turbulento. Então, os cálculos serão repetidos por você, com o auxílio da planilha eletrônica no Excel, considerando as condições estabelecidas anteriormente, que foram as seguintes: propriedades físicas, $\rho = 876 \frac{kg}{m^3}$ e $\mu = 0,2177 \frac{kg}{m.s}$; variáveis de projeto, $D = 1,48 \text{ pé (ft)}$; e a velocidade média de escoamento, $v = 47160 \frac{m}{h}$. Como você poderá calcular

o número de Reynolds para essas condições de escoamento usando a planilha eletrônica do Excel?

Espera-se que, ao final desta seção, todos tenham tido uma boa aprendizagem nesta área fascinante.

Não pode faltar

A planilha eletrônica do Excel será o recurso utilizado nesta seção, com o auxílio de algumas das suas ferramentas, envolvendo cálculos em processos, por exemplo, o cálculo do volume ocupado por um fluido, bem como correções da densidade com a temperatura na preparação do cálculo do número de Reynolds, além do uso de estruturas condicionais lógicas para decidir o tipo de escoamento em questão.

O Excel é uma planilha eletrônica que fornece ferramentas para efetuar cálculos por meio de fórmulas e funções e para a análise de dados.

Vantagens de usar o Excel:

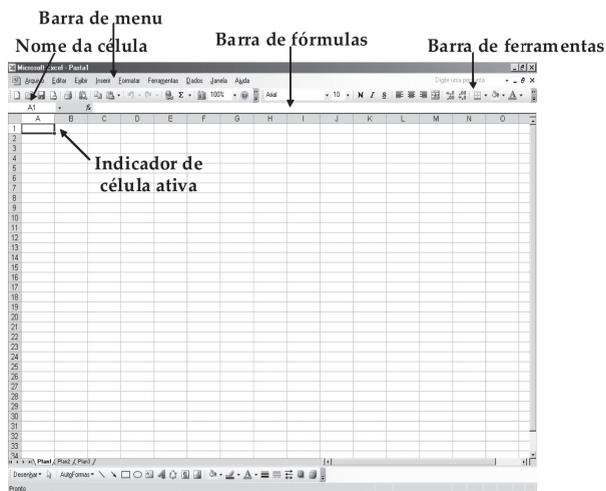
- Disponibilidade.
- Facilidade de uso.
- Variáveis nomeadas.
- Integração.
- Biblioteca de funções.
- Abrangência.
- Simplicidade.

Para utilizarmos essa ferramenta, precisaremos aprender algumas funções e atribuições do programa, as quais são relacionadas a seguir:

A planilha

Ao abrir o Excel, surgirá uma pasta de trabalho chamada Pasta 1. Ela conterà três planilhas (Plan 1, Plan 2, Plan 3). Cada planilha é constituída de 16.777.216 células distribuídas em 256 colunas nomeadas de A a IV e 256² linhas numeradas de 1 a 65536. Após coluna Z vem coluna AA; após coluna AZ vem coluna BA, e assim por diante. Cada célula é referenciada pela letra da coluna, seguida pelo número da linha. A Figura 1.3 apresenta os recursos da planilha eletrônica:

Figura 1.3 | Planilha eletrônica

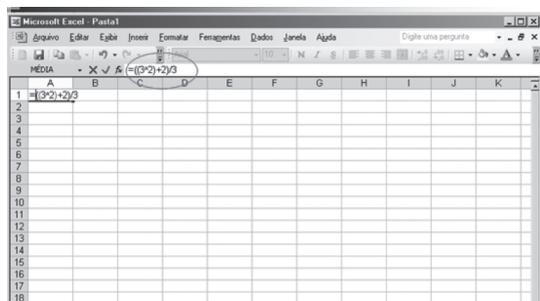


Fonte: elaborada pelo autor.

- **Inserindo uma fórmula manualmente**

Para digitar uma fórmula manualmente, devemos selecionar uma célula e digitar um sinal de igual (=) seguido da fórmula. Os caracteres aparecem na célula e na barra de fórmulas, conforme mostra a Figura 1.4.

Figura 1.4 | Inserção de uma fórmula na planilha



Fonte: elaborada pelo autor.



Refleta

Uma atenção especial deve ser dada aos elementos e ferramentas que devem ser utilizadas ao usar o recurso da planilha eletrônica no Excel. É importante seguir o passo a passo desde a nomeação das células na planilha até as funções e operações utilizadas para resolver o problema, bem como outros utilitários, como a checagem da planilha.

Os operadores algébricos incluem não somente os operadores aritméticos, como soma, subtração, multiplicação e divisão, mas os operadores do tipo exponenciação, por exemplo. Nem todos os operadores fazem contas. Há os que são lógicos, como os operadores de comparação, que retornam apenas valores lógicos como FALSO e VERDADEIRO, entre eles estão os operadores (<) menor, e menor que ou igual (<=), (>) maior e (>=) maior que ou igual, (<>) diferente e (=) igual. O exemplo a seguir trata com operações envolvendo os operadores algébricos e de comparação lógico.



Exemplificando

Alguns valores numéricos são digitados nas células especificadas a seguir e operações algébricas envolvendo adição, subtração, multiplicação, divisão e exponenciação, bem como operações com operadores de comparação são utilizados na planilha eletrônica do Excel (Figura 1.5), de acordo com os seguintes comandos:

1. Digitar 2 nas células A1 até A7.
2. Digitar 5 nas células B1 até B7.
3. Digitar as seguintes fórmulas:
 - = A1 + B1 (linha C1).
 - = A2 – B2 (linha C2).
 - = A3*B3 (linha C3).
 - = A4/B4 (linha C4).
 - = A5^B5 (linha C5).
 - = 2*A6+B6 (linha C6).
 - = 2*(A7+B7) (linha C7).
 - = A1<B1 (linha D1).
 - = A2>=B2 (linha D2).

Resposta: E os resultados das operações são mostrados na Figura 1.5, a seguir: ao observar o resultado contido na célula C1 e D1, decorrem de: ao digitar na célula C1 a operação “= A1 + B1”, e as células A1 e B1 forem carregadas pelos valores “2” e “5”, respectivamente, o resultado será 7. Na célula D2, a fórmula de comparação “= A1<B1”, resulta em VERDADEIRO, pois, ao comparar o valor contido na célula A1 com o valor contido na B1, A1 realmente é menor que 5. Já quando se observa

as células C2 e D2, ao digitar na célula C2 a operação " $=A2-B2$ ", e as células A2 e B2 são carregadas pelos valores "2" e "5", respectivamente, o resultado será -3. Na célula D2, a fórmula de comparação, " $= A2>=B2$ ", resulta em FALSO, pois, ao comparar o valor contido na célula A2 com o valor contido na B2, A2 realmente é menor que 5 e não maior que 5.

Análise análoga às operações algébricas que compõem as células C1 e C2 pode ser feita ao analisar as operações que resultam nos valores numéricos das células de C3 a C7, podendo ser comparados os valores das células A e B, de 3 a 7, nas células D3 a D7, se fosse o caso de se pedir uma comparação que resultaria em um valor lógico.

Figura 1.5 | Inserção de uma fórmula na planilha

	A	B	C	D
1	2	5	7	VERDADEIRO
2	2	5	-3	FALSO
3	2	5	10	
4	2	5	0,4	
5	2	5	32	
6	2	5	9	
7	2	5	14	

Fonte: elaborada pelo autor.

- Funções lógicas
 - Função lógica e condicional "SE"

A função lógica "SE" tem como função testar condições e desviar ou não o fluxo da programação. A função lógica SE tem a seguinte sintaxe:

Testar condições:

$=SE(\text{condição testada}; \text{conteúdo se verdadeira}; \text{conteúdo se falsa})$

Em que:

Condição testada: expressão ou valor que pode ser verdadeiro ou falso.

Conteúdo se verdadeira: valor retornado se o teste lógico for verdadeiro.

Conteúdo se falsa: valor retornado se o teste lógico for falso.

- Função "E" e a função "OU".

Outras duas funções são a Função "E" e a Função "OU". Vejamos a sintaxe:

Função "E":

= SE(E(*valor lógico 1*; *valor lógico 2*; ... *valor lógico n*))

Em que:

Valor lógico 1; valor lógico 2; valor lógico n são as condições que deverão ser testadas. Todas as condições podem ser verdadeiras ou falsas. A função lógica E retorna um valor **verdadeiro**, se **as duas** condições forem verdadeiras.

Função "OU":

= SE(OU(*valor lógico 1*; *valor lógico 2*; ... *valor lógico n*))

Em que:

Valor lógico 1; valor lógico 2; valor lógico n são as condições que deverão ser testadas. Todas as condições podem ser verdadeiras ou falsas. A função lógica "OU" retorna um valor **verdadeiro**, se **uma das duas** condições for verdadeira.

A resposta da análise das funções lógicas "E" e "OU", juntamente com a função "SE", é apresentada na Figura 1.6, que mostra a planilha de análise dessas funções lógicas no estudo do tipo de escoamento com o número de Reynolds.



Exemplificando

Exemplo – função E e OU: Conforme o valor do número de Reynolds inserido na planilha, determine se o escoamento é laminar, de transição ou turbulento (Figura 1.6):

- N° de Reynolds $\leq 2300 \rightarrow$ escoamento laminar.
- N° de Reynolds >2300 e $\leq 4000 \rightarrow$ escoamento de transição entre os dois regimes.
- N° de Reynolds $\geq 4000 \rightarrow$ escoamento turbulento.
- Sintaxe:

=SE(A1<=2300;"LAMINAR";SE(A1>=4000;"TURBULENTO";"TRANSIÇÃO"))

Figura 1.6 | Verificação do tipo de escoamento

	A	B
1	1800	LAMINAR
2	2300	LAMINAR
3	2500	TRANSIÇÃO
4	3200	TRANSIÇÃO

5	3600	TRANSIÇÃO
6	4000	TURBULENTO
7	4500	TURBULENTO
8	5800	TURBULENTO
9	7850	TURBULENTO

Fonte: elaborada pelo autor.

- **Realizando os cálculos em uma planilha**

Suponha que se queira calcular o volume de um gás ideal, variando isotermicamente na temperatura de 300 K, a pressão de 1 atm e a constante universal dos gases igual a $R=0,082057 \text{ atm.L/mol.K}$ obedecendo à lei do gás ideal:

$$V = \frac{R.T}{P} \Rightarrow \text{onde a pressão e de 1atm e } R=0,082057 \frac{\text{atm.L}}{\text{mol.K}}$$

O cálculo do volume é mostrado na Figura 1.7.

Figura 1.7 | Cálculo do volume de um gás

	A	B	C	D	E	F	G
1	T (K		P(atm)	R (atm.L/mol.K)			
2	300		1	0,082057			
3							
4							V
5							24,6171

Fonte: elaborada pelo autor.

- **Auditoria na planilha (Rastrear dependentes)**

É um procedimento que auxilia muito o entendimento da operação de uma planilha, sendo importante entender a sequência de cálculos estabelecido. Ao observar a Figura 1.7, que mostra uma planilha onde se calcula o volume de um gás ideal, para um sistema isotérmico de T igual a 300 K e de pressão 1 atm, obedecendo à lei do gás ideal, pode-se utilizar o recurso da auditoria de planilha para descobrir a dependência das variáveis com o cálculo do volume do gás. Para iniciá-la, deve-se selecionar as células A2, C2 e D2 e, em seguida, o menu **Ferramentas > auditoria > Rastrear dependentes** ou menu **Fórmulas > auditoria > Rastrear dependentes**. A Figura 1.8 mostra o resultado.

Figura 1.8 | Células dependentes do volume de um gás

	A	B	C	D	E	F	G
1	T (K		P(atm)	R (atm.L/mol.K)			
2	•300		• 1	• 0,082057			
3							
4							V
5							→24,6171

Fonte: elaborada pelo autor.



Assimile

A necessidade da auditoria em planilhas ou fórmulas será constante no entendimento dos cálculos em planilhas, pois a auditoria permitirá que você faça uma análise gráfica do fluxo dos cálculos, e todas as células utilizadas nos cálculos diretamente com o volume, por exemplo, são apontadas por uma bolinha. Isso permite a revisão dos cálculos e será útil para evitar erros de construção e realização dos cálculos em uma planilha eletrônica.

• Auditoria na planilha (Rastrear Precedentes)

No rastreamento de precedentes, é preciso apagar as setas com a opção **Remover todas as setas**, no menu **Formatar > auditoria** ou no menu **Fórmulas > auditoria**. Selecionando a célula **G5** e, desta vez, utilizando a opção **Rastrear precedentes**, resultaria na Figura 1.9:

Figura 1.9 | Rastreamento precedentes

	A	B	C	D	E	F	G
1	T (K		P(atm)	R (atm.L/mol.K)			
2	•300		• 1	• 0,082057			
3							
4							V
5							→24,6171

Fonte: elaborada pelo autor.



Refleta

Vamos supor que você tivesse colocado na sua planilha outra variável, por exemplo, a viscosidade do fluido, e esta tivesse sido inserida no cálculo do volume erroneamente, a auditoria serviria para detectar o erro. Por isso, principalmente em cálculos mais complexos, é recomendado que o recurso da auditoria sempre seja utilizado.



Pesquise mais

Uma planilha eletrônica alternativa é outra opção apresentada para consulta. A planilha eletrônica Calc do pacote de programas para escritório da revista BrOffice.org é uma versão distribuída gratuitamente. O seu download, na versão 3.2.1, com a planilha eletrônica Calc, pode ser feito pelo endereço eletrônico: <<http://www.broffice.org/download>> e os arquivos contendo a documentação dos programas são encontrados no seguinte endereço eletrônico: <<http://www.broffice.org/docs>>. Acesso em: 6 dez. 2016.

Sem medo de errar

Você, como analista de processos, é convidado a validar os cálculos do número de Reynolds a partir da planilha eletrônica do Excel, utilizando as ferramentas necessárias para o seu uso e tomando como base os cálculos analíticos do número de Reynolds, além da análise do tipo de escoamento, se é laminar ou turbulento. Os cálculos feitos por você se basearam nos valores das grandezas de processos necessárias ao estudo do escoamento na tubulação utilizada para a distribuição de óleo diesel, bem como em você ter seguido o que o engenheiro de projetos estabeleceu sobre as faixas de Reynolds para o tipo de regime de escoamento: caso o $Re \leq 2300$, o regime de escoamento é considerado laminar, e se o $Re \geq 4000$, o regime de escoamento é considerado turbulento. Então, os cálculos serão repetidos por você, com o auxílio da planilha eletrônica no Excel, considerando as condições estabelecidas anteriormente, que foram as seguintes: propriedades físicas, $\rho = 876 \frac{kg}{m^3}$ e $\mu = 0,2177 \frac{kg}{m.s}$; variáveis de projeto, $D = 1,48 \text{ pé } (ft)$; e a velocidade média de escoamento, $v = 47160 \frac{m}{h}$.

Solução analítica:

- Sistema de unidade padrão? Sistema Internacional de Unidades.
- Sistema com mesma unidade? Miscelânea de unidades.
- Uso de fatores de conversão de unidades? Sim.

Dados fornecidos: $\rho = 876 \frac{kg}{m^3}$, $\mu = 0,2177 \frac{kg}{m.s}$, $D = 1,48 \text{ pé } (ft)$ e $v = 47.160 \frac{m}{h}$

- Cálculo do número adimensional Re:

$$Re = \frac{\rho \cdot v \cdot D}{\mu} = \frac{\left(876 \frac{kg}{m^3}\right) \cdot \left(47.160 \frac{m}{h}\right) \cdot (1,48 ft) \times \left(\frac{0,3048 m}{1 ft}\right) \times \frac{1 h}{3.600 s}}{0,2177 \frac{kg}{m \cdot s}} = (\text{Solução analítica})$$

$$Re = 2,377 \times 10^4 \text{ (a dimensional)}$$

Solução na planilha eletrônica:

Você irá preparar a planilha eletrônica para efetuar os cálculos do número de Reynolds e descobrir qual é o regime de escoamento do fluido na tubulação e comparar o resultado encontrado com o dos cálculos realizados analiticamente.

Passos para resolver o problema:

- Introduza os valores das variáveis e parâmetros na planilha eletrônica.
- Para que o número de Reynolds seja calculado na célula G5, é necessário primeiro que você introduza nas células A2, A5, C1, D1 e E5 os valores das variáveis e parâmetros necessários ao seu cálculo.
- Realize as devidas transformações das unidades na planilha.
- Nas células A6 e E6, devem ser realizadas as devidas transformações de unidades, em que, na Célula A6, o diâmetro é transformado de "ft" para "m", usando a relação de que $1 ft = 0,3048 m$, e na célula E6, a velocidade é transformada de km/h para m/s , usando as relações em que $1 km = 1000 m$ e $1h=3600 s$.
- Introduza a equação do cálculo do Reynolds na planilha Excel e realize os cálculos do número de Reynolds na planilha eletrônica, verificando se tais valores corroboram com os encontrados analiticamente.
- Após as devidas transformações serem feitas, a equação para o cálculo do número de Reynolds é montada na planilha como sendo "= (C2*A6*E6)/D2". Confira o valor encontrado.
- Indique o tipo de escoamento, se é laminar ou turbulento. Na célula H5, coloque a fórmula mais adequada para a análise do regime de escoamento, que é a função "Se" aninhada com a seguinte sintaxe: "=SE(G5<=2300;"L AMINAR";SE(G5>=4000;"TURBULENTO";"TRANSIÇÃO"))", e avalie se as respostas dadas nas células G5 (valor encontrado do Reynolds) e H5 (valor lógico encontrado para o tipo de regime de escoamento) são coerentes.

A Solução na planilha eletrônica Excel é especificada na Figura 1.10.

Figura 1.10 | Cálculo do número de Reynolds

H5		f _c =SE(G5<=2300;"LAMINAR";SE(G5>=4000;"TURBULENTO";"TRANSIÇÃO"))								
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	T (°C)		ρ(kg/m ³)	μ(kg/m.s)						
2	25		876	0,2177						
3										
4	D(ft)				v (km/h)		Re			
5	1,48	conversão			47.160	conversao	23779004	TURBULENTO		
6	0,451104	m			13100	m/s				

Fonte: elaborada pelo autor.

Essa planilha descreve as variáveis e sua importância em um processo químico, considerando os sistemas de unidades, aplicando os conceitos e as definições necessárias perante as propriedades físicas e os parâmetros sobre os quais o processo é dependente, bem como os conhecimentos sobre dimensões, unidades e sistemas de unidades e escoamento, podendo ser entregue ao seu gestor para avaliação e para auxiliar na determinação das variáveis de processo que comandarão a produção.

Avançando na prática

Dependência da densidade com a temperatura

Descrição da situação-problema

Em um determinado momento do projeto da tubulação da rede de distribuição de óleo diesel, o engenheiro de projetos o questionou, como analista de processos, sobre o valor da densidade do óleo diesel que ele tinha repassado para você e utilizado nos cálculos do número de Reynolds, pois ele tinha constatado que a densidade do óleo diesel variava com a temperatura, cujo comportamento era de uma função polinomial com a temperatura da seguinte forma:

$$\rho = -0,00002 \cdot T^3 - 0,0059 \cdot T^2 + 0,0188T + 876.$$

E que agora, você precisa fazer a correção do valor da densidade, levando em consideração a dependência da densidade com a temperatura, usando a planilha eletrônica. Como você fará para resolver esse problema?

Resolução da situação-problema

Passos para resolver o problema:

1. Conceituar densidade.

2. Identificar a dimensão de densidade.
3. Identificar o sistema de unidades.
4. Usar os fatores de conversão de unidades corretamente.
5. Substituir os valores numéricos das variáveis.
6. Realizar os cálculos da densidade.
7. Utilizar o recurso da planilha eletrônica

Para fazer a correção da densidade com a temperatura, você deverá inserir a equação da densidade (ρ) na célula C2 da sua planilha eletrônica, que está representada pela Figura 1.10, e com o novo valor encontrado para a densidade, encontrar o novo valor do número de Reynolds. Portanto, na célula C2, introduz-se à fórmula:

$$" = -0,00002 * A2^3 - 0,0059 * A2^2 + 0,0188 * A2 + 876 "$$

$$= -0,00002 * A2^3 - 0,0059 * A2^2 + 0,0188 * A2 + 876$$

Os valores da densidade corrigida com a temperatura e do número de Reynolds são mostrados na Figura 1.11.

Figura 1.11 | Número de Reynolds para a densidade do diesel corrigida

	A	B	C	D	E	F	G
1	T (°C)		ρ (kg/m ³)	μ (kg/m.s)			
2	25		872,47	0,2177			
3							
4	D(ft)				v (km/h)		Re
5	1,48	conversão			47.160	conversao	23683182
6	0,451104	m			13100	m/s	

Fonte: elaborada pelo autor.

Então, ao calcular a densidade corrigida do diesel e o novo Reynolds, você estabelece para o engenheiro de projetos as novas condições de regime de escoamento na tubulação de diesel.

Faça valer a pena

1. As funções lógicas e os operadores lógicos desempenharão um papel importante no estudo das dimensões e conversão de unidades, usando o recurso da planilha eletrônica no Excel. Os operadores de comparação são lógicos, isto é, retornam apenas os valores FALSO ou VERDADEIRO. Todas as linguagens de programação têm operadores desse tipo, que comparam os valores de células.

Se $A = 1$, $B = 2$ e $C = 2$, qual é o resultado (VERDADEIRO OU FALSO) da avaliação das expressões seguintes?

Expressão	Resultado
I) $(A + B = 0)$ e $(C <> 0)$	
II) $(3 = 0)$ e $(C <> 0)$	
III) $(A > B)$	
IV) $(A < B)$ ou $(C > A)$	
V) $(C <> B)$ e $(A < A)$	

De acordo com o resultado verdadeiro ou falso encontrado nos itens de I a V, qual é a afirmativa correta:

- VERDADEIRO, VERDADEIRO, VERDADEIRO, FALSO, FALSO.
- FALSO, VERDADEIRO, VERDADEIRO, FALSO, VERDADEIRO.
- FALSO, FALSO, FALSO, VERDADEIRO, VERDADEIRO.
- FALSO, FALSO, FALSO, FALSO, FALSO.
- VERDADEIRO, VERDADEIRO, VERDADEIRO, VERDADEIRO, VERDADEIRO.

2. Os desvios das propriedades volumétricas de um gás real em relação a um gás ideal ou perfeito são geralmente expressados na forma do fator de compressibilidade definido como $z = \frac{PV}{RT}$, em que Z representa o fator de compressibilidade; P é a pressão do gás; V é o volume ocupado pelo gás; T é a temperatura e o R é a constante universal dos gases. O fator de compressibilidade para gases ideais é igual a 1, ou seja, $Z = 1$.

Como seria montada a equação que calcula o fator de compressibilidade (Z) na planilha eletrônica do Excel e como o bloco da função lógica "SE" seria montado para que você verificasse se o gás é mesmo ideal, a partir do fator de compressibilidade (Z) calculado na célula G5? Considere que nas células C2 e E2 tivessem a pressão e o volume, respectivamente. E nas células D2 e A2, tivessem a constante universal (R) e a temperatura, respectivamente. Seguem as opções oferecidas a você como solução para o seu problema:

- I. " $=C2 \cdot E2 / (D2 \cdot A2)$ " e " $=SE(G5=1; "GÁS IDEAL")$ ".
 II. " $=C2 \cdot E2 / D2 \cdot A2$ " e " $=SE(G5 <= 1; "GÁS IDEAL")$ ".
 III. " $=C2 \cdot E2 / (D2 \cdot A2)$ " e " $=SE(G5 >= 1; "GÁS IDEAL")$ ".
 IV. " $=C2 \cdot E2 / D2 \cdot A2$ " e " $=SE(G5=1)$ ".

A melhor sequência de opções que estaria correta é:

- a) Apenas o que está em I e IV está correto.
 b) Apenas o que está em I está correto.
 c) Apenas o que está em I, II e III está correto.
 d) Apenas o que está em II e IV está correto.
 e) Apenas o que está em I e III está correto.

3. Um dos exemplos muito comuns no estudo do escoamento de um fluido é o esvaziamento de um tanque cilíndrico, com um orifício conectado a um tubo também cilíndrico, na parte inferior do tanque, contendo certa massa de líquido que escoar por gravidade pelo tubo. Durante o escoamento, o nível de líquido no tanque e a vazão volumétrica do líquido de saída variam com o tempo.

Sabendo-se que a vazão volumétrica de saída é dada por $\dot{V} = a_s \cdot v_s$, em que a_s é a área de seção de escoamento $a_s = \frac{\pi \cdot d^2}{4}$ e v_s é a velocidade de saída definida como $v_s = \sqrt{2 \cdot g \cdot h}$. Assim, a equação da vazão em função da altura h é $\dot{V} = a_s \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h}$. Para calcular o valor da vazão volumétrica, como seria a preparação da equação da vazão em função da altura no Excel? Considere que o resultado do cálculo da área estaria na célula B11, o valor de g na célula B8 e o valor da altura na célula E5. As operações a seguir mostram como deve ser o cálculo da planilha eletrônica do Excel:

- I. " $=B11 \cdot Raiz(2 \cdot B8 \cdot E5)$ ".
 II. " $=2 \cdot B8 - Raiz(2 \cdot B8 \cdot E5)$ ".
 III. " $=PI \cdot B8 \cdot \cdot 2 / 4$ ".
 IV. " $=B11 / B8 \cdot Raiz(2 \cdot B8 \cdot E5)$ ".

É correto afirmar que:

- a) Apenas I e II são corretas.
 b) Apenas I e III são corretas.
 c) Apenas a I é incorreta.
 d) Apenas III e IV são corretas.
 e) Apenas a I é correta.

Referências

BADINO JÚNIOR, A. C.; CRUZ, A. J. G. **Fundamentos de balanços de massa e energia**: um texto básico para a análise de processos químicos. São Carlos: EDUSCAR, 2010.

BrOffice. Disponível em: <<http://broffice.org/>>. Acesso em: 6 dez. 2016.

FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W. **Princípios elementares dos processos químicos**. Rio de Janeiro: LTC, 2008.

GNANSOUNOU, E.; DAURIAT, A.; WYMAN, C. E. Refining sweet sorghum to ethanol and sugar: economic trade-offs in the context of North China. **Biores. Technol.**, n. 96, p. 985-1002, 2005.

HIMMELBLAU, D. M.; RIGGS, J. B. **Engenharia química**: princípios e cálculos. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.

MOURA, L. F. **Excel para engenharia**: formas simples para resolver problemas complexos. São Carlos: Ufscar, 2007.

TERRON, L. A. **Operações unitárias para químicos, farmacêuticos e engenheiros**: fundamentos e operações unitárias do escoamento de fluidos. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

Balanços de massa estacionários sem reações químicas

Convite ao estudo

Seja bem-vindo à segunda unidade de *Princípios de Processos Químicos*. Na unidade anterior conceituamos um processo químico, apresentando as dimensões e unidades, bem como as principais variáveis operacionais de processos. Nesta unidade, você desenvolverá habilidades em certos métodos básicos de análise de processos químicos, preparando-se para formular e resolver balanços de massa em sistemas de processos químicos, formando a base para os cursos mais avançados e específicos nas diversas áreas da engenharia química.

Os balanços materiais são muito importantes na indústria de processos químicos, pois eles são usados para descrever quantidades de materiais que passam através de um volume de controle. Tais balanços são baseados nas Leis de Conservação de Massa, se não há acúmulo e nem geração dentro de um processo unitário, então as quantidades de massa que entram e saem do processo são iguais. Trabalhando-se a partir de operações unitárias individuais, torna-se uma abordagem prática e atraente para se aplicar os balanços em sistemas mais complexos. Propor o entendimento e o manuseio de balanços materiais é um ponto crítico para você, profissional de engenharia química.

Assim sendo, temos como competência geral da disciplina conhecer e compreender os principais conceitos e variáveis envolvidas em processos químicos, bem como as metodologias para os cálculos de balanço de massa e como competência técnica dessa unidade conhecer e ser capaz de identificar e analisar balanços de massa em processos em

regime estacionário sem reações químicas. Desta forma esta unidade têm os seguintes objetivos de aprendizagem: (1) conhecer as operações unitárias voltadas a processos químicos; (2) apresentar os métodos para organizar as informações conhecidas sobre as variáveis do processo; (3) estabelecer as equações de balanço de massa, assim como as suas soluções para determinar as variáveis desconhecidas; (3) classificar os processos químicos, introduzindo o conceito de diagrama de fluxo e/ou fluxograma de processo; (4) conhecer o conceito de graus de liberdade para uma operação unitária; (5) conhecer e aplicar os conceitos de graus de liberdade para múltiplas operações unitárias, conceitos de reciclo, by-pass e purga; e (6) realizar procedimentos de cálculo aplicando os balanços de massa assistidos por computador.

Você é o encarregado dos processos produtivos de uma grande indústria química. O seu gestor solicitou que você revisasse todos os dados referentes aos cálculos de balanços, pois acredita que o processo não está sendo produzido corretamente. Você deve fornecer ao seu gestor um parecer conclusivo acerca dos cálculos e dos possíveis erros de cálculos e, caso identifique causas do problema, deve sugerir medidas para corrigi-lo. Como os balanços de massa podem ser introduzidos na resolução desse problema? O conceito de graus de liberdade deve ser considerado?

Os conceitos a serem vistos nesta unidade são essenciais para o sucesso de um profissional, sendo assim, fique atento aos procedimentos que abordaremos no decorrer do texto. Sucesso na sua jornada!

Seção 2.1

Definição de balanço de massa em uma operação unitária

Diálogo aberto

A lei de conservação da massa é a base para a realização dos balanços de massa em uma unidade, estabelecendo que a massa não pode ser criada e nem destruída. Em determinadas condições, os cálculos baseados na lei de conservação da massa podem ser simplificados, tais como: "massa total de entrada = massa total de saída". O projeto de um novo processo ou a análise de um já existente não estará completo até que se estabeleça que as entradas e saídas do processo e cada unidade individual satisfaça as equações de balanço de massa.

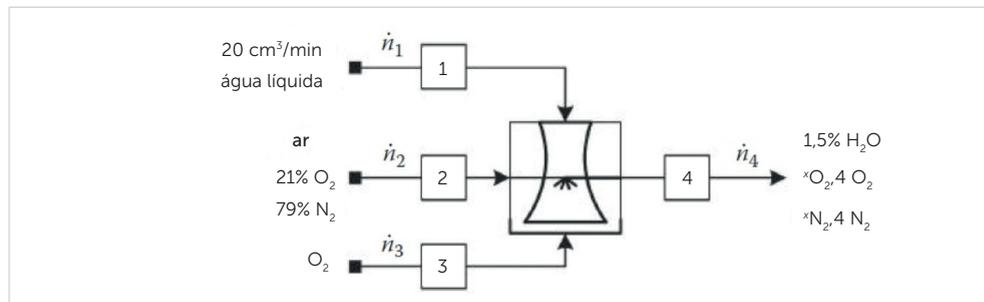
Resolver as equações de balanços normalmente é uma questão de álgebra simples, mas deduzi-las a partir da descrição do processo e de uma quantidade de dados de algumas variáveis dele pode ser uma tarefa difícil. Nem sempre é óbvio, a partir do enunciado do problema, saber o que é conhecido e o que se quer calcular, e é comum se deparar com profissionais que ficam trabalhando arduamente durante horas em um problema, sem encontrar a solução. Um fluxograma de processo bem rotulado pode ser usado para determinar, antes de qualquer cálculo, se um problema dado pode ou não ser resolvido com a informação conhecida. O procedimento para fazer isto é conhecido como análise de graus de liberdade.

Você é o encarregado dos processos produtivos de uma grande indústria química e como toda indústria desse porte, possui geradores de vapor em sua área de utilidades (Figura 2.1). A pedido do seu gestor, você avaliará o funcionamento de um gerador de vapor, que possui três correntes de alimentação, produzindo uma corrente de saída com a composição desejada. A primeira corrente de alimentação é composta por água líquida a uma vazão de $20 \text{ cm}^3/\text{min}$, a segunda é uma corrente de ar (21% molar de O_2 e o resto de N_2) e a terceira é oxigênio puro alimentado a $1/5$ da vazão da corrente de ar. A saída de vapor úmido deve conter 1,5% molar de água. Como você calculará as variáveis desconhecidas nas correntes do gerador de vapor? Qual será a vazão de vapor úmido? O balanço de massa está correto?

Aplicando os conceitos que serão vistos nesta seção, você resolverá o proble

ma proposto e também muitos outros referentes ao cotidiano de um profissional químico. Bons estudos!

Figura 2.1 | Representação de um gerador de vapor



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015, p. 96).

Não pode faltar

Definição de balanço de massa e conceito de estado estacionário

Certas restrições impostas pela natureza devem ser levadas em consideração quando se quer projetar um novo processo ou analisar um já existente. Por exemplo, você não pode especificar uma entrada a um reator, cuja massa na saída seja o dobro da sua entrada. Da mesma maneira, se você sabe que existem 1.500 lbm de enxofre contidas no carvão que é queimado por dia na caldeira de uma planta de energia, você não precisa analisar as cinzas e os gases de chaminé para saber que 1.500 lbm de enxofre estão sendo liberadas na atmosfera por dia de uma forma ou de outra (FELDER; ROUSSEAU, 2011).

A base para essas observações é a lei de conservação da massa, que estabelece que a massa não pode ser criada nem destruída. Cálculos baseados na aplicação dessa lei, tais como "massa total de entrada = massa total de saída", são exemplos de balanços de massa ou balanços de material. O projeto de um novo processo ou a análise de um já existente não estão completos até que se estabeleça que as entradas e saídas do processo inteiro e de cada unidade individual satisfaçam as equações de balanço.

Os processos químicos podem ser classificados como contínuos, em batelada ou semibatelada, e também como processos transientes ou em estado estacionário. Antes de escrever o balanço de massa para um determinado processo, você deve saber em quais destas categorias está enquadrado, bem como o conceito de operação unitária, conforme as descrições a seguir:

1. **Processos em batelada:** a alimentação é carregada no sistema no começo

do processo e os produtos são retirados todos juntos depois de algum tempo. Não existe transferência de massa através dos limites do sistema entre o momento da carga da alimentação e o momento da retirada dos produtos.

2. **Processos contínuos:** as entradas e saídas fluem continuamente ao longo do tempo total de duração do processo.
3. **Processos em semibatelada (ou semicontínuos):** qualquer processo que não é nem contínuo nem em batelada.
4. **Estado estacionário:** se os valores de todas as variáveis no processo (quer dizer, todas as temperaturas, pressões, volumes, vazões etc.) não variam com o tempo, se diz que o processo está operando em **estado estacionário**. Regime permanente é um sinônimo.
5. **Regime transiente:** se qualquer das variáveis do processo muda com o tempo, então se diz que a operação é transiente ou está no estado não estacionário. Dessa forma, os processos contínuos podem ser tanto estacionários quanto transientes.
6. **Operação unitária:** é uma etapa básica de um processo. O conceito de operações unitárias é importante não só para o engenheiro químico, mas para todos os profissionais que exercem suas atividades nos diversos ramos da indústria química. Normalmente, um processo produtivo é composto por várias operações unitárias, conversões químicas e outros tipos de etapas (reações químicas, por exemplo).



Assimile

Assimile conceitos importantes para que um balanço de massa possa ser executado:

Processos em batelada: não existe transferência de massa através dos limites do sistema entre o momento da carga da alimentação e o momento da retirada dos produtos.

Processos contínuos: as entradas e saídas fluem continuamente ao longo do tempo total de duração do processo.

Processos em semibatelada: qualquer processo que não é nem contínuo nem em batelada.

Estado estacionário: se os valores de todas as variáveis no processo (quer dizer, todas as temperaturas, pressões, volumes, vazões etc.) não variam com o tempo.

Regime transiente: se qualquer das variáveis do processo muda com o tempo, então se diz que a operação é transiente ou está no estado não estacionário.

Balanços de massa

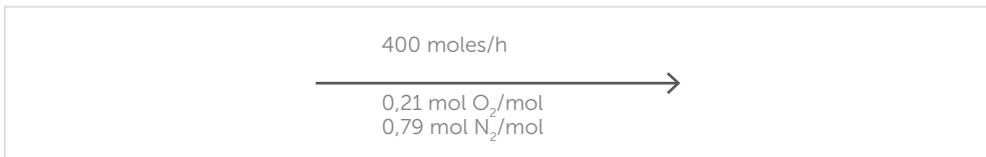
Quando usado apropriadamente, o diagrama de fluxo de um processo pode ser de enorme ajuda para começar os cálculos dos balanços de massa e no andamento destes. Para isto, o diagrama deve ser completamente rotulado, com valores de todas as variáveis conhecidas do processo e símbolos para todas as variáveis desconhecidas, em cada corrente de entrada ou saída. A seguir, são apresentadas várias sugestões para rotular o seu diagrama de fluxo, de modo a tirar o maior proveito possível dele em cálculos de balanços de massa.

Especificação das correntes para balanço de massa contendo múltiplas entradas e saídas

Quando você se depara com uma descrição de um processo deste tipo e quer analisar as suas características, é essencial organizar a informação dada em uma forma conveniente para os cálculos subsequentes. A melhor maneira de se realizar essa análise é usando um diagrama de fluxo ou fluxograma do processo, usando caixas ou outros símbolos para representar as operações unitárias envolvidas (reatores, separadores, misturadores etc.) e setas para representar as correntes de entrada e de saída.

1. **Escreva os valores e as unidades de todas as variáveis das correntes conhecidas na localização apropriada no diagrama.** Por exemplo, uma corrente contendo 21% molar de O_2 e 79% molar de N_2 a $320\text{ }^\circ\text{C}$ e $1,4\text{ atm}$ fluindo com uma vazão de 400 moles/h deve ser rotulada como apresenta a Figura 2.2.

Figura 2.2 | Representação de uma corrente de processo



Fonte: elaborada pela autora.

Quando você representa uma corrente no diagrama como mostrado na Figura 2.2, você tem um sumário de toda a informação conhecida sobre o processo, estando cada item convenientemente associado com as etapas do processo as

quais estão relacionadas.

As variáveis de corrente de interesse primário nos problemas de balanço de massa são aquelas que indicam a quantidade molar ou mássica de cada componente presente na corrente (para um processo em batelada) ou a vazão de cada componente (para um processo contínuo). Esta informação pode ser dada de duas maneiras: como a quantidade total ou vazão total da corrente e as frações de cada componente, ou diretamente como a quantidade ou a vazão de cada componente, como exemplifica a Figura 2.3.

Figura 2.3 | Representação da quantidade total ou de cada componente em uma corrente de processo

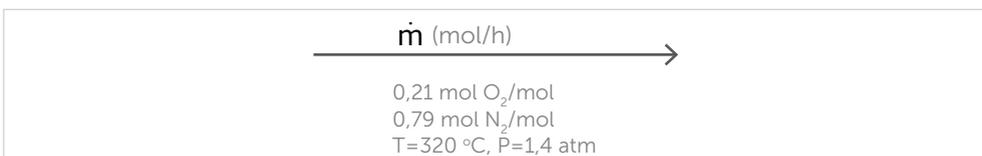


Fonte: elaborada pela autora.

Uma vez rotulada uma corrente de processo, conforme uma das maneiras apresentadas, é fácil calcular as quantidades que correspondem à outra forma de rotular.

- Atribua símbolos algébricos às variáveis desconhecidas de cada corrente** (\dot{m} = vazão mássica, x – fração molar em fase líquida, n = número de mols, entre outras) **e escreva esses nomes de variáveis e as suas unidades associadas no diagrama.** Por exemplo, se você não conhece a vazão da corrente descrita na Figura 2.2, você pode rotular a corrente como mostra a Figura 2.4.

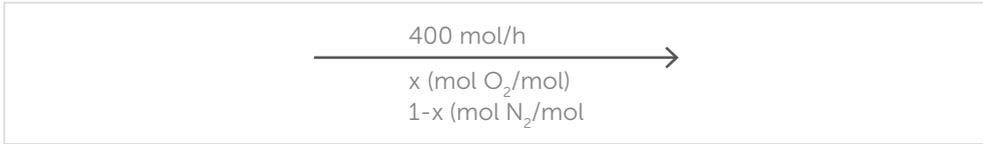
Figura 2.4 | Representação de uma corrente com vazão desconhecida



Fonte: elaborada pela autora.

Da mesma forma, se as frações molares do processo não forem conhecidas, mas tem-se o valor da vazão, a corrente pode ser rotulada como apresentado na Figura 2.5.

Figura 2.5 | Representação de uma corrente com frações molares desconhecidas

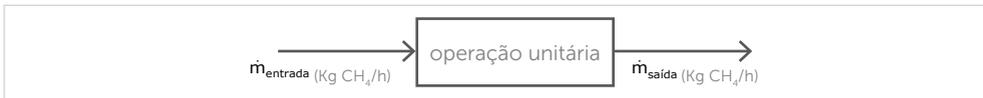


Fonte: elaborada pela autora.

A equação geral do balanço de massa

Suponhamos que o metano seja um componente presente nas correntes de entrada e saída de uma operação unitária presente em um processo contínuo e, visando avaliar se a unidade está trabalhando da forma que foi projetada, as vazões mássicas de metano sejam medidas em ambas as correntes e observou-se que possuem valores diferentes ($\dot{m}_{\text{entrada}} \neq \dot{m}_{\text{saída}}$), como representado pela Figura 2.6.

Figura 2.6 | Representação das correntes de entrada e saída de uma operação unitária



Fonte: adaptada de Felder e Rousseau (2011).

Um balanço de uma quantidade conservada (massa total, massa de uma espécie particular, energia, momento) em um sistema (uma unidade de processo, uma série de unidades ou um processo completo) pode ser escrito na seguinte forma geral:

Entrada	+ Geração	- Saída	- Consumo	= Acúmulo
{entra através dos limites do sistema}	{produzido dentro do sistema}	{sai através dos limites do sistema}	{consumido dentro do sistema}	{acumula-se dentro do sistema}

Balanço de massa total sem reação química

Na equação geral de balanço, os termos geração e consumo referem-se à geração de produtos ou ao consumo dos reagentes, ou seja, à ocorrência de uma transformação química. Se não há reação química, estes termos são nulos no balanço. Assim como, se o balanço é de massa total, pois envolve a massa total do conjunto de todos os componentes que entram no sistema e saem dele, os termos de geração e de consumo também são zero. Portanto, no balanço para a massa total também desaparecem os termos de geração e consumo, uma vez que a matéria não pode ser criada ou destruída (exceto, nas reações nucleares). As massas dos reagentes e produtos se alteram. No entanto, a massa total (reagentes + produtos) permanece constante, pois na medida em que a massa dos reagentes diminui quando são consumidos, a dos produtos aumenta quando são produzidos.

Então, o balanço para massa total, ou o balanço sem reação química, a equação geral do balanço é escrita da seguinte forma:

$$\text{Entrada} - \text{Saída} = \text{Acúmulo}$$

O termo de acúmulo indica que há variação de massa com o tempo, e este termo representa a variação da massa com tempo. Sendo assim, o termo de acúmulo é diferente de zero. Já os termos de entrada e de saída representam as vazões mássicas que entram e saem do processo, respectivamente.

Balanço de massa em estado estacionário ou regime permanente

Nesse caso, não há acúmulo de massa ou variação da massa com o tempo. E, portanto, o termo de acúmulo é igual a zero. Dessa forma, a vazão mássica que entra é igual à vazão mássica que sai, e a equação do balanço geral é escrita como sendo:

$$\text{Entrada} = \text{Saída}$$

Balanço de massa para um componente (espécie química A)

Assim como para a massa total, a equação geral de balanço pode ser escrita para um dado componente A ou espécie química A presente numa mistura da forma que segue:

$$\text{Saída}(A) = \text{Entrada}(A) + \text{Reage}(A) - \text{Acúmulo}(A)$$

Assim, para processos contínuos sem reação química, o termo $\text{Reage}(A) = \text{gerado} - \text{consumido} = 0$ (zero), conduz ao balanço. Em termos matemáticos pode ser escrito da seguinte forma:

$$\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{A,e} - \dot{m}_{A,s}, \text{ se o estado é estacionário, isto implica que a}$$

$$\frac{dm_A}{dt} = 0 \Rightarrow \underline{\dot{m}_{A,e} = \dot{m}_{A,s}}, \text{ em que a vazão mássica } \dot{m} = \rho \cdot \dot{V} \text{ é o produto da vazão}$$

volumétrica pela massa específica da espécie, bem como pode ser dada pelo $\dot{m} = \rho \cdot \dot{V} \cdot A$ com $\dot{V} = v \cdot A$. Onde v é a velocidade média do fluido e A é a área de escoamento.

No entanto, as parcelas da equação anterior podem ser escritas em função das quantidades totais e de suas frações mássicas ou molares dependendo da base de cálculo escolhida, neste caso, a base em massa, então, pode-se escrever o balanço como:

$$\dot{m}_{A,e} = \dot{m}_{A,s}$$

$$\underline{\underline{x_{A,e} \times \dot{m}_e = x_{A,s} \times \dot{m}_s}}$$

Base de cálculo

A base de cálculo é a referência escolhida por você para planejar como vai solucionar um determinado problema. A base de cálculo pode ser em massa, tempo ou quantidade conveniente. É importante que a base de cálculo escolhida seja indicada claramente no início do problema. A base pode ser uma quantidade de massa total, uma vazão de uma das correntes de processos. Se nenhuma quantidade ou vazão for conhecida, assuma como uma base de cálculo (100 kg, 100 kg/h, 100 mols, 100 mols/h etc.). Escolha uma quantidade ou vazão de composição conhecida. O importante é que, independentemente da base que você escolher, os cálculos de balanços finais de massa e de composições têm que convergir para um mesmo resultado.



Pesquise mais

Acesse este artigo e conheça uma aplicação real do balanço de massa:

VIDAL, T. F; NETO, J. C. Dinâmica de nitrogênio e fósforo em reservatório na região semiárida utilizando balanço de massa. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, PB, UAEEA/ UFCG. v. 18, n. 4, p. 402-407, 2014. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S1415-43662014000400007&script=sci_arttext>. Acesso em: 2 out. 2016.

Análise de graus de liberdade (n_{gl})

A análise de graus de liberdade é uma ferramenta para a análise sistemática do diagrama de fluxo, ou fluxograma do processo. Através desta análise, é possível avaliar se o problema tem solução e se as informações avaliadas são suficientes, conduzindo a uma abordagem estruturada para decidir a ordem das equações a serem resolvidas.



Refleta

Já imaginou o quanto a análise dos graus de liberdade é importante para o cálculo dos processos químicos? Pensou que essa análise poderá guiá-lo para que tome a melhor decisão perante as variáveis de processo? Quantos serão os graus de liberdade em um processo de evaporação? Reflita!

Para realizar uma análise de graus de liberdade, desenhe e rotule completamente

o fluxograma do processo, conte as incógnitas existentes no diagrama, conte depois as equações independentes que as relacionam e subtraia um número do outro. O resultado é número de graus de liberdade do processo, $n_{gl} = n_v - n_e$.

Em que $n_v \rightarrow$ número de incógnitas ou variáveis;

$n_e \rightarrow$ número de equações.

Existem três possibilidades:

1. Se $n_{gl} = 0$, existem n equações independentes em n incógnitas e o problema pode, em princípio, ser resolvido.
2. Se $n_{gl} > 0$, existem mais incógnitas do que equações independentes e, no mínimo, n_{gl} valores de variáveis adicionais devem ser especificados antes que as restantes possam ser determinadas.
3. Se $n_{gl} < 0$, existem mais equações do que variáveis. Pode ser que o diagrama esteja mal rotulado ou que o problema esteja superespecificado com relações redundantes e possivelmente inconsistentes.

Algumas fontes de equações que relacionam as variáveis do processo são:

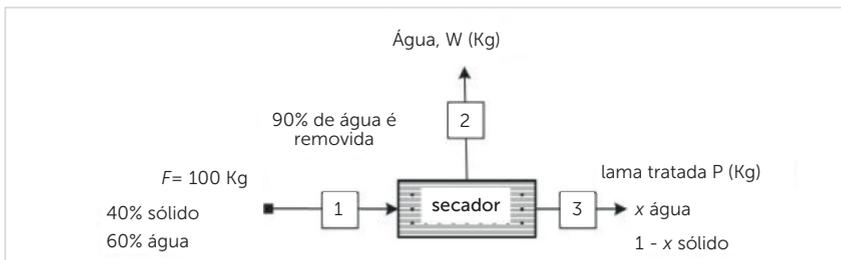
1. **Balancos de massa:** para um processo não reativo, podem ser escritos até N balanços materiais, onde N é o número de espécies moleculares (CH_4 , H_2O etc.) no processo.
2. **Um balanço de energia:** se a quantidade de energia trocada entre o sistema e as suas vizinhanças é especificada, ou se esta energia é uma das variáveis do processo, um balanço de energia proporciona uma relação entre as vazões e temperaturas de entrada e saída.
3. **Especificações do processo:** o enunciado do problema pode dizer como algumas variáveis estão relacionadas. Por exemplo, pode ser informada a fração de um componente em uma corrente de entrada que depois aparece na corrente de saída.
4. **Leis e propriedades físicas:** duas das variáveis desconhecidas podem ser a massa e o volume de uma corrente; neste caso, uma densidade tabelada (para líquidos e sólidos) ou uma equação de estado (para gases) podem proporcionar uma relação entre as variáveis.
5. **Restrições físicas:** por exemplo, se as frações molares dos componentes de uma corrente são rotulados independentemente (por exemplo, x_A , x_B e x_C), então, uma relação entre elas é $x_A + x_B + x_C = 1$. (Se no lugar de x_C você rotula a última fração como sendo $1 - x_A - x_B$, então, você tem uma variável a menos e uma relação a menos com o que se preocupar).



Exemplificando

100 kg de lodo ativado são alimentados em um secador para ser seco pelo aquecimento em uma fornalha. O lodo ativado é carregado em uma fornalha com 60% de umidade (W) e 40% de sólido seco (S). Note que no processo de secagem 90% de água é removida. O fluxograma de processo e a rotulagem das suas correntes são apresentados a seguir. Calcule o número de graus de liberdade e as variáveis desconhecidas no processo de secagem.

Figura 2.7 | Processo de secagem



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015).

Resolução:

Análise de graus de liberdade

A maneira mais fácil e didática de tratar o número de graus de liberdade é através da reunião das fontes de informações entre as variáveis de processos em uma tabela. Como na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 | Análise de graus de liberdade para processo de secagem

Item Fontes	Fontes	Quantidades	Justificativa
1	número de variáveis desconhecidas	3	W, P, e x
2	número de equações independentes	2	Um Balanço global + um balanço parcial para W ou para S
3	número de relações	1	90% de água é removido
4 graus de liberdade	graus de liberdade	0	$n_{gl} = 3 - 2 - 1 = 0$

Fonte: elaborada pela autora.

Portanto, os graus de liberdade igual a zero implicam em uma solução única para o problema.

Balanço de massa global:

$$\text{Entrada} + \text{Geração} - \text{Saída} - \text{Consumo} = \text{Acúmulo}$$

Estado estacionário (acúmulo=0) e sem reação química (Geração=consumo=0), logo:

$$\text{Entrada} = \text{Saída}$$

$$F = W + P$$

Balanço de massa parcial para a água:

$$x_{w,F} \cdot F = x_{w,W} \cdot W + x_{w,P} \cdot P \quad (2) \quad x_{w,F} = 0,6 \text{ e } F = 100 \text{ kg};$$

$$x_{w,W} = 1 \text{ (água pura)}$$

90% de água é removido no topo:

$$W = 0,9 \times 0,6 \times 100 = \underline{\underline{54 \text{ kg}}}$$

Como temos F e W, pelo balanço global em (1):

$$F - W = P \quad (3) \Rightarrow P = 100 - 54 = \underline{\underline{46 \text{ kg}}}$$

Do balanço para a água (de (2));

$$x_{w,P} = \frac{x_{w,F} \cdot F - x_{w,W} \cdot W}{P} = \frac{0,6 \times 100 - 1 \times 54}{46} = \underline{\underline{0,13}}$$

$$\text{Logo: } x_{s,P} + x_{w,P} = 1 \Rightarrow x_{s,P} = 1 - x_{w,P} = 1 - 0,13 = \underline{\underline{0,87}}$$

Assim, $x = 0,13$ e $(1-x) = 0,87$.

Sem medo de errar

Você é o encarregado dos processos produtivos de uma grande indústria química e como toda indústria desse porte, possui geradores de vapor em sua área de utilidades. A pedido do seu gestor, você avaliará o funcionamento de um

gerador de vapor, que possui três correntes de alimentação, produzindo uma corrente de saída com a composição desejada. A primeira corrente de alimentação é composta por água líquida a uma vazão de $20 \text{ cm}^3/\text{min}$, a segunda é uma corrente de ar (21% molar de O_2 e o resto de N_2) e a terceira é oxigênio puro alimentado a 1/5 da vazão da corrente de ar. A saída de vapor úmido deve conter 1,5% molar de água. Para resolver esse problema e verificar se o balanço de massa está correto, você calculará as variáveis desconhecidas nas correntes do gerador de vapor, bem como a vazão de vapor úmido.

Resolução

Para dar início à resolução, temos que a base de cálculo do problema é uma vazão volumétrica de $20 \text{ cm}^3/\text{min}$. Como a alimentação é dada por uma composição molar, é necessário convertê-la de vazão volumétrica para uma base em massa. Portanto, a vazão mássica na corrente (1) é dada por:

$$\dot{m}_1 = \dot{V} \times \rho = (20 \text{ cm}^3/\text{min}) \cdot (1 \text{ g/cm}^3) = \underline{\underline{20 \text{ g/min}}}$$

Vazão molar da água

$$\dot{n}_1 = \frac{\dot{m}_1}{M_{w, \text{H}_2\text{O}}} = \frac{(20 \text{ g/min})}{18 \text{ g/mol}} = \underline{\underline{1,11 \text{ mols/min}}}$$

Relação: vazão molar de oxigênio puro é 1/5 da vazão de ar (corrente 2):

$$\frac{1}{5}(\dot{n}_2) = \dot{n}_3$$

Agora que as relações entre as variáveis estão estabelecidas e as devidas conversões entre as vazões foram feitas, deve-se aplicar o balanço material para os componentes envolvidos no processo:

Balanço parcial para a água:

$$1,11 \frac{\text{mol}}{\text{min}} = 0,015 \dot{n}_4 \Rightarrow \dot{n}_4 = \underline{\underline{74 \frac{\text{mols}}{\text{min}}}}$$

Balanço global:

$$\dot{n}_1 + \dot{n}_2 + \dot{n}_3 = \dot{n}_4 \Rightarrow 1,11 \frac{\text{mol}}{\text{min}} + \dot{n}_2 + \frac{1}{5} \dot{n}_2 = 74$$

$$\dot{n}_2 = \underline{\underline{60,74 \frac{\text{mols}}{\text{min}}}}$$

Cálculo das composições:

Balanço parcial para o N_2 :

$$0,79 \times \dot{n}_2 = x_{\text{N}_{2,4}} \cdot \dot{n}_4 \Rightarrow 0,79 \times 60,74 = x_{\text{N}_{2,4}} \cdot 74$$

$$\underline{\underline{x_{\text{N}_{2,4}} = 0,65}}$$

Fração molar do oxigênio na corrente de produto:

$$\underline{\underline{x_{O_2,4} = 1 - x_{N_2,4} = 0,337}}$$

Para verificação dos seus cálculos, você pode utilizar o balanço para o oxigênio como forma de validar o seu balanço:

$$0,21 \times \dot{n}_2 + \frac{1}{5} \dot{n}_2 = x_{O_2,4} \cdot \dot{n}_4 \Rightarrow$$

$$(0,21) \times (60,74) + \left(\frac{1}{5}\right) \times (60,74) = 0,337 \times (74,0)$$

$$(25 = 25) \text{ igualdade validada}$$

Verificando os cálculos realizados, você pode afirmar que a operação do gerador de vapor está correta e produzindo 74 mols/min de vapor úmido.

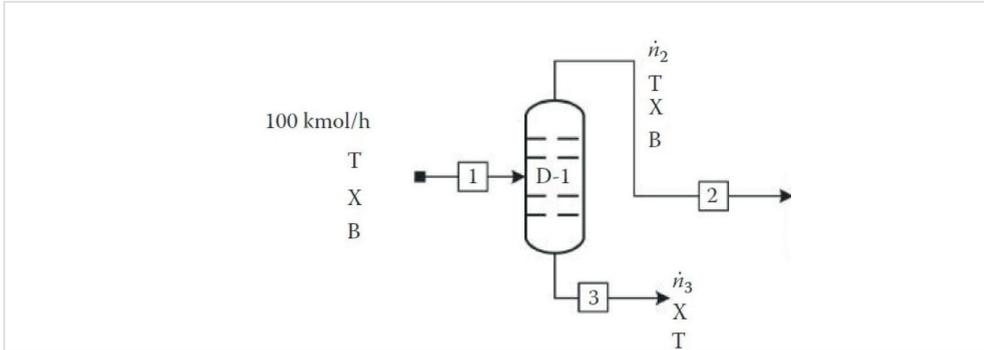
Avançando na prática

Projeto de uma coluna de destilação para a recuperação de xileno em uma unidade industrial

Descrição da situação-problema

Era um dia quente de setembro. Após longa noite estudando para a avaliação oficial de princípios de processos químicos, que será no dia seguinte, você volta para casa dirigindo. Você não pode se esquecer de que precisa tirar uma boa nota para obter aprovação. Ao chegar à sua casa, você faz um lanche e vai para a cama. Alguns minutos depois de adormecer, um estranho sonho começa a tomar forma em sua cabeça. De repente, você já está formado e é um consultor em uma companhia de engenharia de processos. Você está encarregado de examinar alguns problemas em uma unidade de produção de benzeno e deve monitorar uma das suas colunas de destilação, de modo que ela opere dentro das condições operacionais de processo e das suas restrições. Sua tarefa é observar as composições e quantidades dos produtos de topo e de base. Mas o principal ponto é fazer com que a coluna trabalhe com as especificações pelas quais ela foi projetada, de acordo com a descrição do processo apresentado na Figura 2.8. Uma corrente de alimentação de uma coluna de destilação contém uma mistura líquida composta por 35% molar de tolueno (T), 25% molar de xileno (X), e a composição restante é de benzeno (B). A alimentação original é caracterizada por uma vazão molar de alimentação de 100 kmol/h. O produto da corrente de fundo da coluna tem 97% molar de xileno (X), 0% de B. A coluna deve ser projetada para que recuperar 93% da alimentação de B na corrente de destilado. Como você deverá proceder para encontrar o valor das vazões molares das correntes de fundo e destilado?

Figura 2.8 | Processo de destilação BTX



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015).

Resolução da situação-problema

Como primeiro passo, você deve pautar os cálculos na recuperação de xileno na base da coluna na qual foi projetada. Assim, visando a recuperação de xileno na base, podemos saber qual é a vazão molar total da corrente 3. Dessa forma, temos que o sistema ternário, **tolueno** (T), **xileno** (X) e **benzeno** (B), possui os seguintes dados:

Alimentação

$$x_{T,1} = 0,35 \text{ e } \dot{n}_1 = 100 \text{ mol/h}$$

$$x_{X,1} = 0,25$$

$$x_{B,1} = 0,40$$

Fundo

$$x_{T,3} = 0,03$$

$$x_{X,3} = 0,97$$

$$x_{B,3} = 0,00$$

Realizando o balanço de massa global, temos que:

$$\text{Entrada} + \text{Geração} - \text{Saída} - \text{Consumo} = \text{Acúmulo}$$

Estado estacionário (acúmulo = 0) e sem reação química (Geração = consumo = 0), logo:

Entrada = Saída $100 = \dot{n}_2 + \dot{n}_3$, pois a vazão da alimentação foi 100 mol/h e \dot{n}_3 pode ser calculado pela fração recuperada de benzeno no destilado, sendo:

$$x_{B,1} \cdot \dot{n}_1 = x_{B,2} \cdot \dot{n}_2 + x_{B,3} \cdot \dot{n}_3$$

$$0,4 \cdot 100 = 0,93 \cdot \dot{n}_2 + 0,0 \cdot \dot{n}_3$$

$$\dot{n}_2 = 43,01 \text{ mol/h}$$

Com a vazão mássica \dot{n}_3 , usando o balanço global:

$$100 = \dot{n}_2 + \dot{n}_3 \quad (1) \Rightarrow \dot{n}_3 = 100 - 43,01$$

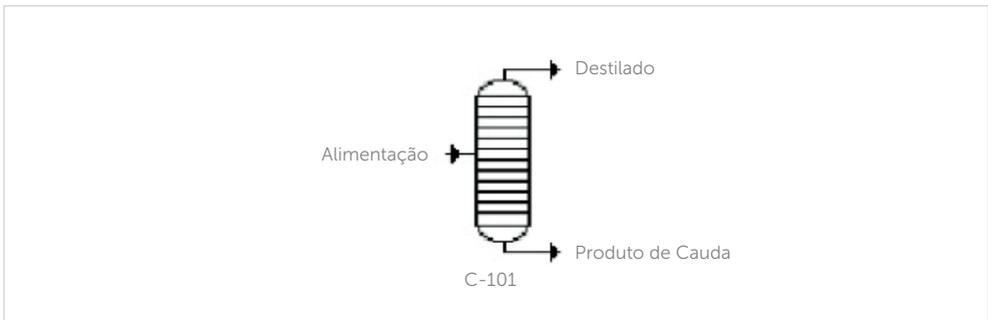
$$\dot{n}_3 = \underline{\underline{56,99 \text{ mol/h}}}$$

Conclui-se que a vazão de destilado e fundo são, respectivamente, 43,01 mols/h e 56,99 mols/h.

Faça valer a pena

1. Uma mistura líquida de benzeno e tolueno contém 55,0% em massa de benzeno. Uma parte desta mistura é evaporada, gerando um vapor que contém 85,0% de benzeno e um líquido residual que contém 10,06% de benzeno, de acordo com o equipamento a seguir. Suponha que o processo é operado de forma contínua e em estado estacionário, com uma vazão de alimentação de 100 kg/h da mistura.

Para o fluxograma do processo dado a seguir, escreva e resolva os balanços de massa total e de benzeno para determinar os valores de m_V (kg/h) e m_L (kg/h). Assinale a alternativa que apresenta os valores corretos das vazões mássicas das correntes de produto vapor (\dot{m}_V (kg/h)) e líquido (\dot{m}_L (kg/h)), respectivamente:

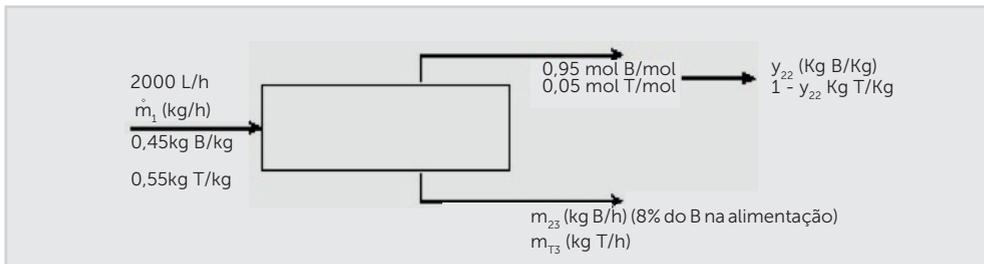


- a) $\dot{m}_L = 40,32 \text{ kg /h}$ e $\dot{m}_V = 59,67 \text{ kg /h}$
- b) $\dot{m}_L = 71,10 \text{ kg /h}$ e $\dot{m}_V = 28,9 \text{ kg /h}$
- c) $\dot{m}_L = 61,10 \text{ kg /h}$ e $\dot{m}_V = 71,10 \text{ kg /h}$
- d) $\dot{m}_L = 55,00 \text{ kg /h}$ e $\dot{m}_V = 45,00 \text{ kg /h}$
- e) $\dot{m}_L = 85,00 \text{ kg /h}$ e $\dot{m}_V = 15,00 \text{ kg /h}$

2. Uma mistura líquida contém 45,0% de benzeno (B) e 55,0% de tolueno (T) em massa alimenta uma coluna de destilação. Uma corrente de produto que deixa o topo da coluna (o produto de topo) contém 95,0% molar de B, e uma corrente de produto de fundo contém 8,0% do benzeno fornecido à coluna (querendo dizer que 92% do benzeno saem pelo topo). A vazão volumétrica da alimentação é 2.000 L/h e a densidade relativa da mistura de alimentação é 0,872. Determine a vazão mássica da corrente de topo e a vazão mássica e a composição (frações mássicas) da corrente de fundo.

Diante do fluxograma completamente rotulado e da divisão 8%-92% do benzeno entre as correntes de produto não é uma composição nem uma vazão; no entanto constitui-se em uma relação adicional entre as variáveis das duas correntes e, como tal, é escrita no diagrama para ser incluída na análise de graus de liberdade.

Figura 2.9 | Fluxograma de divisão do benzeno



Fonte: elaborada pela autora.

Assinale a alternativa que apresenta a afirmativa correta a respeito do número de graus de liberdade:

- a) 0
- b) 1
- c) 2
- d) 3
- e) 4

3. Os processos químicos podem ser classificados como contínuos, em batelada ou semibatelada, e também como processos transientes ou em estado estacionário. Antes de escrever o balanço de massa para um determinado processo, você deve saber em quais destas categorias está enquadrado.

Classifique os seguintes processos como batelada, contínuos ou semicontínuos e como transientes ou no estado estacionário.

1. Um balão está cheio com ar a uma taxa constante de 2 g/min.
2. Uma garrafa de leite é tirada da geladeira e deixada sobre a mesa da cozinha.
3. Água é fervida em um recipiente aberto.

A respeito dos processos mencionados, conclui-se que:

- I. O processo 1 é classificado como transiente e contínuo.
- II. O processo 2 é classificado como estacionário e batelada.
- III. O processo 3 é transiente e contínuo.

Marque a alternativa que apresenta as afirmativas corretas:

- a) I, apenas.
- b) I e II, apenas.
- c) II, apenas.
- d) I, II e III.
- e) III, apenas.

Seção 2.2

Balanço de massa em múltiplas operações unitárias

Diálogo aberto

Iniciamos a segunda unidade de Princípios de Processos Químicos desenvolvendo habilidades em certos métodos básicos de análise de processos químicos que são fundamentais para formular e resolver balanços de massa em sistemas de processos químicos, formando a base para os cursos mais avançados e específicos nas diversas áreas.

Nesta seção, você é convidado a ampliar o conceito de graus de liberdade para múltiplas unidades, executando os procedimentos estudados e aprendidos na seção anterior, aplicando os balanços de massa para múltiplas unidades de processo. Os métodos usados para organizar a informação conhecida sobre as variáveis de processo e para estabelecer as equações de balanço de massa, com a busca por solução das variáveis desconhecidas, continuam sendo válidos nesta seção.

Atuando como analista de processos de uma grande indústria química, você terá que revisar dados referentes aos cálculos de balanços de massa a pedido do seu gestor, que acredita que o processo não está produzindo corretamente. Nessa etapa, você analisará o balanço de massa de um processo de recuperação de um reagente químico de alto valor agregado, utilizado na indústria química em questão. Esse processo ocorre em mais de uma unidade, com reciclo, sem reação química e operando em estado estacionário, sendo que a recuperação deste produto (F) ocorre com a sua alimentação em uma centrífuga, que retira água (A) do reagente que, posteriormente, é centrifugado (C) e alimentado em um filtro rotativo, em que parte deste reagente é recirculado e unido à alimentação original, através da corrente de reciclo (R), e o produto final é o reagente recuperado (P). Para isto, de acordo com as especificações que a indústria deseja para este reagente, devem-se realizar os cálculos das variáveis de saída do sistema de recuperação. Considere que 120 lbm por hora do reagente (F) que entra na centrífuga tendo uma composição em massa de 25% em F e 75% em A, que se junta através de um

ponto de mistura com uma corrente de reciclo contendo uma relação mássica de 0,4 lbm de F por 1 lbm de A. A corrente concentrada que deixa a centrífuga contém composições molares de 70% em F, e de 30% em A; esta corrente entra em um filtro rotativo e logo é filtrada. A torta de filtro consiste em cristais do reagente, com as mesmas composições molares da corrente do produto centrifugado. A corrente W é composta de 100% de água. Mas qual será a vazão das correntes C, P e R? O processo está operando com as vazões corretas? Como o balanço de massa pode nos auxiliar a descobrir se o processo está operando corretamente?

Aplicando os conceitos que serão apresentados nesta seção, você poderá resolver o problema apresentado e muitos outros. Saiba como aplicá-los durante os nossos estudos. Vamos em frente!

Não pode faltar

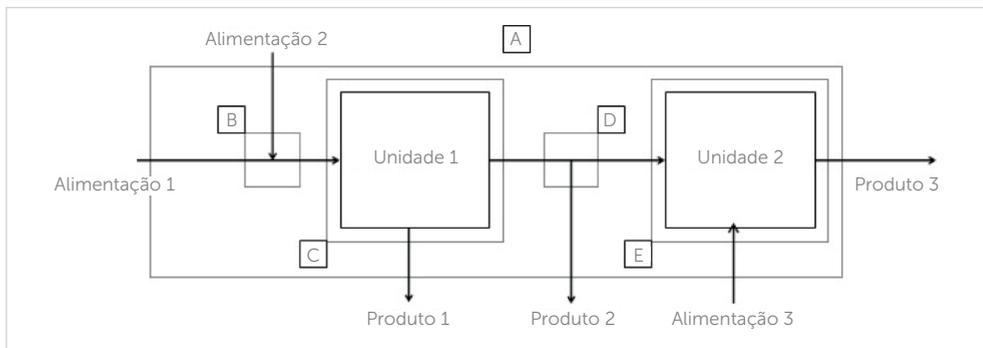
Conceitos de graus de liberdade para múltiplas operações unitárias

Consideramos até aqui apenas balanços de massa envolvendo uma operação unitária, mas os processos químicos industriais não envolvem apenas uma única unidade de processo. Para constitui-los são necessários, por exemplo, um ou mais evaporadores, múltiplas unidades para mistura de reagentes, trocadores de calor para aquecimento ou resfriamento de correntes, separadores para os produtos e/ou reagentes não consumidos e diversas unidades para remoção de efluentes potencialmente perigosos das correntes antes da descarga no meio ambiente. Antes de analisar tais processos, devemos olhar com mais atenção o que queremos representar por um sistema. Em termos gerais, um "sistema" é qualquer parte de um processo que pode ser incluída dentro de uma fronteira ou limite arbitrário. Pode ser o processo completo, uma combinação de algumas unidades do processo, uma única unidade, um ponto no qual duas ou mais correntes se juntam ou um ponto onde uma corrente se divide em outras. As entradas e saídas de um sistema são as correntes de processo que cortam as fronteiras deste.

A Figura 2.10 mostra um fluxograma para um processo de duas unidades. Cinco limites desenhados em torno das seções deste processo definem diferentes subsistemas nos quais podem ser escritos balanços de massa. A fronteira A contém o processo inteiro; o sistema definido por este limite tem como entradas as correntes de alimentação 1, 2 e 3 e as correntes de produto 1, 2 e 3 como saídas. Os balanços escritos para este sistema são conhecidos como balanços globais. A corrente que conecta as unidades 1 e 2 é própria do sistema e, portanto, não faz parte dos balanços globais. A fronteira B contém um ponto de mistura das correntes de alimentação. As correntes de alimentação 1 e 2 são as entradas e a corrente que flui para a unidade 1 é a saída. A fronteira C contém a unidade 1 (uma

corrente de entrada e duas de saída); a fronteira D contém um ponto de separação de correntes (uma corrente de entrada e duas de saída); e a fronteira E contém a unidade 2 (duas correntes de entrada e uma de saída).

Figura 2.10 | Fluxograma de um processo de duas unidades



Fonte: adaptada de Felder e Rousseau (2011, p. 92).

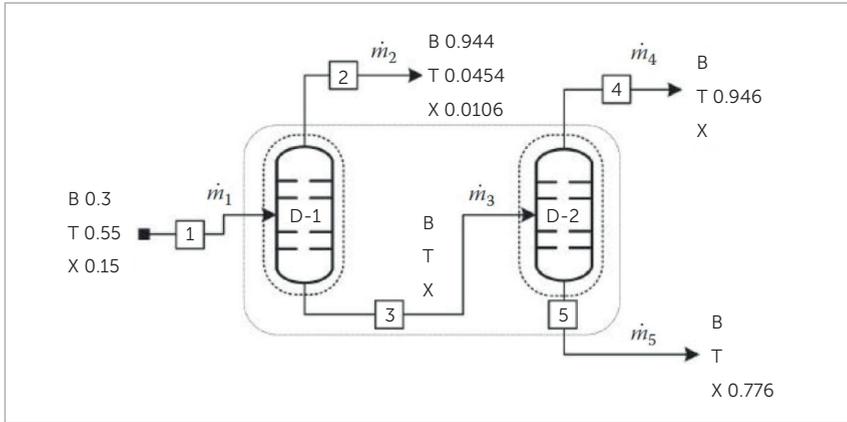
O procedimento para resolver os balanços de massa em processo de múltiplas unidades é essencialmente o mesmo já descrito para processo de unidades simples; a diferença é que agora você deve isolar e escrever os balanços para vários subsistemas do processo, de modo a obter equações suficientes para resolver todas as incógnitas. Quando analisar os processos de múltiplas unidades, faça a análise de graus de liberdade no processo global e em cada subsistema, levando em conta apenas as correntes que cortam os limites do sistema considerado.



Exemplificando

Duas colunas de destilação em série (Figura 2.11) são usadas para separar os componentes de uma alimentação que contém 30% de benzeno (B), 55% de tolueno (T) e 15% de xileno (X). A análise da corrente de topo da 1ª coluna tem uma pureza de 94,4% de B, 4,54% de T, e 1,06% de X. A 2ª coluna é projetada para recuperar 92% de tolueno da alimentação no topo da coluna com uma composição de 0,946. A sua base deve conter 92,6% de xileno da corrente de alimentação com uma composição de 0,776. Calcule todas as composições das correntes.

Figura 2.11 | Colunas de destilação em série



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015, p. 111).

Solução:

1º passo: fazer a análise de graus de liberdade e expressá-la em forma de tabela (Tabela 2.2).

Tabela 2.2 | Análise de graus de liberdade para colunas de destilação em série

	Sistema		
	D-1	D-2	Processo
Número de variáveis desconhecidas	5	7	6
Número de equações independentes	3	3	3
Número de relações	-	-	2
Número de graus de liberdade (ngl)	2	4	1

Fonte: elaborada pela autora.

2º passo: analisando os dois subsistemas “D-1” e “D-2” e o sistema “processo global”.

O processo global, sendo considerado como o “sistema”, é o que oferece um menor valor dos graus de liberdade. E, portanto, mais próximo dos graus de liberdade zero, é por ele que se deve começar a escrever os balanços. Então, o sistema escolhido para iniciar os cálculos é o processo global, e à medida que se estabelece uma base

de cálculo para escrever os balanços, o número de graus de liberdade do sistema se torna zero.

Lembrando-se que se deve escrever:

1. **balanço global de massa** e
2. **balanços de massa parciais** (para o componente benzeno e para o tolueno).

A partir da nomenclatura escolhida para as correntes, da sua rotulagem e da região delimitada pela superfície de controle estabelecidas na Figura 2.11, e admitindo uma **base de cálculo** de $\dot{m}_1 = 100 \text{ kg/h}$ da alimentação escreve-se o balanço global de massa a seguir:

Sistema: processo global

Balanço global de massa:

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_2 + \dot{m}_4 + \dot{m}_5 \quad (1)$$

$$100 = \dot{m}_2 + \dot{m}_4 + \dot{m}_5 \quad (2)$$

- **Balanço de massa para o benzeno:**

$$0,3 \cdot 100 \text{ kg/h} = 0,994 \cdot \dot{m}_2 + x_{B,4} \cdot \dot{m}_4 + x_{B,5} \cdot \dot{m}_5 \quad (3)$$

$$\text{Dados: } x_{B,1} = 0,3 \text{ e } \dot{m}_1 = 100 \text{ kg/h}$$

$$x_{B,2} = 0,994$$

- **Balanço de massa para o tolueno:**

$$0,55 \cdot 100 \text{ kg/h} = 0,0454 \cdot \dot{m}_2 + 0,946 \cdot \dot{m}_4 + (1 - 0,776 - x_{B,5}) \cdot \dot{m}_5 \quad (4)$$

$$\text{Dados: } x_{T,1} = 0,55 \text{ e } (1 - x_{X,5} - x_{B,5}) \therefore \sum x_i = 1$$

$$x_{T,2} = 0,0454$$

- **Balanço de massa para o xileno:**

$$0,15 \cdot 100 \text{ kg/h} = 0,0106 \cdot \dot{m}_2 + (1 - 0,946 - x_{B,4}) \cdot \dot{m}_4 + (0,776) \cdot \dot{m}_5 \quad (5)$$

$$\text{Dados: } x_{X,1} = 0,15 \text{ e } x_{X,5} = 0,776$$

$$x_{X,2} = 0,0106$$

Dos balanços (2), (3), (4) e (5), temos um sistema de 4 equações e 5 incógnitas (\dot{m}_2 , \dot{m}_4 , \dot{m}_5 , $x_{B,4}$ e $x_{B,5}$) que, por enquanto, não pode ser resolvido.

Portanto, devemos seguir o 3º passo.

3º passo: observar as relações especificadas para o processo global e que foram computadas na análise dos graus de liberdade:

- I. Primeira relação diz que a 2ª coluna foi projetada para recuperar 92% de tolueno da alimentação original na corrente de topo: acha-se, portanto, a vazão mássica da corrente 4 (\dot{m}_4).

O balanço para o tolueno, no topo da 2ª coluna, considerando a recuperação será:

$$(0,92) \cdot 0,55 \cdot 100 \text{ kg/h} = 0,946 \cdot \dot{m}_4 \quad (6) \text{ assim,}$$

$$\dot{m}_4 = (0,92) \cdot 0,55 \cdot 100 \text{ kg/h} / 0,946$$

$$\underline{\underline{\dot{m}_4 = 53,5 \text{ kg/h}}}$$

- II. Segunda relação diz que a corrente de base da 2ª coluna foi projetada para recuperar 92,6% de xileno da corrente de alimentação da 1ª coluna: acha-se, portanto, a vazão mássica da corrente 5 (\dot{m}_5). O balanço para o xileno, na base da 2ª coluna, considerando a sua recuperação será:

$$(0,926) \cdot (0,15) \cdot (100 \text{ kg/h}) = (0,776) \cdot \dot{m}_5 \quad (7) \text{ assim,}$$

$$\dot{m}_5 = (0,926) \cdot (0,15) \cdot (100 \text{ kg/h}) / (0,776)$$

$$\underline{\underline{\dot{m}_5 = 17,9 \text{ kg/h}}}$$

4º passo: com as vazões \dot{m}_4 e \dot{m}_5 encontradas a partir das relações adicionais, usando o balanço global para o processo, eq. (2), a vazão mássica da corrente 2 é encontrada:

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_2 + \dot{m}_4 + \dot{m}_5 \quad (1)$$

$$\text{de eq. (2)} \Rightarrow \dot{m}_2 = 100 - \dot{m}_4 - \dot{m}_5 = 100 - 53,5 - 17,9$$

$$\underline{\underline{\dot{m}_2 = 28,6 \text{ kg/h}}}$$

5º passo: finalmente, as composições do benzeno desconhecidas nas correntes 4 e 5 podem ser encontradas, com a substituição das vazões \dot{m}_2 , \dot{m}_4 e \dot{m}_5 nos balanços do tolueno e do xileno, respectivamente:

- **Balanço do tolueno:**

$$\text{Da eq. (4): } 0,55 \cdot 100 \text{ kg/h} = 0,0454 \cdot \dot{m}_2 + 0,946 \cdot \dot{m}_4 + (1 - 0,776 - x_{B,5}) \cdot \dot{m}_5$$

$$0,55.100 \text{ kg/h} = 0,0454.(28,6) + 0,946.(53,5) + (1 - 0,776 - x_{B,5}).(17,9) \quad (8)$$

$$55 \text{ kg/h} = 1,29844 + 50,611 + (0,224 - x_{B,5}).(17,9) \quad (9)$$

$$55 \text{ kg/h} = 51,90944 + 4,0096 - 17,9(x_{B,5}) \quad (10)$$

$$55 \text{ kg/h} = 55,91904 - 17,9(x_{B,5}) \quad (11) \Rightarrow$$

$$x_{B,5} = \frac{55 - 55,91904}{-17,9}$$

$$\underline{\underline{x_{B,5} = 0,051}}$$

- **Balço do xileno:**

Substituindo as vazões \dot{m}_2 , \dot{m}_4 e \dot{m}_5 na eq. (5), encontra-se $x_{B,4}$:

Da eq. (5): balanço do xileno,

$$0,15.100 \text{ kg/h} = 0,0106.\dot{m}_2 + (1 - 0,946 - x_{B,4}).\dot{m}_4 + (0,776).\dot{m}_5$$

$$0,15.100 \text{ kg/h} = 0,0106.(28,6) + (1 - 0,946 - x_{B,4}).(53,5) + (0,776).(17,9) \Rightarrow$$

$$x_{B,4} = \frac{15 - 0,30316 + 2,889 - 13,8904}{53,5}$$

$$\underline{\underline{x_{B,4} = 0,04}}$$

Correntes especiais de processos

Reciclo, by-pass (desvio) e purga são chamadas correntes especiais de processo e são utilizadas visando aumentar a eficiência dos processos industriais. Vamos conhecê-las individualmente.



Assimile

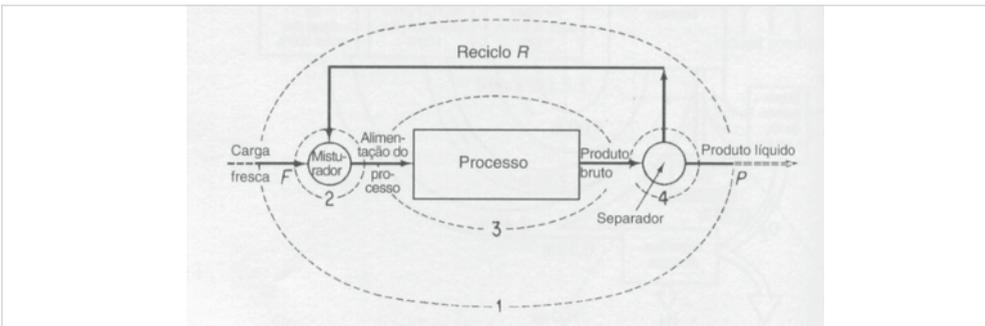
Problemas envolvendo reciclo e purga de corrente são frequentemente encontrados na indústria química e do petróleo. As correntes de reciclo são usadas para enriquecer um produto, para aumentar rendimentos, para conservar energia ou para reduzir custos operacionais.

Reciclo

Uma corrente de reciclo tem a finalidade de retornar um material que não foi utilizado no processo ou que pode ser reutilizado ao início da unidade que o processou. Muitos processos que não envolvem reações químicas utilizam correntes de reciclo, por exemplo, operações de secagem, recirculando o ar úmido que deixa-os secados para controlar a umidade do ar. Neste caso não ocorre acréscimo ou perda de material dentro do processo ou na corrente de reciclo.

Um fluxograma rotulado de um processo químico que pode ou não envolver reação, separação dos produtos e reciclo é representado pela Figura 2.12. Note a distinção entre a alimentação virgem (carga fresca) e a alimentação ao processo, que é a soma da alimentação virgem e da corrente de reciclo no misturador. Se algumas das variáveis das correntes na figura fossem desconhecidas, você poderia determiná-las, escrevendo balanços no processo global e no processo no separador e no ponto de mistura.

Figura 2.12 | Fluxograma de um processo com reciclo



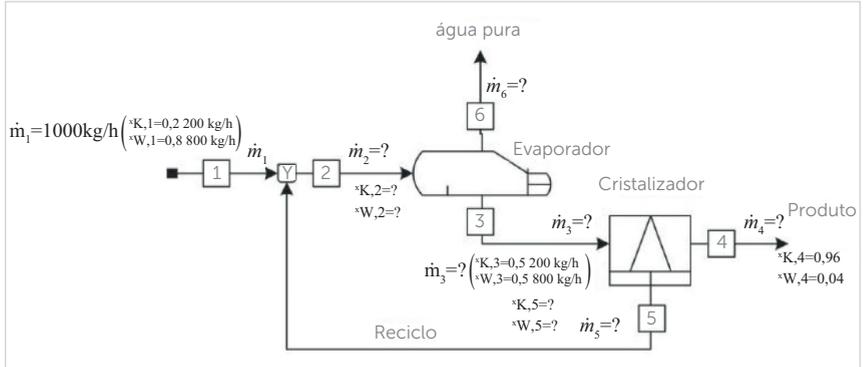
Fonte: adaptada de Himmelblau e Riggs (2014, p. 264).



Exemplificando

Uma corrente de alimentação flui a uma vazão de 1.000 kg/h, contendo 20% de KNO_3 (K) e 80% de água (W). Esta corrente entra no evaporador, em que parte da água é evaporada no topo e a corrente de saída no fundo, sai com 50% de KNO_3 . A corrente principal de saída do evaporador entra em um cristalizador, cuja corrente de base deste equipamento é composta por 4% de H_2O e o restante é de KNO_3 . A corrente de saída do cristalizador é recirculada e combinada com a corrente da alimentação principal. A corrente de reciclo é constituída por 0,6 kg de KNO_3 /kg de H_2O . O fluxograma do processo cristalização do KNO_3 é apresentado na Figura 2.13. Calcule a razão de reciclo por alimentação original.

Figura 2.13 | Fluxograma de um processo com reciclo



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015, p. 119).

Solução:

Vamos encontrar a razão de reciclo/corrente de alimentação

$$\left(\frac{\dot{m}_5}{\dot{m}_1} = ? \right)$$

- Análise dos graus de liberdade (Tabela 2.3).

Tabela 2.3 | Análise de graus de liberdade para um processo com reciclo

Sistema				
	Misturador	Evaporador	Cristalizador	Processo
Número de variáveis desconhecidas	3	4	3	2
Número de equações independentes	2	2	2	2
Número de relações	0	0	0	0
Número de graus de liberdade (ngl)	1	2	1	0

Fonte: elaborada pela autora.

- Especificações e cálculo das composições da corrente de reciclo. Geralmente é um dos primeiros passos em um sistema em que há reciclo envolvido:

Ao observar esta corrente, temos 3 incógnitas (\dot{m}_5 , $x_{K,5}$ e $x_{W,5}$)

mas uma informação importante foi fornecida nesta corrente:
0,6 kg de KNO_3 /kg de H_2O , assim

$$\left. \begin{array}{l} \text{para 1 kg 0,6 de H}_2\text{O} \rightarrow 0,6 \text{ kg de KNO}_3 \\ \text{em 1,6 kg totais de solução} \rightarrow x_{K,5}=? \end{array} \right\} \text{Logo,}$$

$$\underline{\underline{x_{K,5}=0,375}} \Rightarrow x_{W,5}=1-0,375=0,625$$

$$\underline{\underline{x_{W,5}=0,625}}$$

- Resultado da análise dos graus de liberdade

Pelos cálculos da análise dos graus de liberdade, conclui-se que o caminho mais fácil para se começar o balanço é escolhendo o sistema como sendo todo o processo, já que o número de graus de liberdade é zero.

- Balanços
- **Sistema: processo global**
 - Balanço global de massa

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_4 + \dot{m}_6 \quad (1)$$

$$1000 \text{ kg/h} = \dot{m}_4 + \dot{m}_6 \quad (2)$$

- Balanço parcial dos componentes

$$\left. \begin{array}{l} \text{KNO}_3 (\text{K}) \therefore x_{K,1} \cdot \dot{m}_1 = x_{K,4} \cdot \dot{m}_4 + x_{K,6} \cdot \dot{m}_6 \quad (1) \\ \text{KNO}_3 (\text{K}) \therefore (0,2) \cdot (1000 \text{ kg/h}) = (0,96) \cdot \dot{m}_4 + (0) \cdot \dot{m}_6 \quad (2) \Rightarrow \underline{\underline{\dot{m}_4 = 208,33 \text{ kg/h}}} \\ \text{H}_2\text{O} (\text{W}) \therefore x_{W,1} \cdot \dot{m}_1 = x_{W,4} \cdot \dot{m}_4 + x_{W,6} \cdot \dot{m}_6 \quad (3) \\ \text{H}_2\text{O} (\text{W}) \therefore (0,8) \cdot (1000 \text{ kg/h}) = (0,04) \cdot (208,33) + (1) \cdot \dot{m}_6 \quad (4) \Rightarrow \underline{\underline{\dot{m}_6 = 791,66 \text{ kg/h}}} \end{array} \right\}$$

Verificação do balanço global: da eq. (2) \rightarrow

$$1000 \text{ kg/h} = \dot{m}_4 + \dot{m}_6$$

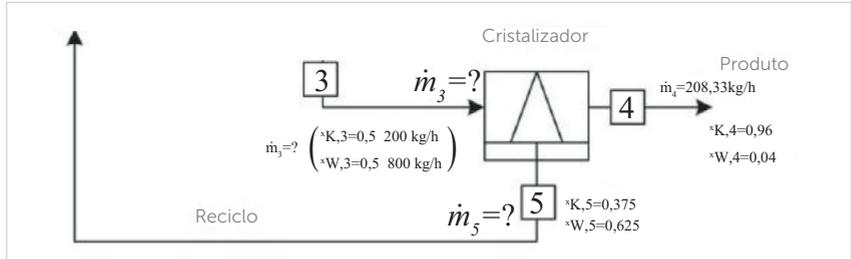
$$1000 \text{ kg/h} = (208,33) + (791,66) \Leftrightarrow 1000 \text{ kg/h} \approx \underline{\underline{1000 \text{ kg/h}}}$$

- **Sistema: cristalizador**

Podemos começar o próximo balanço no misturador ou no cristalizador, pois o número de graus de liberdade de ambos é igual a 1 (um). No entanto, para atingirmos o objetivo do problema, precisamos achar a vazão mássica da corrente (5), que se encontra no cristalizador. Sendo assim, vamos ao balanço no cristalizador

representado pela Figura 2.14.

Figura 2.14 | Balanço de massa no cristalizador



Fonte: elaborada pela autora.

- Balanço global de massa
 $\dot{m}_3 = \dot{m}_4 + \dot{m}_5$ (1)
- Balanço parcial dos componentes

$$\left. \begin{array}{l} \text{KNO}_3 \text{ (K)} \therefore x_{K,3} \cdot \dot{m}_3 = x_{K,4} \cdot \dot{m}_4 + x_{K,5} \cdot \dot{m}_5 \quad (2) \\ \text{H}_2\text{O (W)} \therefore x_{W,3} \cdot \dot{m}_3 = x_{W,4} \cdot \dot{m}_4 + x_{W,5} \cdot \dot{m}_5 \quad (3) \\ \text{da eq. de massa global para o cristalizador} \rightarrow (\dot{m}_5 = \dot{m}_3 - 208,33) \\ \text{e da eq. (2) KNO}_3 \text{ (K)} \therefore x_{K,3} \cdot \dot{m}_3 = x_{K,4} \cdot \dot{m}_4 + x_{K,5} \cdot \dot{m}_5 \\ (0,5) \cdot \dot{m}_3 = (0,96) \cdot (208,33) + (0,375) \cdot (\dot{m}_3 - 208,33) \\ \Rightarrow \underline{\dot{m}_3 = 974,99 \text{ kg/h}} \\ \text{logo, } \dot{m}_5 = \dot{m}_3 - 208,33 = (974,99 - 208,33) \text{ kg/h} = \underline{\underline{766,66 \text{ kg/h}}} \end{array} \right\}$$

$$\text{Portanto, } \frac{\dot{m}_5}{\dot{m}_1} = \frac{766,66 \text{ kg/h}}{1000 \text{ kg/h}} = 0,76666 \text{ ou } \underline{\underline{76,66 \%}}$$



Refleta

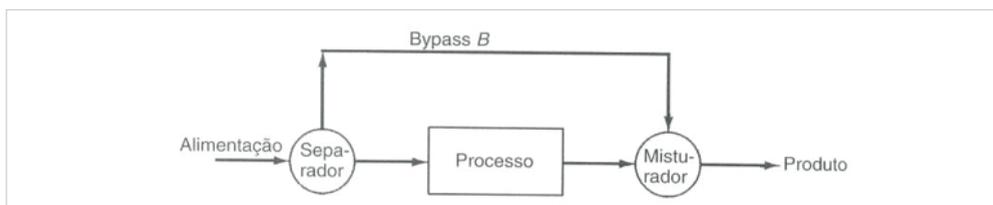
Uma corrente de reciclo é largamente aplicada em processos químicos, como para a recuperação de catalisadores; diluição de uma corrente de processo; controle de uma variável de processo; circulação de um fluido de trabalho. Como o reciclo é aplicado nesses exemplos? Reflita e discuta sobre essas aplicações.

Bypass (Desvio)

Uma corrente de Bypass tem origem em um ou mais estágios do processo e vai diretamente para outro estágio à jusante. Geralmente, a corrente de bypass é

definida como uma fração da alimentação que é desviada da unidade de processo e combinada com a saída deste processo, afetando a composição e as propriedades do produto. Processos envolvendo correntes de bypass são tratados da mesma forma que processos com correntes de reciclo. Um fluxograma rotulado de um processo químico envolvendo processo, separação dos produtos e reciclo aparece na Figura 2.15.

Figura 2.15 | Fluxograma de um processo com bypass



Fonte: adaptada de Himmelblau e Riggs (2014, p. 277).



Pesquise mais

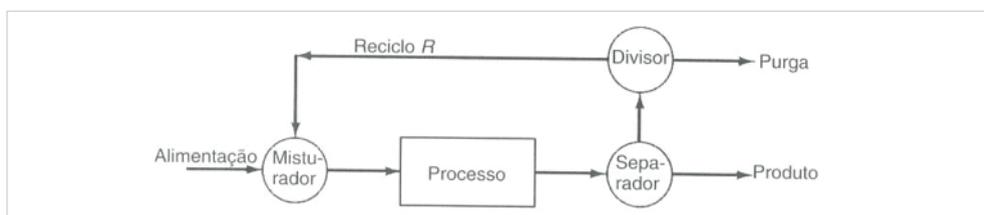
Acesse o vídeo e assista a resolução de um problema que inclui o cálculo do balanço de massa envolvendo uma corrente de bypass:

BYPASS sem reação química vídeo aula exercício 266. Disponível em: <<https://www.youtube.com/watch?v=jsLKI0urr0A>>. Acesso em: 23 out. 2016.

Purga

A purga é uma corrente descartada com o objetivo de remover um acúmulo de materiais inertes ou materiais indesejados que, caso contrário, se acumulariam na corrente de reciclo. Um fluxograma rotulado de um processo químico envolvendo processo, separação dos produtos, reciclo e purga aparece na Figura 2.16.

Figura 2.16 | Fluxograma de um processo com purga



Fonte: adaptada de Himmelblau e Riggs (2014, p. 278).

Sem medo de errar

Dando continuidade à análise referente aos cálculos de balanços de massa, você investigará o balanço de um processo de recuperação de um reagente químico (Figura 2.17). Esse processo ocorre em mais de uma unidade de processo, com reciclo, sem reação química e operando em estado estacionário, sendo que a recuperação deste produto (F) ocorre com a sua alimentação em uma centrífuga, que retira água (A) do reagente que, posteriormente, é centrifugado (C) e alimentado em um filtro rotativo, em que parte deste reagente é recirculado e unido à alimentação original, através da corrente de reciclo \mathcal{R} , e o produto final é o reagente recuperado (P).

Para isto, de acordo com as especificações que a indústria deseja para este reagente, devem-se realizar os cálculos das variáveis de saída do sistema de recuperação. Considere que 120 lbm por hora do reagente (F) que entra na centrífuga tendo uma composição em massa de 25% em F e 75% em A, que se junta através de um ponto de mistura com uma corrente de reciclo contendo uma relação mássica de 0,4 lbm de F por 1 lbm de A. A corrente concentrada que deixa a centrífuga contém composições molares de 70% em F e de 30% em A; esta corrente entra em um filtro rotativo e logo é filtrada. A torta de filtro consiste em cristais do reagente, com as mesmas composições molares da corrente do produto centrifugado.

Vamos calcular a vazão nas correntes C, D e R, sendo que a massa molecular do F é $M_{w,F} = 60 \text{ lbm/lbmol}$ e da água, $M_{w,A} = 18 \text{ lbm/lbmol}$.



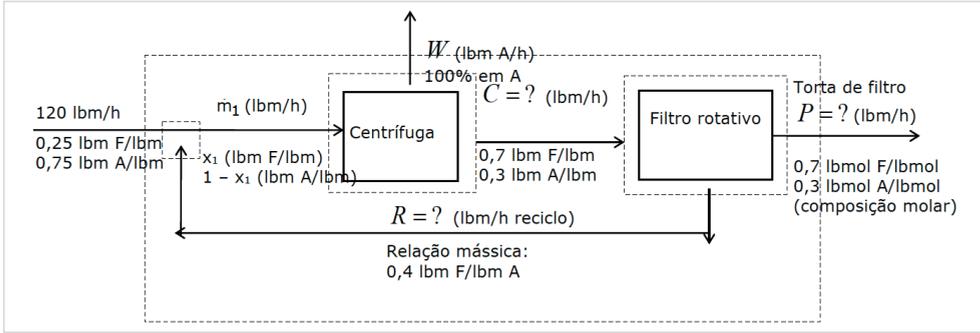
Atenção

Não comece a escrever e resolver equações para um sistema antes de verificar se ele possui zero de graus de liberdade.

Solução:

Base: 120 lbm/h de alimentação virgem.

Figura 2.17 | Fluxograma do processo de recuperação de um reagente químico



Fonte: elaborada pela autora.

Em termos das variáveis rotuladas, as quantidades pedidas pelo enunciado do problema são lbm/h fornecidos à centrífuga, lbm de água evaporada por hora, lbm/h fornecidos ao filtro, lbm de resíduo por lbm de alimentação virgem e lbm de fármaco cristalino por hora.

A análise de graus de liberdade pode ser realizada conforme a Tabela 2.4.

Tabela 2.4 | Análise de graus de liberdade para um processo de recuperação

Sistema				
	Misturador	Centrífuga	Filtro rotativo	Processo global
Número de variáveis desconhecidas	3	4	3	2
Número de equações independentes	2	2	2	2
Número de relações	0	0	0	0
Número de graus de liberdade (ngl)	1	2	1	0

Fonte: elaborada pela autora.

Portanto, podemos determinar W, C, P e R , fazendo balanços no sistema global, analisando depois o filtro para determinar P e depois a centrífuga ou o ponto de mistura para \dot{m}_1 e x_1 . Os cálculos aparecem a seguir.

Preparação das correntes P e da corrente de resíduo R:

$$\bar{M}_{W,P} = y_{F,P} \cdot M_{w,F} + y_{A,P} \cdot M_{w,A} = 0,7 \cdot 60 + 0,3 \cdot 18$$

$$\bar{M}_{W,P} = 47,4 \text{ lbm/lbmol}$$

$$x_{F,P} = y_{F,P} \cdot \left(M_{w,F} / \bar{M}_{W,P} \right) = 0,7 \cdot (60/47,4) = 0,886$$

$$x_{F,P} = 0,886$$

$$x_{A,P} = 1 - x_{F,P} = 1 - 0,886 = 0,114$$

$$x_{A,P} = 0,114$$

Composições da corrente de reciclo R:

$$0,4 \text{ lbm F/lbm A} = x_{F,R} / x_{A,R} \text{ ou } x_{F,R} = 0,4 \cdot x_{A,R}$$

$$\text{como } x_{F,R} + x_{A,R} = 1 \Rightarrow x_{A,R} = 1 - x_{F,R}$$

$$x_{A,R} = 0,714 \text{ e } x_{F,R} = 0,286$$

Sistema global:

$$F = P + W = 120 \text{ lbm/h} \quad (1)$$

$$\text{Balanço de F: } (0,25) \cdot (120) = x_{F,P} \cdot P + W(x_{F,W}) \Rightarrow P = 33,86 \text{ lbm/h}$$

$$30 = 0,886 \cdot P + W \cdot (0)$$

$$\text{Balanço de massa total: } 120 = P + W \Rightarrow W = 120 - 33,86 = 86,14 \Rightarrow$$

$$W = 86,14 \text{ lbm água evaporada/h}$$

Filtro rotativo:

$$\text{Balanço de massa total: } C = P + R \Rightarrow C = 33,86 + R \quad (2)$$

Balanço de fármaco:

$$X_{F,C} \cdot C = x_{F,P} \cdot P + x_{F,R} \cdot R \Rightarrow$$

$$(0,7) \cdot C = (0,886) \cdot (33,86) + (0,286) \cdot R$$

$$0,7 \cdot C = 30 + 0,286 \cdot R \quad (3)$$

As equações (2) e (3) formam um sistema de 2 equações e de 2 incógnitas:

$$\Rightarrow R = 15,22 \text{ lbm/h e } C = 49,08 \text{ lbm/h}$$

Para checar o cálculo, fazemos o balanço para a água no filtro:

$$x_{A,P} \cdot P + x_{A,R} \cdot R = X_{A,C} \cdot C \Rightarrow$$

$$0,114 \cdot 33,86 + 0,714 \cdot 15,22 = 0,349,08 \Rightarrow 14,72 = 14,72 \quad \checkmark$$

Com a realização desses cálculos, podemos encontrar as vazões das correntes C, P e R e, checando os cálculos do balanço de massa, podemos concluir que o processo está operando corretamente.

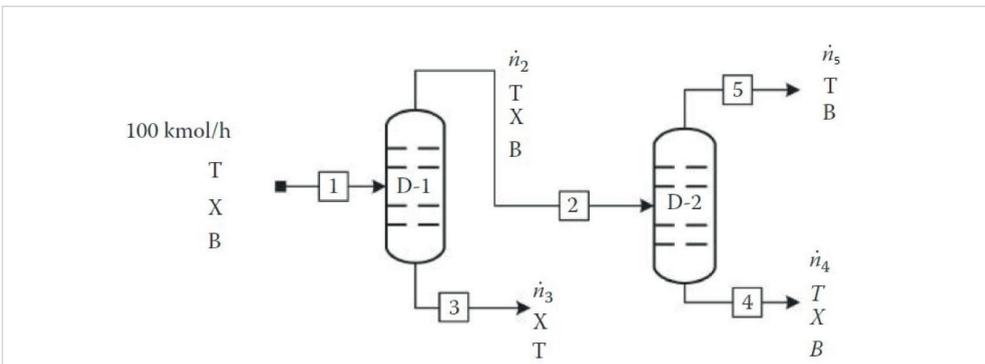
Avançando na prática

Recuperação de tolueno em uma unidade industrial de benzeno

Descrição da situação-problema

Uma corrente de alimentação de uma coluna de destilação contém uma mistura líquida composta por 35% molar de tolueno (T), 25% molar de xileno (X) e o restante é de benzeno (B). A alimentação original é caracterizada por uma vazão molar de alimentação de 100 kmol/h. O produto da corrente de fundo da 1ª coluna tem 97% molar de xileno (X), 0% de B, e 93% da alimentação de X é recuperado nesta corrente. O produto de topo da 1ª coluna é alimentado na 2ª coluna. Assim, o produto de topo desta 2ª coluna contém 5,0% molar de T, com 0% de X, e ela é projetada para recuperar 96% do benzeno alimentado na 1ª coluna. Qual procedimento deve ser adotado para que todas as vazões do processo possam ser calculadas? Como o percentual de recuperação do tolueno pode ser calculado?

Figura 2.18 | Processo de destilação



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015, p. 111).

Resolução da situação-problema

Primeiramente, vamos estabelecer e analisar os graus de liberdade do processo, conforme a Tabela 2.5.

Tabela 2.5 | Análise de graus de liberdade para um processo de destilação

	Sistema		
	D-1	D-2	Processo
Número de Variáveis desconhecidas	4	7	5
Número de Equações independentes	3	3	3
Número de relações	-	-	2
Número de Graus de Liberdade (ngl)	1	4	0

Fonte: elaborada pela autora.

O processo global sendo considerado como o “sistema” é o que oferece um valor dos graus de liberdade zero logo, é por ele que se deve começar a escrever os balanços. Então, o sistema escolhido para iniciar os cálculos é o processo global, e à medida que se estabelece uma base de cálculo para escrever os balanços, o número de graus de liberdade do sistema se torna zero.

Lembrando que se deve escrever:

1. **balanço global de massa** e
2. **balanços de massa parciais** (para o componente benzeno e para o tolueno).

A partir da nomenclatura escolhida para as correntes, da sua rotulagem e da região delimitada pela superfície de controle estabelecidas na Figura 2.18, e admitindo uma **base de cálculo** de $\dot{n}_1 = 100 \text{ kmol/h}$ da alimentação, escreve-se o balanço global de massa a seguir:

Sistema: processo global

- **Balanço global de massa:**

$$\dot{n}_1 = \dot{n}_3 + \dot{n}_4 + \dot{n}_5 \quad (1)$$

$$100 = \dot{n}_3 + \dot{n}_4 + \dot{n}_5 \quad (2)$$

- **Balanço de massa para o benzeno:**

$$0,93 \cdot 0,25 \cdot 100 \text{ kg/h} = 0,97 \cdot \dot{n}_3 \Rightarrow$$

$$\underline{\underline{\dot{n}_3 = 23,97 \text{ kmol/h}}}$$

- **Balanço de massa para o tolueno:**

$$0,96 \cdot 0,4 \cdot 100 \text{ kg/h} = 0,95 \cdot \dot{n}_5 \quad (4)$$

$$\underline{\underline{\dot{n}_5 = 40,42 \text{ kmol/h}}}$$

A Tabela 2.6 apresenta as vazões e frações molares pertinentes ao processo de destilação em questão, bem como e de recuperação do tolueno.

Tabela 2.6 | Resultados obtidos através do balanço de massa do processo de destilação

Coluna D-1	Coluna D-2
<p>Balanço global de massa:</p> $100 = \dot{n}_2 + \dot{n}_3$ $\dot{n}_2 = 100 - \dot{n}_3$ $\underline{\underline{\dot{n}_2 = 76,03 \text{ kmol/h}}}$	<p>Balanço global de massa:</p> $\dot{n}_2 = \dot{n}_4 + \dot{n}_5$
<p>Balanço de massa para o tolueno:</p> $x_{T,1} \cdot 100 \text{ kg/h} = x_{T,2} \cdot \dot{n}_2 + x_{T,3} \cdot \dot{n}_3$ $(0,35) \cdot 100 \text{ kg/h} = x_{T,2} \cdot (76,03) + (0,03) \cdot (23,97)$ $\underline{\underline{x_{T,2} = 0,4508}}$	<p>Balanço de massa para o tolueno:</p> $x_{T,2} \cdot (\dot{n}_2) = x_{T,4} \cdot \dot{n}_4 + x_{T,5} \cdot \dot{n}_5$ $(0,4508) \cdot (76,03) \text{ kg/h} = x_{T,4} \cdot (35,61) + (0,05) \cdot (40,42)$ $\underline{\underline{x_{T,4} = 0,9057}}$
<p>Balanço de massa para o xileno:</p> $0,25 \cdot 100 \text{ kg/h} = x_{x,2} \cdot (\dot{n}_2) + x_{x,3} \cdot (\dot{n}_3)$ $0,25 \cdot 100 \text{ kg/h} = x_{x,2} \cdot (76,03) + (0,97) \cdot (23,97)$ $\underline{\underline{x_{x,2} = 0,023}}$	<p>Balanço de massa para o xileno:</p> $(x_{x,2}) \cdot (\dot{n}_2) = x_{x,4} \cdot (\dot{n}_4) + x_{x,5} \cdot (\dot{n}_5)$ $(0,023) \cdot (76,03) \text{ kg/h} = x_{x,4} \cdot (35,61) + (0,0) \cdot (40,42)$ $\underline{\underline{x_{x,4} = 0,0491}}$
<p>Balanço de massa para o benzeno:</p> $x_{B,2} = 1 - x_{T,2} - x_{x,2} \Rightarrow$ $\underline{\underline{x_{B,2} = 0,5262}}$ $x_{B,1} \cdot 100 = x_{B,2} \cdot (76,03) + (0) \cdot (23,97) \Rightarrow$ $(0,4) \cdot 100 = x_{B,2} \cdot (76,03) + (0) \cdot (23,97) \Rightarrow$ $\underline{\underline{x_{B,2} = 0,5261}}$	<p>Balanço de massa para o benzeno:</p> $x_{B,2} \cdot (\dot{n}_2) = x_{B,4} \cdot (\dot{n}_4) + (x_{B,5}) \cdot (\dot{n}_5) \Rightarrow$ $(0,5261) \cdot (76,03) = x_{B,4} \cdot (35,61) + (0,95) \cdot (40,42) \Rightarrow$ $\underline{\underline{x_{B,4} = 0,045}}$
	<p>Balanço para o tolueno na unidade D-2, corrente 4, o percentual de recuperação do tolueno será:</p> $(\% \text{ tolueno}) \cdot (0,35) \cdot 100 \text{ kg/h} = (35,61) \cdot (0,9057) \text{ assim,}$ $\underline{\underline{(\% \text{ tolueno}) = 0,9215}}$

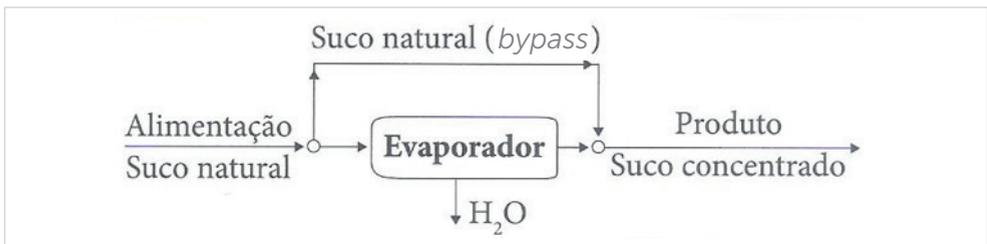
Fonte: elaborada pela autora.

Faça valer a pena

1. Processos de separações têm sido usados comercialmente na indústria de alimentos e de produtos farmacêuticos. Na indústria de alimentos são utilizados processos que aumentam a vida útil dos produtos. O suco natural de laranja contém 13,5% m/m de sólidos e o restante de água. Já o suco concentrado de laranja comercial contém 45% m/m de sólidos. No início da produção industrial, o suco concentrado de laranja era produzido por evaporação simples. No entanto, os constituintes voláteis do suco escapavam com a água, deixando o concentrado insípido. Os processos modernos resolveram esse problema, desviando (bypass) do evaporador uma parte da alimentação de suco natural.

Seja o processo industrial, em que o suco que entra no evaporador é concentrado a 61% em sólidos e esse produto é misturado com a corrente de suco natural que foi desviada, resultando em um suco com a concentração desejada de sólidos, conforme mostra o esquema da figura a seguir.

Figura 2.19 | Fluxograma de concentração de suco



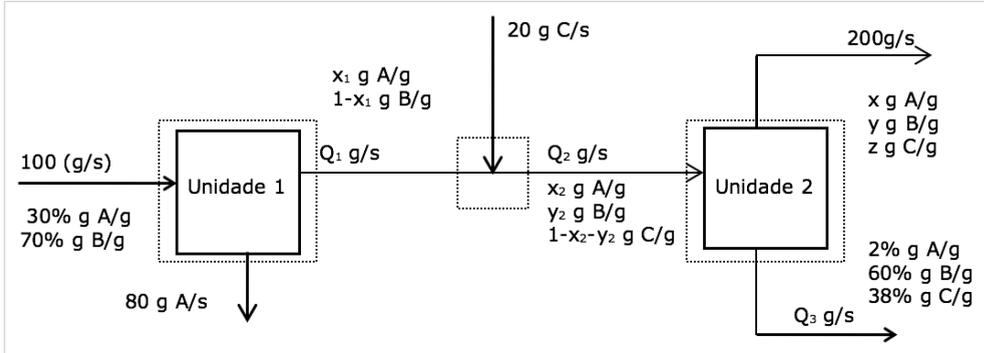
Fonte: Badino Júnior e Cruz (2010, p. 113).

Assinale a alternativa que apresenta o número de graus de liberdade correto:

- a) 0
- b) 1
- c) 2
- d) 3
- e) 4

2. Na figura a seguir aparece um fluxograma rotulado para um processo em estado estacionário de duas unidades de processo, no qual são mostrados os limites para delimitar subsistemas, em torno dos quais podem ser feitos os balanços.

Figura 2.20 | Fluxograma rotulado para um processo em estado estacionário de duas unidades de processo



Fonte: adaptada de Felder e Rousseau (2011, p. 146).

Estabeleça o número máximo de balanços que podem ser escritos para cada subsistema, a fim de determinar as variáveis desconhecidas do processo. Com base no fluxograma exposto, acima, analise as afirmações a seguir, no que se refere ao número máximo de balanços que podem ser escritos para cada subsistema:

- I) No subsistema 1 (unidade 1), o número máximo de balanços é 2 (1 balanço global e 1 por componente (A ou B)); no subsistema 2 (unidade 2), o número máximo de balanços é 3 (1 balanço global e 2 por componente (A e B)); no subsistema 3 (ponto de mistura), o número máximo de balanços é 3 (1 balanço global e 2 por componente (A e B)).
- II) No subsistema 1 (unidade 1), o número máximo de balanços é 3 (1 balanço global e 2 por componente (A, B)); no subsistema 2 (unidade 2), o número máximo de balanços é 4 (1 balanço global e 3 por componente (A e B C)); no subsistema 3 (ponto de mistura), o número máximo de balanços é 4 (1 balanço global e 3 por componente (A, B e C)).
- III) No subsistema 1 (unidade 1), o número máximo de balanços é 2 (1 balanço global e 1 por componente (A)); no subsistema 2 (unidade 2), o número máximo de balanços é 2 (1 balanço global e 2 por componente (A e B)); no subsistema 3 (ponto de mistura), o número máximo de balanços é 3 (1 balanço global e 2 por componente (A, B)).

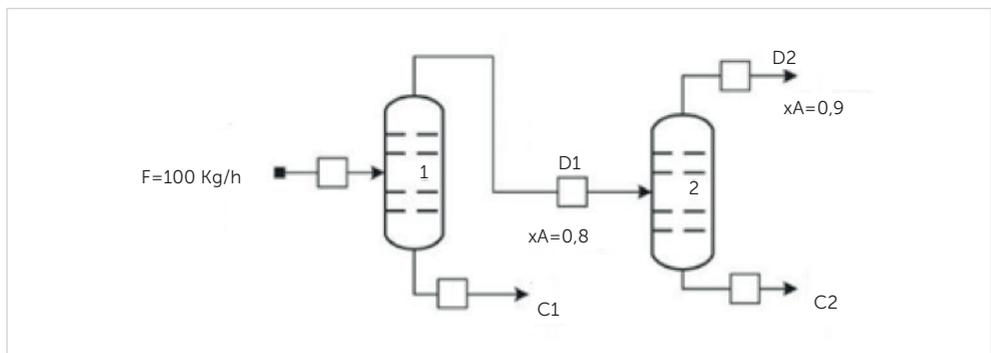
É correto o que se afirma em:

- a) III, apenas.
- b) II, apenas.
- c) I, II e III.
- d) I e II, apenas.
- e) I, apenas.

3. Sistemas de múltiplas unidades são muito comuns em processos industriais, envolvendo principalmente processos de separação e de purificação de produtos não só na indústria química, mas na alimentícia e na de fármacos. A etapa de purificação vem se tornando cada vez mais importante nestes processos, em que a qualidade do produto final pode variar conforme se estabelece o mercado consumidor.

Sejam as colunas de destilação em série apresentadas na figura a seguir, através do seu fluxograma, em que provavelmente a última coluna desempenha o papel de coluna purificadora do produto final. Dado o valor da vazão da corrente $C_1 = 20 \text{ kg/h}$, na coluna I, determine a vazão da corrente D2 da coluna de destilação II, sabendo-se que há perda parcial de 1% do componente A no produto de fundo C2, conforme é apresentado o fluxograma do processo a seguir:

Figura 2.21 | Fluxograma de colunas de destilação



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015, p. 111).

A alternativa que apresenta o valor de D2 correto é:

- a) 71 kg/h
- b) 8 kg/h
- c) 80 kg/h

d) 20 kg/h

e) 90 kg/h

Seção 2.3

Exemplos sobre a aplicação dos balanços de massa sem reação química

Diálogo aberto

Nesta segunda unidade de Princípios de Processos Químicos aprendemos a realizar balanços de massa em uma única operação unitária sem reações químicas e em estado estacionário, bem como em múltiplas unidades. Vimos também como calcular as correntes especiais (reciclo, bypass e purga), desenvolvendo fundamentos necessários para que o engenheiro químico seja capaz de formular e resolver balanços de massa em sistemas de processos químicos.

Nesta seção, você é convidado a ampliar o conceito de graus de liberdade para múltiplas unidades, executando os procedimentos estudados e aprendidos na seção anterior, aplicando os balanços de massa para múltiplas unidade de processo. Os métodos usados para organizar a informação conhecida sobre as variáveis de processo e o estabelecimento as equações de balanço de massa, com a busca por solução das variáveis desconhecidas, continuam sendo válidos nesta seção. O objetivo agora é continuar utilizando o utilitário Excel, do pacote da Microsoft Office, e apresentar o Solver, que é uma ferramenta bastante útil na resolução dos balanços de massa. Para isso, será necessário rever conceitos vistos nas seções anteriores desta unidade, como a fundamentação do balanço de massa e os conhecimentos de alguns equipamentos de separação/purificação dos processos químicos. O uso do Solver permite uma rápida construção e solução do problema de balanço de massa envolvido no processo em questão. Ele permite simular e resolver facilmente sistemas de equações lineares.

Como a operação da planta deve satisfazer várias exigências impostas pelo projeto, pelas condições técnicas, econômicas e sociais na influência de perturbações externas, se torna necessário fazer a análise e os cálculos do processo, obedecendo sempre os objetivos de produção daquela operação. Dentre esses processos está o balanço de massa em um sistema de recuperação de uma mistura ácida utilizada em um processo de nitrção.

Como analista de processos de uma grande indústria química, você está revisando dados referentes aos cálculos de balanços de massa a pedido do seu gestor, que acredita que alguns processos não estão sendo produzidos corretamente. Ainda há um processo que precisa ser revisado. Trata-se de um processo de regeneração, que ocorre em um tanque agitado, que tem como objetivo recuperar uma mistura ácida (MA1), remanescente de um processo de nitratação. Essa mistura é composta por 23% de HNO_3 , 57% de H_2SO_4 e 20% de H_2O em massa. Após a regeneração a nova mistura ácida (MA2) deve apresentar as seguintes concentrações: 27% de HNO_3 e 60% de H_2SO_4 . A regeneração é realizada adicionando-se à MA1 H_2SO_4 concentrado (93% de H_2SO_4) e HNO_3 concentrado (90% de HNO_3). O processo precisa ser alimentado com 1.000 kg de MA2. A partir dessa informação, como você iniciará os cálculos de balanço de massa? Como calcular a massa de ácidos concentrados necessários para esse processo? A quantidade de ácidos que vem sendo utilizada está correta?

Como entrega desta unidade, é possível aplicar na prática os conceitos de balanços de massa em processos em regime estacionário sem reações químicas e a sua resolução com o uso do utilitário Solver, para resolver os sistemas de equações lineares formados por estes balanços e, com isto, os balanços são previamente identificados, analisados e resolvidos. A cada passo que é dado nesta unidade, surge a oportunidade de análise de uma planta química, com o conjunto de unidades processadoras, sejam elas colunas de destilação, absorvedores, evaporadores, tanques de mistura, entre outros estudados, interligados ou não.

Espera-se que você tenha uma boa aprendizagem e seja capaz de utilizar e ampliar para os casos de estudos o uso do recuso do Solver.

Não pode faltar

Simulação de processos químicos assistida por computador (Excel)

O Solver é uma ferramenta extremamente robusta que acompanha o software Microsoft Excel, utilizada para estimar raízes, máximos e mínimos de qualquer função, com qualquer número de variáveis. Para solução de problemas não lineares de otimização, o Solver utiliza um algoritmo denominado de Gradiente Reduzido Generalizado. Para ativar o Solver, podemos acompanhar os passos descritos no guia de início rápido fornecido pela Microsoft para ativar e usar um suplemento no Excel 2016 para Windows (Disponível em: <<https://support.office.com/pt-br/article/Guia-de-in%C3%ADcio-r%C3%A1pido-ativar-e-usar-um-suplemento-no-Excel-2016-para-Windows-3da7ea04-888a-4b32-b064-87de0061f123>>. Acesso em: 25 out. 2016.).



Assimile

A aplicação direta do Solver é concisa, simples e eficaz para a resolução envolvendo os conceitos de balanço de massa, entre outros.

Quando o Solver é ativado, uma caixa de diálogo aparece, conforme Figura 2.22. Nessa caixa deverão ser informadas a função objetivo, as variáveis de decisão e as restrições. Primeiramente, pode-se observar um campo chamado “Definir Objetivo”, que representará o valor da função objetivo, e para inseri-la basta clicar sobre o ícone que está do lado direito do campo, que o levará à planilha de dados. Nesse ponto devemos clicar sobre a célula que representa a função objetivo e pressionar a tecla enter para voltar à janela do Solver.

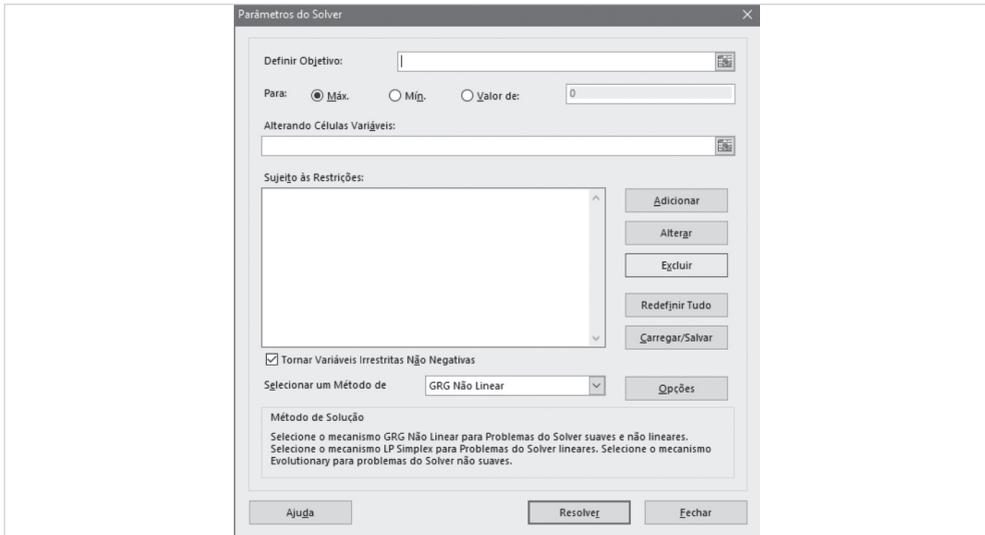
No campo seguinte são apresentadas as opções de maximizar, minimizar e a opção “Valor de”. Devemos escolher uma dessas opções dependendo do problema a ser resolvido. A opção “Valor de” pode ser utilizada quando se deseja que a função objetivo atinja um determinado valor. Em seguida, vemos um campo chamado “Alterando Células Variáveis” e nele serão inseridas as células que representarão as variáveis de decisão. Como próximo e último campo, temos “Sujeito a Restrições”, no qual devemos inserir quantas restrições forem necessárias para a resolução do problema.



Refleta

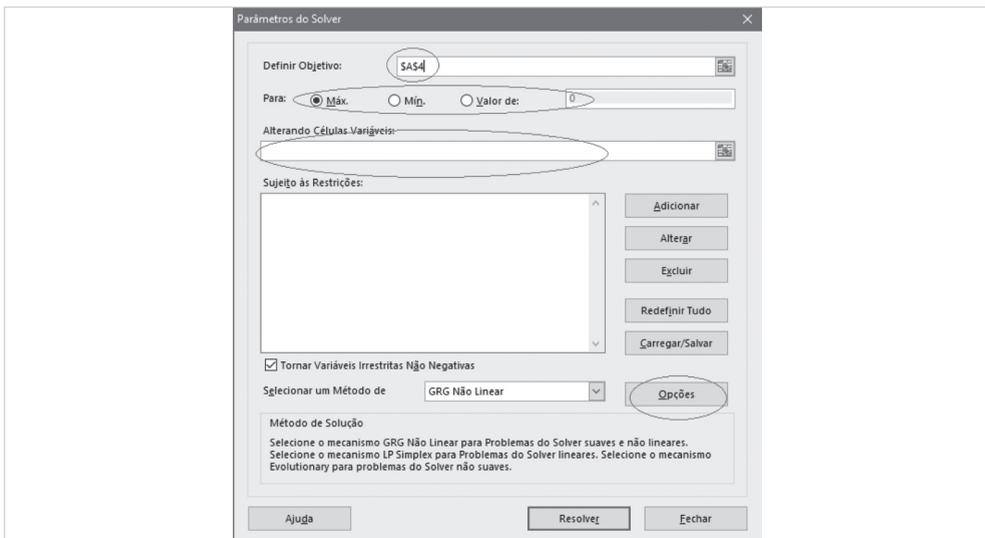
Memórias de cálculos diversas (balanços de massa, com reciclo, bypass e purga) passam a ser muito importantes no trabalho, bem como a elaboração cuidadosa dos fluxogramas de processos e a rotulagem das suas correntes, que é a representação gráfica de um processo. Como as planilhas eletrônicas e os simuladores de processos podem ser utilizados para a concepção, o desenvolvimento e a análise de processos químicos? Reflita e encontre as suas respostas para esse questionamento.

Figura 2.22 | Diálogo inicial do Solver



Fonte: elaborada pela autora.

Figura 2.23 | Diálogo inicial do Solver



Fonte: elaborada pela autora.

Acionando o botão Opções, mostrado na Figura 2.23, podemos determinar o tempo máximo para a resolução do problema, inserindo, na ferramenta em questão, o número de interações, a precisão do resultado, a tolerância, a convergência, entre outros fatores. O software apresenta uma numeração padrão para essas opções, que podemos alterar caso seja necessário ou prudente. Ao

concluir a análise dessas opções, podemos finalizar essa operação clicando no botão ok, como mostra a Figura 2.24, e posteriormente clicar no botão "Resolver", apresentado pela Figura 2.23.



Pesquise mais

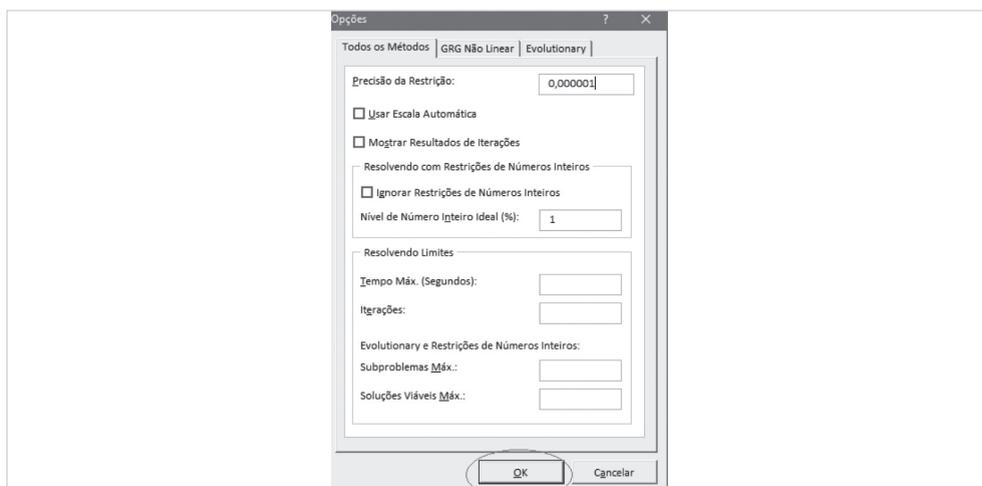
Sobre balanços de massa, consulte o livro:

HIMMELBLAU, David M.; RIGGS, James B. **Engenharia química: princípios e cálculos**. 8.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014. Disponível em: <<https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/978-85-216-2711-1/cfi/6/2>>. Acesso em: 23 out. 2016.

Também acesse o livro:

TERRON, Luiz Roberto. **Operações unitárias para químicos, farmacêuticos e engenheiros: fundamentos e operações unitárias do escoamento de fluidos**. Rio de Janeiro: LTC, 2012. Disponível em: <<https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/978-85-216-2174-4/cfi/3/4/4@0.00:65.8>>. Acesso em: 23 out. 2016.

Figura 2.24 | Opções do Solver



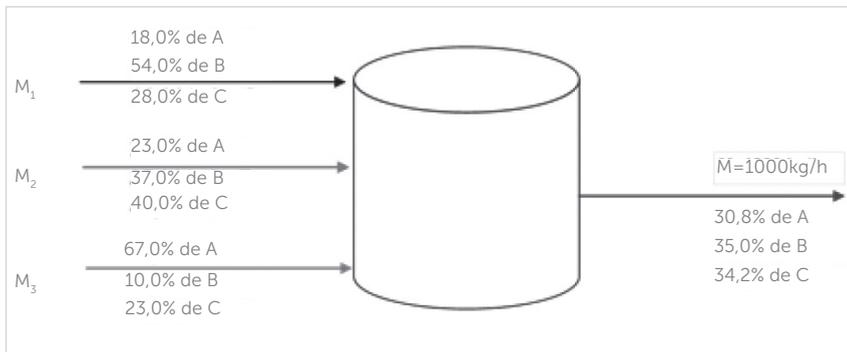
Fonte: elaborada pela autora.



Exemplificando

Um determinado processo químico é alimentado por três correntes produzindo 1.000 kg/h de uma mistura contendo 30,8% da substância A; 35% da substância B e 34,2% de C. As correntes M1, M2 e M3 têm composições mostradas na Figura 2.25. Quais são as vazões totais em massa dessas correntes?

Figura 2.25 | Processo químico realizado em um tanque com agitação



Fonte: elaborada pela autora.

Resolução do problema

Para realizar os balanços de massa por componente, vamos utilizar a seguinte equação: $x_1 \cdot M_1 + x_2 \cdot M_2 + x_3 \cdot M_3 - x \cdot M = 0$. Aplicando-a para cada componente, teremos o seguinte sistema de equações:

$$A \rightarrow 0,18M_1 + 0,23M_2 + 0,67M_3 - 308 = 0$$

$$B \rightarrow 0,54M_1 + 0,37M_2 + 0,10M_3 - 350 = 0$$

$$C \rightarrow 0,28M_1 + 0,40M_2 + 0,23M_3 - 342 = 0$$

Passos para a construção da planilha:

- Construir uma planilha

Figura 2.26 | Aplicação direta do Solver

	A	B
	M1.	
	M2.	
	M3.	
	f1.	
	f2.	
	f3.	

Fonte: elaborada pela autora.

- Selecionar A1:B6 e pressionar CTRL+SHIFT+F3.
- Digitar a fórmula "=0,18*M1.+0,23*M2.+0,67*M3.-308" em B4.
- Digitar a fórmula "=0,54*M1.+0,37*M2.+0,1*M3.-350" em B5.
- Digitar a fórmula "= 0,28*M1.+0,4*M2.+0,23*M3.-342" em B6.
- Preencher a caixa de diálogo do Solver.

Figura 2.27 | Diálogo do Solver (sistema de equações lineares)

The image shows the Excel Solver dialog box with the following settings:

- Definir célula de destino:** f1.
- Igual a:** Máx Mín Valor de: 0
- Células-variáveis:** \$B\$1:\$B\$3
- Submeter às restrições:**
 - f2. = f1.
 - f3. = f1.

Fonte: elaborada pela autora.

- Preencher a caixa de diálogo do Solver.
- Clicar no botão resolver.
- Respostas: $M_1 = 200 \frac{kg}{h}$, $M_2 = 600 \frac{kg}{h}$ e $M_3 = 200 \frac{kg}{h}$

Figura 2.28 | Resposta do Solver

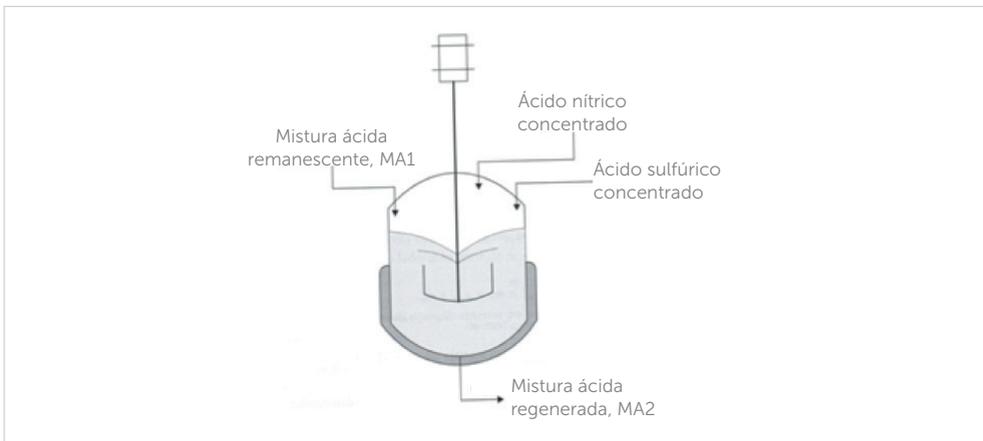
	A	B
M1.		200
M2.		600
M3.		200
f1.		0
f2.		0
f3.		0

Fonte: elaborada pela autora.

Sem medo de errar

Como analista de processos de uma grande indústria química, você analisará um processo de regeneração, que ocorre em um tanque agitado, que tem como objetivo recuperar uma mistura ácida (MA1), remanescente de um processo de nitração. Essa mistura é composta por 23% de HNO_3 , 57% de H_2SO_4 e 20% de H_2O em massa. Após a regeneração, a nova mistura ácida (MA2) deve apresentar as seguintes concentrações: 27% de HNO_3 e 60% de H_2SO_4 . A regeneração é realizada adicionando-se à MA1 H_2SO_4 concentrado (93% de H_2SO_4) e HNO_3 concentrado (90% de HNO_3). Sabendo que o processo precisa ser alimentado com 1.000 kg de MA2, como poderemos realizar o balanço de massa desse sistema de recuperação de uma mistura ácida proveniente de um processo de nitração? Dados os pesos atômicos: H=1; S=32, O=16, N=14, Cl = 35,5.

Figura 2.29 | Esquema do tanque agitado para regeneração de mistura ácida



Fonte: Terron (2012, p. 430).

Solução

Vamos, primeiramente, resumir as informações do enunciado para facilitar os cálculos devidos:

$$\left. \begin{array}{l} \text{ácida remanescente, (MA1)} \left(\begin{array}{l} 23\% \text{ em massa de HNO}_3 \\ 57\% \text{ em massa de H}_2\text{SO}_4 \\ 20\% \text{ em massa de H}_2\text{O} \end{array} \right) \\ \text{H}_2\text{SO}_4 \text{ concentrado (93\% em massa de H}_2\text{SO}_4) \\ \text{HNO}_3 \text{ concentrado (90\% em massa de HNO}_3) \\ \text{ácida regenerado (MA2)} \left(\begin{array}{l} 27\% \text{ em massa de HNO}_3 \\ 60\% \text{ em massa de H}_2\text{SO}_4 \end{array} \right) \end{array} \right\}$$

Considerando-se que:

- **MA1** seja a massa de ácido remanescente;
- **M₂** a massa de ácido sulfúrico concentrado; e
- **M₃**, a massa de ácido nítrico concentrado.

Têm-se três incógnitas, portanto serão necessárias **três equações** para que o problema seja resolvido.

Sabendo que o processo precisa produzir 1.000 kg de mistura ácida regenerada, a primeira equação é o **balanço global do sistema**:

$$MA1 + M_2 + M_3 = 1000 \text{ kg (1)}$$

A segunda equação é o **balanço de massa para o ácido sulfúrico**, que pode ser expresso por: $0,57MA1 + 0,93M_2 + 0M_3 = 600 \text{ kg (2)}$

Fazendo o mesmo para o **ácido nítrico**, obtém-se a terceira equação:

$$0,23MA1 + 0M_2 + 0,90M_3 = 270 \text{ kg (3)}$$

Para a resolução desse sistema de três equações,

$$\left\{ \begin{array}{l} MA1 + M_2 + M_3 = 1000 \text{ kg (1)} \\ 0,57MA1 + 0,93M_2 + 0M_3 = 600 \text{ kg (2)} \\ 0,23MA1 + 0M_2 + 0,90M_3 = 270 \text{ kg (3)} \end{array} \right\}$$

Resolvendo balanço de massa usando o Solver do Excel, siga os mesmos passos utilizados no problema apresentado no item Exemplificando para montar a planilha.

Figura 2.30 | Resposta do Solver

	A	B	C	D	E	F
1	RESOLUÇÃO USANDO SOLVER					
2						
3	M1.	M2.	M3.	f1.	f2.	f3.
4	416,894	389,646	193,46	0	-1E-06	0

Fonte: elaborada pela autora.

Através do balanço de massa do processo, pode-se observar que para produzir 1.000 kg da mistura ácida regenerada são necessárias as seguintes quantidades de mistura ácida remanescente, ácido sulfúrico concentrado e ácido nítrico concentrado, respectivamente: $M_1 = 416,89\text{kg}$, $M_2 = 389,65\text{kg}$ e $M_3 = 193,5\text{ kg}$, fazendo com que o processo opere corretamente.

Agora você poderá realizar todos os balanços de massa requeridos pelo seu gestor utilizando a ferramenta Solver, montar um relatório e entregar para ele, comprovando que os processos funcionarão corretamente mediante os cálculos de balanço realizados.

Avançando na prática

Projeto conceitual de um tanque de mistura de correntes para a determinação das vazões das correntes usando o Solver da planilha eletrônica Excel

Descrição da situação-problema

Como você foi convidado à realização de alguns cálculos em um sistema de estudo genérico, que poderá ser ampliado para qualquer outro sistema de mistura de correntes e de solutos variados que possam surgir na unidade de processamento da empresa na qual você exerce a função de analista de processos.

Seja um sistema de um reservatório que recebe três correntes de processo, apresentado na Figura 2.30, cada uma contendo três solutos caracterizados por A, B, e C. Todas as composições das correntes do processo são variáveis conhecidas, ou seja, as composições das correntes 1, 2, 3 e 4, conforme Tabela 2.7.

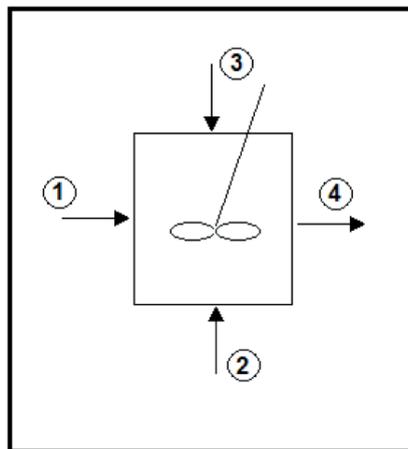
Tabela 2.7 | Composições das correntes do processo

Sistema	Composições (g/L)		
Soluto/correntes	A	B	C
1	20	40	50
2	60	30	20
3	90	25	85
4	50	25	40

Fonte: adaptada de Badino Júnior e Cruz (2010, p. 233).

A vazão da corrente 4 é $M_4 = 310 \frac{L}{h}$. A sua tarefa será determinar as vazões das correntes 1, 2 e 3.

Figura 2.31 | Representação de uma unidade de mistura



Fonte: adaptada de Badino Júnior e Cruz (2010, p. 234).

Resolução da situação-problema

O processo descrito trata-se de um processo contínuo sem reação química e regime permanente. Assim sendo, aplicaremos os conceitos de balanço de massa vistos nessa unidade para determinar as vazões das correntes.

Balanço de massa para o componente A:

$$\text{Saída}(A) = \text{Entrada}(A) + \text{Reage}(A) - \text{Acúmulo}(A)$$

$$\text{Reage}(A) = \text{Acúmulo}(A) = 0$$

Entrada (A) = Saída (A)

$$C_{A_1} \cdot M_1 + C_{A_2} \cdot M_2 + C_{A_3} \cdot M_3 = C_{A_4} \cdot M_4 \quad (1)$$

Balanço de massa para o componente B:

$$C_{B_1} \cdot M_1 + C_{B_2} \cdot M_2 + C_{B_3} \cdot M_3 = C_{B_4} \cdot M_4 \quad (2)$$

Balanço de massa para o componente C:

$$C_{C_1} \cdot M_1 + C_{C_2} \cdot M_2 + C_{C_3} \cdot M_3 = C_{C_4} \cdot M_4 \quad (3)$$

Balanço de massa global:

$$\rho_1 \cdot M_1 + \rho_2 \cdot M_2 + \rho_3 \cdot M_3 = \rho_4 \cdot M_4 \quad (4)$$

Considerando que: $\rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = \rho_4 = \rho$ (5)

$$M_1 + M_2 + M_3 = M_4 \quad (6)$$

As equações (1), (2), (3) formam um sistema de equações lineares com 3 equações e 3 incógnitas (M_1, M_2, M_3) a seguir:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{A_1} \cdot M_1 + C_{A_2} \cdot M_2 + C_{A_3} \cdot M_3 = C_{A_4} \cdot M_4 \quad (1) \\ C_{B_1} \cdot M_1 + C_{B_2} \cdot M_2 + C_{B_3} \cdot M_3 = C_{B_4} \cdot M_4 \quad (2) \\ C_{C_1} \cdot M_1 + C_{C_2} \cdot M_2 + C_{C_3} \cdot M_3 = C_{C_4} \cdot M_4 \quad (3) \end{array} \right.$$

Que, substituindo os valores das composições e da vazão M_4 pode ser rescrito da seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} 20M_1 + 60M_2 + 90M_3 = 15500 \quad (1) \\ 40M_1 + 30M_2 + 25M_3 = 7750 \quad (2) \\ 50M_1 + 20M_2 + 85M_3 = 12400 \quad (3) \end{array} \right.$$

Inserindo na planilha eletrônica o sistema de equações e fazendo os mesmos passos usados no item Sem medo de errar, utilizando a ferramenta Solver, tem-se o seguinte resultado:

Figura 2.32 | Resolução do problema através da ferramenta Solver

f1.	A	B	C	D	E	F
RESOLUÇÃO USANDO O SOLVER						
1						
2						
3	M1.	M2.	M3.	f1.	f2.	f3.
4	57,4834	109,834	86,2252	-1E-06	-1E-06	-1E-06
5						

Fonte: elaborada pela autora.

Faça valer a pena

1. Um determinado processo químico é alimentado por três correntes produzindo 1.000 kg/h de uma mistura contendo 30,8% da substância A; 35% da substância B e 34,2% de C. Quais são as vazões totais em massa dessas correntes? O seguinte sistema de equações é formado a partir do balanço de massa para o processo de mistura.

$$A \rightarrow 0,18M_1 + 0,23M_2 + 0,67M_3 - 308 = 0$$

$$B \rightarrow 0,54M_1 + 0,37M_2 + 0,10M_3 - 350 = 0$$

$$C \rightarrow 0,28M_1 + 0,40M_2 + 0,23M_3 - 342 = 0$$

Diálogo do Solver (sistema de equações lineares).

The screenshot shows the Excel Solver dialog box with the following settings:

- Definir célula de destino: f1.
- Igual a: Máx Mín Valor de: 0
- Células-variáveis: \$B\$1:\$B\$3
- Submeter às restrições:
 - f2. = f1.
 - f3. = f1.

Na resolução do balanço de massa para o tanque de mistura utilizando o Solver, utilitário do Excel que serve para resolver não só problemas de otimização, mas também de balanços, a partir da aplicação direta do Solver, que consiste em

resolver o sistema de equações proposto, o diálogo do Solver é apresentado para resolver o sistema, e na função f1 é dada a primeira equação do balanço de massa, através do comando atribuir a fórmula na célula B4, conforme é mostrado na figura. Diante do exposto, o que é possível dizer a respeito das células B5 e B6, para os cálculos de f2 e f3, respectivamente, é:

- I. A fórmula digitada em B4 para f1. é " $=0,18*M1.+0,23*M2.+0,67*M3.-308$ ".
- II. A fórmula digitada em B5 para f2. é " $=0,54*M1.+0,37*M2.+0,1*M3.-350$ ".
- III. A fórmula digitada em B6 para f3. é " $=0,28*M1.+0,4*M2.+0,23*M3.-342$ ".

A afirmativa correta é:

- a) I e II, somente.
- b) I, somente.
- c) III, somente.
- d) I, II e III.
- e) II, somente.

2. Seja o seguinte sistema de equação formado dos balanços de balanços de massa de um tanque de mistura, com as vazões das correntes 1, 2 e 3, sendo dadas por M1, M2 e M3.

$$\left\{ \begin{array}{l} 20M_1 + 60M_2 + 90M_3 = 15500 \quad (1) \\ 40M_1 + 30M_2 + 25M_3 = 7750 \quad (2) \\ 50M_1 + 20M_2 + 85M_3 = 12400 \quad (3) \end{array} \right.$$

A resposta com o uso do Solver para este sistema de equações é:

f1.	=20*M1.+60*M2.+90*M3.-15500					
	A	B	C	D	E	F
1	RESOLUÇÃO USANDO SOLVER					
2						
3	M1.	M2.	M3.	f1.	f2.	f3.
4	57,4834	109,834	86,2252	-1E-06	-1E-06	-1E-06
5						

Através dos balanços de massa de um tanque de mistura, as vazões das correntes 1, 2 e 3, designadas por **M1**, **M2** e **M3**, foram encontradas e mostradas no diálogo de resolução usando Solver. O que se pode afirmar a respeito das vazões e das

equações que compõem o sistema de equações lineares é::

- I. A fórmula da célula D4 é “=20*M1.+60*M2.+90*M3.-15500”.
- II. A fórmula da célula E4 é “=50*M1.+20*M2.+85*M3.-12400”.
- III. Os valores das vazões em 1, 2 e 3 são 57,48, 109,83 e 86,22, respectivamente.

É correto afirmar apenas o que está em:

- a) I, II e III.
- b) I, apenas.
- c) II, apenas.
- d) II e III, apenas.
- e) I e III, apenas.

3. Uma mistura ácida (M1), remanescente de um processo de nitratação, contém 23% de HNO_3 , 57% de H_2SO_4 e 20% de H_2O em massa. Essa mistura ácida terá que ser regenerada para ser reutilizada, e a regeneração é realizada em um tanque agitado. Após a regeneração, a nova mistura ácida (M2) deve apresentar as seguintes concentrações: 27% de HNO_3 e 60% de H_2SO_4 . A regeneração é feita adicionando-se à M1 H_2SO_4 concentrado (93% de H_2SO_4) e HNO_3 concentrado (90% de HNO_3). Seja o sistema de equações lineares provenientes dos balanços de massa global e de componentes:

$$\left\{ \begin{array}{l} M_1 + M_2 + M_3 = 1000 \text{ kg (1)} \\ 0,57M_1 + 0,93M_2 + 0M_3 = 600 \text{ kg (2)} \\ 0,23M_1 + 0M_2 + 0,90M_3 = 270 \text{ kg (3)} \end{array} \right.$$

Sejam o diálogo de resolução do balanço de massa usando o Solver do Excel mostrado a seguir e os seus resultados:

	A	B	C	D	E	F
1	RESOLUÇÃO USANDO SOLVER					
2						
3	M1.	M2.	M3.	f1.	f2.	f3.
4	416,894	389,646	193,46	0	-1E-06	0

De posse do sistema de equações lineares proveniente do balanço de massa global e de componente e do que está exposto no diálogo do Solver em termos de respostas, pode-se afirmar as seguintes proposições:

- I. A fórmula da célula D4 é " $=M1.+ M2.+ M3.-1000$ ".
- II. A fórmula da célula E4 é " $=0,57*M1.+0,93*M2.+0*M3.-600$ ".
- III. Os valores das vazões M_1 , M_2 e M_3 são 416,89, 389,65 e 193,5, respectivamente.
- IV. A fórmula da célula F4 é " $=0,23*M1.+0*M2.+0,9*M3.-270$ ".

É correto afirmar apenas o que está em:

- a) I, apenas.
- b) III e IV, apenas.
- c) II, apenas.
- d) IV, apenas.
- e) I, II, III e IV.

Referências

BADINO JÚNIOR, Alberto Colli; CRUZ, Antonio José Gonçalves. **Fundamentos de balanços de massa e energia**: um texto básico para a análise de processos químicos. São Carlos: EdUScar, 2010.

CLEITON Vaz. **BYPASS sem reação química vídeo aula exercício 266**. Disponível em: <<https://www.youtube.com/watch?v=jsLKI0urr0A>>. Acesso em: 23 out. 2016.

FELDER, Richard M.; ROUSSEAU, Ronald W. **Princípios elementares dos processos químicos**. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

GHASEM, Nayef; HENDA, Redhouane. **Principles of chemical engineering processes-material and energy balances**. 2. ed. New York: CRC PRESS, 2015.

HIMMELBLAU, David M.; RIGGS, James B. **Engenharia química**: princípios e cálculos. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.

MICROSOFT. **Guia de início rápido**: ativar e usar um suplemento no Excel 2016 para Windows. Disponível em: <<https://support.office.com/pt-br/article/Guia-de-in%C3%ADcio-r%C3%A1pido-ativar-e-usar-um-suplemento-no-Excel-2016-para-Windows-3da7ea04-888a-4b32-b064-87de0061f123>>. Acesso em: 15 dez. 2016.

MOURA, Luiz Fernando de. **Excel para engenharia**: formas simples para resolver problemas complexos. São Carlos: Ed. UFSCar, 2007.

TERRON, Luiz Roberto. **Operações unitárias para químicos, farmacêuticos e engenheiros**: fundamentos e operações unitárias do escoamento de fluidos. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

VIDAL, Ticiania F.; NETO, José C. Dinâmica de nitrogênio e fósforo em reservatório na região semiárida utilizando balanço de massa. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, PB, UAEA/UFMG. v. 18, n. 4, p. 402-407, 2014. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S1415-43662014000400007&script=sci_arttext>. Acesso em: 2 out. 2016

Balanços de massa estacionários com reações químicas

Convite ao estudo

Na Unidade 2 você estudou os conceitos de balanços de massa aplicados em uma única ou múltiplas operações unitárias, sem reação química. Conheceu também a aplicação das correntes especiais de processo, como reciclo, purga e *by-pass*, bem como a importância do conceito de graus de liberdade. Nesta seção, será estudado um dos campos mais importantes, que é o balanço de massa em operações unitárias que envolvem reações químicas, ou seja, o balanço de massa em reatores químicos. Assim sendo, aprenderemos a aplicar os conceitos de balanços por extensão de reação, por conversão fracional, por espécies moleculares e por espécies atômicas.

Dessa forma, temos como competência geral a ser desenvolvida na presente disciplina conhecer e compreender os principais conceitos e variáveis envolvidas em processos químicos, bem como as metodologias para os cálculos de balanço de massa, e como competência técnica conhecer e ser capaz de identificar e analisar balanços de massa em processos em regime estacionário com reações químicas. Assim sendo, esta unidade possui os seguintes objetivos de aprendizagem: (1) aplicar o conceito de graus de liberdade em um reator químico; (2) realizar os cálculos de balanço de massa por espécies atômicas, espécies moleculares, por extensão de reação e por conversão fracional; (3) conhecer os conceitos de reação de combustão; (4) conhecer os conceitos de reações múltiplas e rendimento; e (5) estudar exemplos de reações de combustão e reações múltiplas assistidos por computador (Excel).

Você é o *trainee* recém-contratado de uma indústria química que é uma das maiores fabricantes de ácido acético e amônia. Parabéns! Com a finalidade de se familiarizar com os processos de produção da empresa visando futuras melhorias no processo, a sua primeira função será calcular as quantidades de reagentes e produtos que devem ser inseridas e produzidas para que esses processos industriais fabriquem as quantidades necessárias das duas substâncias em questão. Como os balanços de massa com reação química podem ser aplicados para auxiliar você nessa tarefa? Como aplicar o conceito de graus de liberdade? As reações químicas envolvidas nesses processos são simples ou múltiplas? Como realizar o balanço de massa de uma reação de combustão? Ao final desse desafio, você apresentará a análise realizada por meio de uma planilha eletrônica, compilando todos os dados utilizados nesse estudo, e também os resultados a serem apresentados.

Atingindo os objetivos de aprendizagem desta unidade, você irá adquirir características fundamentais para a formação de um profissional da química, como: iniciativa, colaboração e flexibilidade necessárias para resolver problemas práticos e de projeto envolvidos no dia a dia da profissão. Bons estudos!

Seção 3.1

Definição e tipos de balanço de massa com reação química

Diálogo aberto

A ocorrência de uma reação química dentro de um processo traz várias complicações aos procedimentos de cálculo de balanço de massa vistos anteriormente. A equação estequiométrica da reação química impõe restrições sobre as quantidades relativas dos reagentes e produtos nas correntes de entrada e saída (se $A \rightarrow B$, por exemplo, você não pode começar com 1 mol de A puro e acabar com 2 moles de B). Além disso, um balanço de massa sobre uma substância que reage, não tem a forma simplificada *entrada = saída*, mas inclui termos de consumo ou de geração.

Nesta seção será revisada a terminologia usada nestes casos e descritos os procedimentos para realizar os cálculos de balanços materiais em sistemas com reação química, como os balanços por extensão de reação, por conversão fracional, por espécies moleculares e por espécies atômicas.

Os bioprocessos industriais têm sido largamente aplicados nos últimos anos, por exemplo, a produção do ácido acético, que ocorre através da fermentação acética do etanol utilizando-se bactérias da espécie *Acetobacter*. Essas bactérias são inseridas em células e introduzidas no biorreator, no qual ocorrerá o processo de fermentação. Dessa forma, um dos grandes desafios encontrados neste processo são as condições nas quais as bactérias devem ser mantidas, pois poderá ocorrer sua inibição pelo meio, sendo que a maior parte das espécies suportam até 11% de álcool e 10% de ácido acético. Esse controle pode ocorrer através da diluição correta do etanol, que acarretará na produção de ácido acético diluído. Sabe-se também que o melhor rendimento é obtido entre 25 °C e 30 °C.

Como *trainee* recém-contratado de uma importante indústria química fabricante de ácido acético e amônia, você decidiu estudar primeiramente o processo de fabricação de ácido acético e observou que essa produção é realizada através de um bioprocessos. A empresa produz 1,8 kg/h de ácido acético, de acordo com a seguinte equação química $C_2H_5OH + O_2 \rightarrow CH_3COOH + H_2O$. Este processo possui a restrição de que a máxima concentração de ácido acético tolerada pelas células

é de 10%. O ar é bombeado para dentro do biorreator a uma vazão molar de 200 mols/h. Quais serão as quantidades necessárias de matéria-prima para produzir 1,8 kg/h de ácido acético, sendo que a conversão fracional do etanol é de 80%? Como você irá proceder com os cálculos de balanços para esta reação química? Como você aplicará os conceitos de balanço de massa na resolução desse desafio?

Os conceitos que serão estudados nessa seção são fundamentais para sua formação. Bons estudos!

Não pode faltar

As reações químicas não estão presentes só na indústria química clássica. Elas têm se tornado cada vez mais multidisciplinares, como na engenharia bioquímica e biotecnologia, envolvendo operações de recuperação e purificação de um dado produto na produção em larga escala de antibióticos por meios fermentativos (produção de fármacos), desenvolvimentos de biorreatores (bioprocessos industriais) e reações enzimáticas. Por isso, se dá a importância da engenharia das reações químicas.

O profissional da química deve fazer reflexões sobre o que devemos fazer a respeito do futuro das reações químicas e que temas devem ser inseridos em novos projetos de investigação neste tema, alinhado à realidade atual com as inovações e as tecnologias. São questões desafiadoras para o futuro profissional da química que estará chegando no mercado de trabalho. Nesta seção, o foco dos nossos estudos será os reatores químicos, que têm papel significativo no desenvolvimento de processos industriais, e, neste contexto, a aplicação dos balanços materiais em reatores químicos é de fundamental importância.

Antes de a aplicação dos conceitos sobre balanço de massa com reação química ser iniciada, devemos verificar se a equação química está balanceada e, para isso, a equação pode ser balanceada utilizando-se qualquer método existente, por exemplo: método algébrico, método redox, método íon-elétron e método das tentativas. Os reagentes limitantes e em excesso também devem ser identificados antes da execução do balanço de massa. Nesta seção, você aprenderá os tipos de balanço de massa com reação química, bem como a aplicação do conceito de graus de liberdade.



Pesquise mais

Para recordar como executar o balanceamento de uma equação química pelo método das tentativas e como identificar os reagentes limitantes e em excesso, acesse o seguinte material:

FABREGA, Francine de Mendonça. **Química geral e experimental**. Londrina: Editora e Distribuidora Educacional S.A., 2016. Disponível em: <http://cm-cls-content.s3.amazonaws.com/201602/PROFESSOR/Quimica_geral_e_experimental/Livro/Livro.pdf>. Acesso em: 5 nov. 2016.

Conceitos de graus de liberdade

De maneira similar às aplicações do conceito de graus de liberdade vistos anteriormente, para realizar uma análise de graus de liberdade, desenhe e rotule completamente o fluxograma do processo, conte as incógnitas que existem no diagrama, conte depois as equações independentes que as relacionam e subtraia um número do outro. O resultado é o número de graus de liberdade do processo, tanto para o balanço de espécies atômicas (balanços atômicos) quanto de espécies moleculares (balanços moleculares).

$$n_{gl} = n_v + n_{eBMA} - n_{eBMM} - n_{env}$$

em que:

n_v ∴ número de incógnitas

n_{gl} ∴ número de graus de liberdade

n_{eBMA} ∴ n^o de equações de balanços molares independentes para espécies atômicas.

n_{eBMM} ∴ n^o de equações de balanços molares independentes para espécies moleculares não reativas.

n_{env} ∴ n^o de outras equações relacionando às variáveis desconhecidas



Assimile

Os termos “consumido” e “produzido” devem fazer parte do vocabulário ao se resolver problemas com reações químicas, com conversões de reagentes em produtos, pois, ao escrever **2 mols NH₃/3 mols H₂**, pode-se avaliar erroneamente que 3 mols de H₂ contivessem 2 mols de NH₃.

Balanço de massa total com reação química

Um balanço de uma quantidade conservada (massa total, massa de uma espécie particular, energia, momento) em um sistema (uma unidade de processo, uma série de unidades ou um processo completo) pode ser escrito na seguinte forma geral:

$$\text{Entrada} + \text{Geração} - \text{Saída} - \text{Consumo} = \text{Acúmulo}$$

Em geral, os cálculos de balanços de massa em sistemas reativos podem ser estabelecidos e resolvidos usando balanços das espécies moleculares, das espécies atômicas, por extensão de reação (grau de avanço) ou por conversão fracional. Todos os métodos devem conduzir à mesma resposta. Apesar do balanço fracional ser o mais utilizado atualmente, é interessante que você se familiarize com todos os quatro métodos.

Balanço por conversão fracional

Quando pensamos em reatores químicos, não é viável economicamente projetá-los visando que o reagente limitante se converta completamente em produtos, pois isso acarretaria em equipamentos muito grandes, difíceis de manusear e controlar, resultando também em uma manutenção muito cara. Acarretaria também em um processo de produção muito lento, pois nem todas as reações químicas ocorrem de maneira instantânea; de fato, com muita frequência elas acontecem bastante lentamente, ainda mais em se tratando de altas conversões. Assim sendo, o efluente do reator sai ainda com algum conteúdo de reagente não consumido e é submetido a processos de separação para serem reintegrados ao processo, por meio de uma corrente de reciclo. A **conversão fracional** de um reagente A é dada pela razão entre os mols do reagente limitante consumidos durante a reação e os mols alimentados no reator, conforme a Equação 3.3:

$$X_A = \frac{(\text{mols reagidas})_A}{(\text{mols alimentadas})_A} = \frac{(n_A)_{\text{entrada}} - (n_A)_{\text{saída}}}{(n_A)_{\text{entrada}}}$$

A fração não convertida é, claramente, $1 - X_A$. Por exemplo, se 1.000 mols de um reagente são alimentados e 900 mols reagem, então a conversão fracional é 0,9 (a **percentagem de conversão** é 90%) e fração não reagida é 0,1. Se 80 moles/min de um reagente são alimentados e a percentagem de conversão é 75%, então $(80)(0,75) = 60$ mols/min reagem e $(80)(0,25) = 20$ mols/min permanecem não convertidas.

Para a execução desse método é interessante a criação de uma tabela estequiométrica. Nessa tabela, primeiramente listam-se todos os componentes envolvidos na reação química e, em seguida, o número de mols iniciais de cada componente e, posteriormente, realiza-se o cálculo do número de mols finais, conforme as equações apresentadas na última coluna da tabela. Vale destacar que para esses cálculos o sinal negativo indica o consumo dos reagentes e o sinal positivo, a geração dos produtos. Assim sendo, para uma dada equação química $aA + bB \rightarrow cC + dD$, onde A é o reagente limitante, podemos obter uma tabela estequiométrica representada pela Tabela 3.1.

Tabela 3.1 | Tabela estequiométrica para o balanço de massa por conversão fracional

Componente	Inicial	Final
A	n_{Ao}	$n_A = n_{Ao} - X_A \cdot n_{Ao}$
B	n_{Bo}	$n_B = n_{Bo} - \left(\frac{b}{a}\right) \cdot X_A \cdot n_{Ao}$
C	n_{Co}	$n_C = n_{Co} + \left(\frac{c}{a}\right) \cdot X_A \cdot n_{Ao}$
D	n_{Do}	$n_D = n_{Do} + \left(\frac{d}{a}\right) \cdot X_A \cdot n_{Ao}$

Fonte: elaborada pelo autor.

Na Tabela 3.1 temos que n_{io} é o número de mols inicial de um reagente ou produto e n_i é o número de mols finais de um reagente ou produto. Vale frisar que o número de mols também pode ser representado em termos de taxa, sendo \dot{n}_{io} a vazão molar alimentada para um determinado reagente ou produto (mols/s) e \dot{n}_i a vazão molar para um determinado reagente ou produto (mols/s) que deixa o reator.

Balanços materiais nas espécies atômicas e moleculares

Os balanços nas espécies atômicas podem ser escritos sempre na forma simplificada entrada = saída, já que os átomos não podem ser criados (geração = 0) nem destruídos (consumo = 0) em uma reação química. Quando se fala de balanço de hidrogênio, por exemplo, isto pode significar duas coisas bem distintas: um balanço de hidrogênio molecular, existindo como espécie química independente, ou um balanço do número total de átomos de hidrogênio, ligados ou não. Usam-se, portanto, os termos **balanço de hidrogênio molecular e balanço de hidrogênio atômico** para representar estes dois tipos de balanços.

Balanço material por extensão da reação

A quantidade ξ (ou ξ), que tem as unidades de mol (ou mol/s), é chamada de **extensão da reação (ou grau de avanço da reação)**. Se o número de mols na alimentação (n_{io}) e o número de mols finais (n_i) são conhecidos para uma dada espécie, então a extensão da reação ξ pode ser calculada pela subtração do número de mols inicial e final à espécie conhecida ($n_{io} - n_i$); as quantidades finais das outras espécies se calculam através do mesmo conceito de subtração, substituindo o valor de ξ já determinado.

Considerando novamente uma equação química $aA + bB \rightarrow cC + dD$, onde A é o reagente limitante, teremos que se a reação for completa, ou seja, se todo componente A reagir, então no final teremos que $n_A = 0$, ou seja, $\xi_A = n_{A0}$. Sendo assim, a extensão da reação também pode ser calculada através da conversão fracional, conforme a equação abaixo.

$$X_A = \frac{\xi_A}{N_A^0} \quad (3.4)$$

Dessa forma, construindo uma tabela estequiométrica de maneira similar à Tabela 3.1, teremos a Tabela 3.2 para a execução do balanço de massa por extensão de reação.

Tabela 3.2 | Tabela estequiométrica para o balanço de massa por extensão de reação

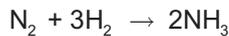
Componente	Inicial	Final
A	n_{A0}	$n_A = n_{A0} - \xi_A$
B	n_{B0}	$n_B = n_{B0} - \left(\frac{b}{a}\right) \cdot \xi_A$
C	n_{C0}	$n_C = n_{C0} + \left(\frac{c}{a}\right) \cdot \xi_A$
D	n_{D0}	$n_D = n_{D0} + \left(\frac{d}{a}\right) \cdot \xi_A$

Fonte: elaborada pela autora.



Exemplificando

Por exemplo, considera-se a reação de formação da amônia.



Suponha que a alimentação a um reator contínuo é de 100 mol/s de nitrogênio, 300 mols/s de hidrogênio e 1 mol/s de argônio (um gás inerte). Utilizando a Tabela 3.2, podemos escrever para as vazões de saída do reator,

$$n_{N_2} = 100 \text{ mol/s} - \xi$$

$$n_{\text{H}_2} = 300 \text{ mol/s} - \frac{3}{1}\xi$$

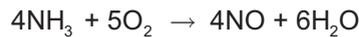
$$n_{\text{NH}_3} = 0 + \frac{2}{1}\xi$$

Para o argônio, como é um gás inerte, ou seja, não participa da reação, a extensão da reação é zero.

$$n_{\text{Ar}} = 1 \text{ mol/s}$$

Se você conhece a vazão de saída de qualquer componente ou a conversão fracional do nitrogênio ou do hidrogênio, você pode calcular ξ , e depois as outras duas incógnitas. Tente isto: para uma conversão fracional de 60% de hidrogênio, calcule a vazão de saída do hidrogênio, a extensão da reação e a vazão de saída do nitrogênio e da amônia. Este último valor deve ser 120 moles/s.

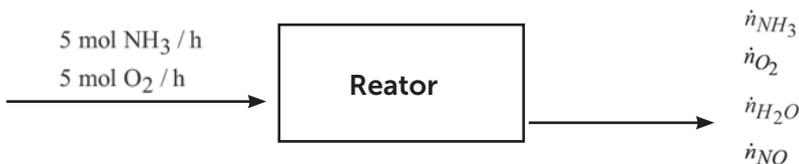
O exemplo seguinte ilustra as quatro abordagens de balanços molares com reação química. A amônia é queimada para formar ácido nítrico na seguinte reação:



A conversão fracional do oxigênio é 0,5. A vazão molar de alimentação de 5 mol de NH_3/h e do oxigênio é também de 5 mol de O_2/h . Calcule as vazões molares dos componentes da saída, usando os quatro métodos (adaptado de GHASEM; HENDA, 2015): método por conversão fracional, método por extensão de reação, método por espécies atômicas e método por espécies moleculares.

A Figura 3.1 mostra um fluxograma para o processo de produção do ácido nítrico em um reator contínuo no estado estacionário.

Figura 3.1 | Produção de ácido nítrico



Fonte: elaborada pela autora.

Alguns dos balanços que podem ser escritos para o processo mostrado na Figura 3.1 são como segue (lembre-se de que a equação geral do balanço para um processo contínuo no estado estacionário é entrada + geração = saída + consumo).

a. Balanço material por conversão fracional

Para executarmos o balanço de massa por conversão fracional, devemos aplicar o cálculo descrito pela Tabela 3.1. Assim sendo, vamos preencher a tabela, realizando os cálculos e sabendo que o reagente limitante é o oxigênio e sua conversão fracional é igual a 0,5, além do que ambos os reagentes possuem uma alimentação de 5 mol/h e não há alimentação de produtos. Dessa forma, os resultados podem ser observados pela Tabela 3.3.

Tabela 3.3 | Resumo do balanço molar usando o método de conversão fracional

Componente	Inicial	Final	Resultado (mols)
Oxigênio	$n_{O_2,o}$	$n_{O_2} = n_{O_2,o} - X_{O_2} \cdot n_{O_2,o}$	2,5
Amônia	$n_{NH_3,o}$	$n_{NH_3} = n_{NH_3,o} - \left(\frac{b}{a}\right) \cdot X_{O_2} \cdot n_{O_2,o}$	3
Óxido Nítrico	$n_{NO,o}$	$n_{NO} = n_{NO,o} + \left(\frac{c}{a}\right) \cdot X_{O_2} \cdot n_{O_2,o}$	2
Água	$n_{H_2O,o}$	$n_{H_2O} = n_{H_2O,o} + \left(\frac{d}{a}\right) \cdot X_{O_2} \cdot n_{O_2,o}$	3

Fonte: elaborada pela autora.

b. Balanço material por extensão da reação

O balanço material pode ser escrito usando o método de extensão de reação através da Tabela 3.2. Primeiramente, vamos calcular a extensão da reação através da equação 3.5: $\xi_{O_2} = X_{O_2} \cdot n_{O_2} = 0,5 \cdot 5 = 2,5 \text{ mols}$. Executando os cálculos através das mesmas considerações utilizadas no balanço por conversão fracional, poderemos observar na Tabela 3.4.

Tabela 3.4 | Resumo do balanço molar usando o método de extensão de reação

Componente	Inicial	Final	Resultado (mols)
Oxigênio	$n_{O_2,o}$	$n_{O_2} = n_{O_2,o} - \xi_{O_2}$	2,5
Amônia	$n_{NH_3,o}$	$n_{NH_3} = n_{NH_3,o} - \left(\frac{b}{a}\right) \cdot \xi_{O_2}$	3
Óxido Nítrico	$n_{NO,o}$	$n_{NO} = n_{NO,o} + \left(\frac{c}{a}\right) \cdot \xi_{O_2}$	2
Água	$n_{H_2O,o}$	$n_{H_2O} = n_{H_2O,o} + \left(\frac{d}{a}\right) \cdot \xi_{O_2}$	3

Fonte: elaborada pela autora.

c. Balanço material nas espécies atômicas

Os balanços atômicos envolvidos na reação (N, H e O) são baseados nas correntes de entrada e de saída, e não na equação estequiométrica da reação. Todos os balanços atômicos têm a forma simplificada entrada = saída. Voltando ao fluxograma, pode-se ver que o balanço de nitrogênio atômico envolve duas incógnitas (n_{NH_3} , n_{NO}), e que o balanço de hidrogênio atômico também envolve duas incógnitas (n_{H_2O} , n_{NH_3}), mas o balanço de oxigênio atômico envolve três incógnitas. Portanto, escrevem-se primeiro os balanços de N e de H para depois escrever o de O. Assim, determinam-se as vazões molares das espécies envolvidas na reação química da seguinte forma:

Balanço de N:

$$5 = n_{NH_3} + n_{NO}$$

Balanço de H:

$$3(5) = 3n_{NH_3} + 2n_{H_2O}$$

Balanço de O:

$$2(5) = 2n_{O_2} + n_{H_2O} + n_{NO}$$

Mas a conversão fracional,

$$X_{O_2} = \frac{n_{O_2,o} - n_{O_2}}{n_{O_2,o}} \rightarrow 0,5 = \frac{5 - n_{O_2}}{5} \rightarrow \underline{\underline{n_{O_2} = 2,5 \text{ mols}}}$$

Substituindo $n_{O_2} = 2,5 \text{ mol}$ no balanço para O:

$$2(5) = 2n_{O_2} + n_{H_2O} + n_{NO}$$

$$10 = 2(2,5) + n_{H_2O} + n_{NO}$$

$$\underline{\underline{5 = n_{H_2O} + n_{NO}}}$$

E as equações para N e H são:

$$5 = n_{NH_3} + n_{NO}$$

$$15 = 3n_{NH_3} + 2n_{H_2O}$$

Subtraindo as equações, temos que:

$$\Rightarrow 0 = n_{NH_3} - n_{H_2O} \Rightarrow n_{NH_3} = n_{H_2O}$$

Resolvendo o sistema de equações, teremos que:

$$15 = 3n_{NH_3} + 2n_{NH_3} \Rightarrow \underline{\underline{n_{NH_3} = 3 \text{ mol}}}$$

$$\text{como } n_{NH_3} = n_{H_2O} \Rightarrow \underline{\underline{n_{H_2O} = 3 \text{ mol}}}$$

$$n_{NO} = 2 \text{ mol}$$

As vazões são as mesmas calculadas pelo método da extensão por reação, ou seja,

$$\underline{\underline{\dot{n}_{O_2} = 2,5 \text{ mol/h} ; \dot{n}_{NH_3} = 3 \text{ mol/h} ; \dot{n}_{H_2O} = 3 \text{ mol/h} \text{ e } \dot{n}_{NO} = 2 \text{ mol/h}}}$$

d. Balanço material nas espécies moleculares

Este método é o mais complicado, principalmente quando estão envolvidas reações múltiplas, de modo que não se recomenda usá-lo. Para fins apenas ilustrativos, ele é apresentado a seguir. Cada balanço sobre uma espécie reativa deve conter um termo de geração ou de consumo. Assegure-se de entender a forma de cada balanço (como o balanço de NH_3 , que é simplificado para "saída = entrada- consumido", que é igual para o oxigênio; já os balanços de NO (saída = geração), e da H_2O (saída = geração).

Primeiro, deve-se saber a quantidade de moles reagidos de oxigênio, a partir da conversão fracional que é um dado do problema, e com isto sabe-se a quantidade de moles de oxigênio na saída do reator:

$$X_{O_2} = \frac{n_{O_2o} - n_{O_2}}{n_{O_2o}} \rightarrow 0,5 = \frac{5 - n_{O_2}}{5} \rightarrow \underline{\underline{n_{O_2} = 2,5 \text{ mols}}}$$

Balanço de O_2 (saída = entrada - consumo):

Logo, a quantidade de moles de O_2 que sai do reator é $n_{O_2} = 5 - 2,5 = 2,5 \text{ mols}$
 $\underline{\underline{n_{O_2} = 2,5 \text{ mols}}}$

Já que se conhecem as quantidades de oxigênio na alimentação e na saída e o termo de consumo de oxigênio, então, antes de usar o balanço para NH_3 , deve-se calcular quanto de NH_3 foi consumido:

Balanço de NH_3 (saída = entrada - consumo):

$$\text{moles de } \text{NH}_3 \text{ consumidos} = 2,5 \text{ moles de } \text{O}_2 \text{ consumidos} \times \left(\frac{4 \text{ mol de } \text{NH}_3 \text{ consumidos}}{5 \text{ mol de } \text{O}_2 \text{ consumidos}} \right) = 2 \text{ mol}$$

Os balanços de água e de NO completam o cálculo dos números de moles desconhecidos.

Colocando-se os termos de consumo de O_2 em função dos termos de geração de H_2O e de NO, tem-se.

Balanço de H_2O (saída = geração):

$$\text{Moles de } \text{H}_2\text{O} \text{ gerados} = 2,5 \text{ mol de } \text{O}_2 \text{ consumidos} \times \left(\frac{6 \text{ mol } \text{H}_2\text{O} \text{ gerados}}{5 \text{ mol } \text{O}_2 \text{ consumidos}} \right) = 3 \text{ mol}$$

Balanço de NO (saída = geração):

$$\text{Moles de NO gerados} = 2,5 \text{ mol de } \text{O}_2 \text{ consumidos} \times \left(\frac{4 \text{ mol NO gerados}}{5 \text{ mol } \text{O}_2 \text{ consumidos}} \right) = 2 \text{ mol}$$

Os termos de geração podem então ser escritos como $n_{\text{H}_2\text{O}} = 3$ moles H_2O gerado e $n_{\text{NO}} = 2$ moles NO gerado

As vazões são as mesmas calculadas pelos métodos da extensão por reação e das espécies atômicas, ou seja,

$$\dot{n}_{\text{O}_2} = 2,5 \text{ mol/h} ; \dot{n}_{\text{NH}_3} = 3 \text{ mol/h} ; \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} = 3 \text{ mol/h} \text{ e } \dot{n}_{\text{NO}} = 2 \text{ mol/h}$$



Refleta

Quer se aprofundar mais sobre balanços com reação química? Convidamos você, caro aluno, a consultar o capítulo 5 do livro de David M. Himmelblau e James B. Riggs (Disponível em: <<https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/978-85-216-2711-1/cfi/6/40>>. Acesso em: 25 out. 2016.).

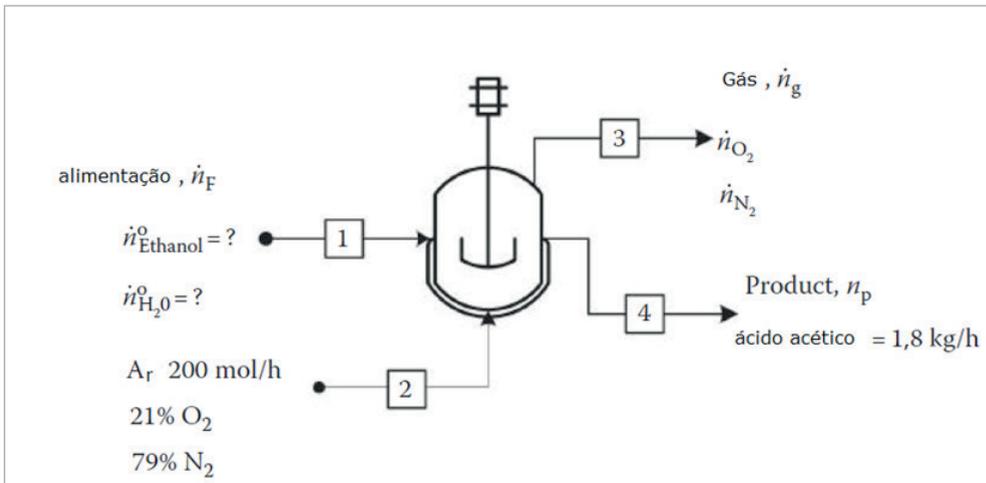
Leia também as seções 4.6, 4.6a, 4.7a-e do capítulo 4, do livro *Princípios Elementares dos Processos Químicos, de Felder e Rousseau* (Disponível em: <<https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/978-85-216-1940-6/cfi/128!/4/4@0.00:51.2>>. Acesso em: 25 out. 2016.).

Sem medo de errar

Como *trainee* recém-contratado de uma importante indústria química fabricante de ácido acético e amônia, você estudará o processo de fabricação

de ácido acético. A empresa produz 1,8 kg/h de ácido acético, de acordo com a seguinte equação química $C_2H_5OH + O_2 \rightarrow CH_3COOH + H_2O$, sendo que o processo possui a restrição de que a máxima concentração de ácido acético tolerada pelas células é de 10% e a conversão fracional do etanol é de 80%. O ar é bombeado para dentro do biorreator, a uma vazão molar de 200 mols/h. Vamos utilizar o conceito de balanço de massa por conversão fracional para calcular a quantidade mínima de etanol requerido ($n_{C_2H_5OH,o}$), e a quantidade mínima de água ($n_{H_2O,o}$) que deve ser usada para a diluição do etanol para evitar a inibição das bactérias. Dados: $M_{CH_3COOH} = 60 \text{ Kg / kmol}$ e $M_{H_2O} = 18 \text{ Kg / kmol}$

Figura 3.2 | Produção de ácido acético



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015, p. 176).

Resolução

As vazões molares de ar na entrada e a do ácido acético na saída são conhecidas, porém a vazão produzida de ácido acético está em uma base mássica e deve ser transformada para uma base molar: $1,8 \text{ kg/h} \times \left(\frac{1}{60 \text{ kg/kmol}} \right) = \underline{0,03 \text{ kmol/h}}$.

Para que não haja inibição da bactéria através do ácido acético, uma quantidade mínima de água de diluição deve ser calculada, bem como uma mínima quantidade de etanol deve ser requerida e encontrada. Como a máxima concentração de ácido acético tolerada pelas células é de 10%, então a quantidade mínima de água requerida para evitar a inibição do ácido é dada por: $0,1 = \frac{1,8 \text{ kg/h ácido acético}}{(\dot{m}_{H_2O} + 1,8 \text{ kg/h ácido acético})} \Rightarrow \underline{\dot{m}_{H_2O} = 16,2 \text{ kg/h}}$.

Alterando para base molar, teremos: $\dot{n}_{H_2O} = \frac{\dot{m}_{H_2O}}{M_{wH_2O}} = \frac{16,2 \text{ kg/h}}{18 \text{ kg/kmol}} \Rightarrow \underline{\dot{n}_{H_2O} = 0,9 \text{ kmol/h}}$.

Assim sendo, vamos agora aplicar o método do balanço de massa por conversão

fracional para calcular a quantidade de etanol necessária para obtermos 0,03 kmol/h de ácido acético. Para isso temos que: $n_{\text{Ác. Acético}} = n_{\text{Ác. Acético},0} + \left(\frac{c}{a}\right) \cdot X_{\text{etanol}} \cdot n_{\text{etanol},0}$. Como não temos ácido acético sendo alimentado no reator $n_{\text{Ác. Acético},0} = 0$, logo: $n_{\text{Ác. Acético}} = \left(\frac{c}{a}\right) \cdot X_{\text{etanol}} \cdot n_{\text{etanol},0}$. Resolvendo a equação, temos que a quantidade de etanol necessária é de 0,0375 kmol/h.

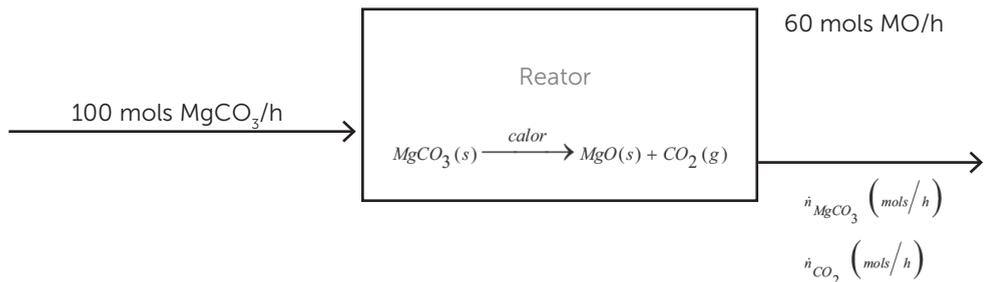
Avançando na prática

Análise das quantidades de impurezas presentes no calcário em um processo de decomposição do carbonato de magnésio

Descrição da situação-problema

A cal (óxido de cálcio) é amplamente usada na produção de cimento, aço, medicamentos, inseticidas, alimento para plantas e animais, sabão, borracha e muitos outros materiais comuns. Na cal estão incluídas diversas impurezas presentes no calcário, que permanecem após a remoção do CO_2 . Uma das impurezas presentes é o óxido de magnésio (em torno de 5,41%), que normalmente é produzido pelo aquecimento e pela decomposição do calcário (MgCO_3), em um processo de calcinação: $\text{MgCO}_3(s) \xrightarrow{\text{calor}} \text{MgO}(s) + \text{CO}_2(g)$. No processo de decomposição do carbonato de magnésio (MgCO_3) presente no calcário, o reator de calcinação contínuo é alimentado a uma vazão de 100 mols/h, saindo 60 mols/h de óxido de magnésio (MgO). Você foi convidado a fazer uma análise de graus de liberdade do processo e descobrir quantos mols por hora são obtidos de CO_2 para 100 mols/h de carbonato de magnésio que entram no reator (adaptado de HIMMELBLAU e RIGGS, 2014, p. 169; BADINO JÚNIOR; CRUZ, 2010, p. 79).

Figura 3.3 | Representação da produção de óxido de magnésio



Fonte: elaborada pela autora.

Resolução da situação-problema

Analisando os graus de liberdade, tem-se que:

$$n_{gl} = n_v + n_{eBMA} - n_{eBMM} - n_{env}$$

Em que:

n_{gl} ∴ número de graus de liberdade

n_v = variáveis desconhecidas = $2(\dot{n}_{MgCO_3}$ e \dot{n}_{MgO})

Logo: $n_{eBMA} = 2$ (átomos de Mg e C); $n_{eBMM} = 0$ e $n_{env} = 0$.

Embora existam 3 espécies atômicas envolvidas no processo (Mg, C e O) e a equação para o balanço molar (EBM) para o oxigênio atômico (O) não seja uma equação independente, ela representa a soma da EBM para o Mg e o dobro da EBM para o carbono (C), ou seja, $EBM(O) = EBM(Mg) + 2 \cdot EBM(C)$. Observe:

$n_{eBMM} = 0$ (não existem espécies moleculares não reativas)

$n_{env} = 0$ (não existem outras equações relacionadas às variáveis desconhecidas (\dot{n}_{MgCO_3} e \dot{n}_{MgO}))

Portanto, $n_{gl} = 2 - 2 - 0 - 0 = 0 \Rightarrow \underline{\underline{n_{gl} = 0}}$

Podemos aplicar o método do balanço de massa por conversão fracional para calcular a quantos mols por hora são obtidos de CO_2 para 100 mols/h de carbonato de magnésio que entram. Inicialmente, vamos calcular a conversão fracional e para isso podemos realizar o balanço para o óxido de magnésio, através

da equação: $n_{MgO} = n_{MgO,0} + \left(\frac{c}{a}\right) \cdot X_{MgCO_3} \cdot n_{MgCO_3,o}$. Sabendo que $n_{MgO} = 60 \text{ mols/h}$, $n_{MgO,0} = 0$ e $n_{MgCO_3,o} = 100 \text{ mols/h}$, temos que $X_{MgCO_3} = 0,6$. Assim sendo, podemos calcular n_{CO_2} .

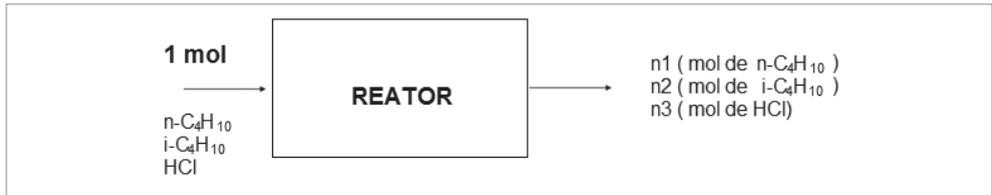
Através da equação $n_{CO_2} = n_{CO_2,0} + \left(\frac{d}{a}\right) \cdot X_{MgCO_3} \cdot n_{MgCO_3,o}$, teremos $n_{CO_2} = 60 \text{ mols/h}$. Esse

fato ocorre, pois a reação química possui todos os coeficientes estequiométricos iguais a um.

Faça valer a pena

1. A isomerização é um tipo de reação química muito importante na Indústria química. O n-butano é convertido a isobutano em um reator de isomerização contínuo que opera isotermicamente a 149 °C, mostrado na figura a seguir.

Figura | Reator de isomerização contínuo



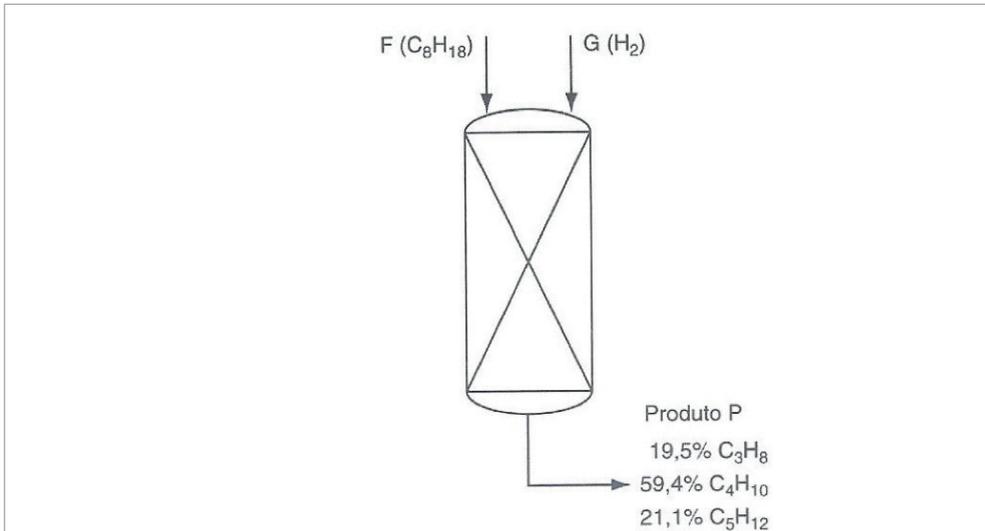
Fonte: adaptada de Felder e Rousseau (2011, p. 113).

A alimentação do reator contém 93% molar de n-butano, 5% de isobutano e 2% de HCl a 149 °C e é atingida uma conversão de 40% de n-butano. Tomando como **base de 1 mol de gás de alimentação**, a alternativa que apresenta os valores molares de n-butano e isobutano na saída dos reatores, nem como a extensão de reação, ξ (mol) são, respectivamente:

Fonte: adaptada de Felder e Rousseau (2011, p. 113).

- a) $n_{nC_4H_{10}} = 0,422 \text{ mol}$, $n_{i-C_4H_{10}} = 0,558 \text{ mol}$ e $\xi = 0,372 \text{ mol}$
- b) $n_{nC_4H_{10}} = 0,558 \text{ mol}$, $n_{i-C_4H_{10}} = 0,422 \text{ mol}$ e $\xi = 0,372 \text{ mol}$
- c) $n_{nC_4H_{10}} = 0,272 \text{ mol}$, $n_{i-C_4H_{10}} = 0,558 \text{ mol}$ e $\xi = 0,422 \text{ mol}$
- d) $n_{nC_4H_{10}} = 0,422 \text{ mol}$, $n_{i-C_4H_{10}} = 0,372 \text{ mol}$ e $\xi = 0,558 \text{ mol}$
- e) $n_{nC_4H_{10}} = 0,422 \text{ mol}$, $n_{i-C_4H_{10}} = 0,558 \text{ mol}$ e $\xi = 0,272 \text{ mol}$

2. No processo de hidrocraqueamento mostrado a seguir na figura, a carga é misturada com excesso de hidrogênio e submetida à alta temperatura e à alta pressão na presença de um catalisador de zeólita.



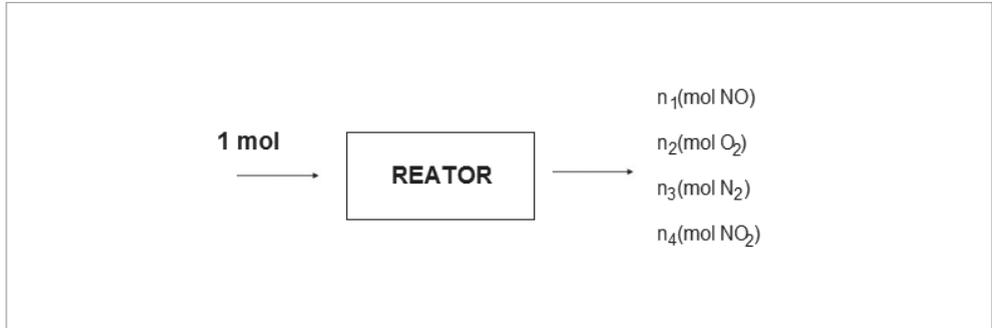
Fonte: Himmelblau e Riggs (2014, p. 213).

O hidrocraqueamento do octano (C_8H_{18}) apresentou como produto a seguinte composição em percentagem molar: 19,5% de C_3H_8 , 59,4% de C_4H_{10} e 21,1% de C_5H_{12} . Considere a base de cálculo $P=100$ g mol. Para simplificar os cálculos, faça o balanço molar por espécies atômicas (adaptado de HIMMELBLAU; RIGGS, 2014, p. 213). Assinale a alternativa que apresenta o valor correto da razão molar entre o octano convertido (F) e o hidrogênio:

- a) 0,008.
- b) 1,008.
- c) 0,992.
- d) 1,110.
- e) 0,901.

3. A oxidação do dióxido de enxofre: $NO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow NO_2$ é conduzida em um reator em batelada isotérmico, conforme esquema apresentado pela figura a seguir.

Figura 3.5 | Esquema de um reator batelada



Fonte: elaborada pela autora.

O reator é carregado com uma mistura contendo 20% molar de NO, e o resto é ar, na pressão inicial de 380 kPa (absoluta). Considerando que o ar é formado por uma mistura de N_2 (79% molar) e O_2 (21% molar) e admitindo comportamento ideal para o gás e se há 90% de conversão de NO e a conversão é dada por:

$$\text{conversão} = \frac{(\text{moles do reagente que entra no reator}) - (\text{moles do reagente que sai no reator})}{(\text{moles do reagente que entra no reator})}$$

Marque a alternativa que apresenta o número de moles de cada componente, respectivamente, na saída do reator:

- a) $n_1 = 0,2$ mol de NO, $n_2 = 0,78$ mol de O_2 , $n_3 = 0,018$ mol de NO_2 e $n_4 = 0,0632$ mol de N_2 .
- b) $n_1 = 0,01$ mol de NO, $n_2 = 0,05$ mol de O_2 , $n_3 = 0,2$ mol de NO_2 e $n_4 = 0,7$ mol de N_2 .
- c) $n_1 = 0,078$ mol de NO, $n_2 = 0,02$ mol de O_2 , $n_3 = 0,632$ mol de NO_2 e $n_4 = 0,18$ mol de N_2 .
- d) $n_1 = 0,02$ mol de NO, $n_2 = 0,078$ mol de O_2 , $n_3 = 0,18$ mol de NO_2 e $n_4 = 0,632$ mol de N_2 .
- e) $n_1 = 0,1$ mol de NO, $n_2 = 0,5$ mol de O_2 , $n_3 = 0,2$ mol de NO_2 e $n_4 = 0,7$ mol de N_2 .

Seção 3.2

Aplicações de balanço de massa com reação química em reações de combustão

Diálogo aberto

Iniciamos essa unidade de ensino conhecendo e aplicando diferentes métodos para a execução do balanço de massa com reações químicas. Nesta seção serão abordados os conceitos de reações de combustão, que são abundantes em processos químicos, como também as reações múltiplas associadas com os conceitos de conversão e de rendimento. Terminologias como reagente limitante e em excesso, ar teórico, oxigênio teórico serão frequentemente utilizadas. Alguns conceitos anteriormente vistos serão revisitados aqui, como conversão, sistemas em múltiplas unidades, o conceito de reciclo e, propriamente, os métodos para resolução dos balanços materiais para quantificar as correntes de um processo. Com isto, caro aluno, no final desta seção você será capaz de desenvolver habilidades em identificar, analisar e aplicar as metodologias envolvendo processos em regime estacionário, com reação química.

Segundo Badino Júnior e Cruz (2010), a síntese da amônia é um processo industrial clássico e sua produção geralmente acontece em um reator catalítico. Esse reator pode ser alimentado com hidrogênio oriundo de uma corrente de gás natural e nitrogênio proveniente de uma corrente de ar. A reação química é dada pela equação: $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$, ocorrendo em condições elevadas de pressão e temperatura. A amônia é um intermediário que deriva diversos produtos da indústria química, por exemplo, o ácido nítrico.

Dando continuidade à sua nova função de um trainee recém-contratado de uma importante indústria química, você está realizando a análise do processo de produção de amônia e verificou que entre as operações unitárias envolvidas estão um reator químico e uma unidade de separação. No processo, os reagentes são misturados e alimentados ao reator em uma razão molar de 2 mols H_2 /1 mol N_2 , e a conversão de processo em relação ao hidrogênio é 95%. A unidade de separação recicla 98% do H_2 , e a taxa de produção de amônia por dia para este processo é de 10 toneladas/dia. Você observou que o processo possui uma corrente de reciclo,

mas pensou por que essa corrente é necessária? Como calcular a quantidade de reagente reciclado e a taxa de reciclo? Qual será a conversão no reator? Aplique os conhecimentos adquiridos através dos estudos dessa seção e resolva problemas aplicando o balanço material para reações de combustão. Bons estudos!

Não pode faltar

A **combustão** – a reação rápida de um combustível com oxigênio – é talvez mais importante do que qualquer outro tipo de reação química industrial, muito embora os produtos obtidos da combustão (CO_2 , H_2O e frequentemente CO e SO_2) sejam muito menos valiosos que os combustíveis queimados para obtê-los. A importância das reações de combustão reside na quantidade de energia que liberam, energia que pode ser usada para produzir vapor, que é então usado para mover as turbinas que geram a maior parte da energia elétrica do mundo.

A maior parte do combustível usado em fornalhas de combustão em plantas de energia é carvão (carbono, algum hidrogênio e enxofre e vários materiais não combustíveis), óleo (principalmente hidrocarbonetos de alto peso molecular e alguma quantidade de enxofre), gás (geralmente gás natural, constituído quase que exclusivamente de metano) ou gás liquefeito de petróleo (usualmente propano e/ou butano).

Quando um combustível é queimado, o carbono reage para formar CO_2 ou CO , o hidrogênio forma H_2O e o enxofre forma SO_2 . Em temperaturas maiores do que 1.800°C , o nitrogênio do ar pode reagir para formar óxido nítrico, NO . Uma reação de combustão na qual é formado CO a partir de um hidrocarboneto é chamada de combustão parcial ou incompleta do hidrocarboneto em questão. Conforme Felder e Rousseau (2011), temos como exemplos de reações de combustão:



Felder e Rousseau (2011) expressam também que a fonte de oxigênio mais usada para combustão é o ar atmosférico, que é abundante na natureza e apresenta a composição molar a seguir, para uma massa molecular média de 29,0.

N_2	78,03%
O_2	20,99%
Ar	0,94%
CO_2	0,03%
H_2, He, Ne, Kr, Xe	0,01%
	<hr/> 100,00%

Nos cálculos de combustão, costuma-se adotar que a composição do ar composta de 79% N_2 e 21% O_2 .

O termo composição em base úmida é usado frequentemente quando se quer expressar as frações molares dos componentes de um gás que contém água. Já a composição em base seca expressa as frações molares do gás, isenta de água. Um gás que contém 33,3% molar CO_2 , 33,3% N_2 e 33,3% H_2O em base úmida, contém 50% CO_2 e 50% N_2 em base seca (FELDER; ROUSSEAU, 2011).

O produto gasoso que deixa a câmara de combustão é conhecido como gás de chaminé ou gás de combustão. Existem técnicas comuns de análise de gases de chaminé que fornecem as composições do gás em base seca.



Exemplificando

Um gás de chaminé contém 80,0% molar N_2 , 8,5% CO_2 , 8,5% O_2 , e 3% é H_2O . Calcule a composição molar do gás em base seca.

Solução:

Base: 1000 mols de gás úmido: 800 mol N_2 ; 85,0 mol CO_2 ; 85,0 mol O_2 , logo um total de 970 mols gás seco. Implica nas seguintes frações molares:

$$n = n_{CO_2} + n_{O_2} + n_{N_2} = 970$$

$$n = 970 \text{ mol}$$

$$\frac{80}{970} = 0,0825 \frac{\text{mol } N_2}{\text{mol de gás seco}}$$

$$\frac{8,5}{970} = 0,0088 \frac{\text{mol } CO_2}{\text{mol de gás seco}}$$

$$\frac{8,5}{970} = 0,0088 \frac{\text{mol } O_2}{\text{mol de gás seco}}$$

Uma análise Orsat fornece a seguinte composição em base seca: 65% molar N_2 , 14% CO_2 , 11% CO e 10% O_2 . Uma medição da umidade

mostra que a fração molar de H_2O no gás de chaminé é 0,070. Calcule a composição do gás de chaminé em base úmida.

Solução:

Base: 100 lbmol gás seco

$$0,070 \frac{\text{lbmol H}_2\text{O}}{\text{lbmol gás úmido}} \leftrightarrow 0,930 \frac{\text{lbmol gás seco}}{\text{lbmol gás úmido}}$$

$$\frac{0,070 \text{ lbmol H}_2\text{O}/\text{lbmol gás úmido}}{0,930 \text{ lbmol gás seco}/\text{lbmol gás úmido}} = 0,0753 \frac{\text{lbmol H}_2\text{O}}{\text{lbmol gás seco}}$$

O gás na base assumida contém então:

$$\frac{100 \text{ lbmol gás seco}}{100 \text{ lbmol gás seco}} \times \left(\frac{0,0753 \text{ lbmol H}_2\text{O}}{\text{lbmol gás seco}} \right) = 7,53 \text{ lbmol H}_2\text{O}$$

$$\frac{100 \text{ lbmol gás seco}}{100 \text{ lbmol gás seco}} \times \left(\frac{0,650 \text{ lbmol N}_2}{\text{lbmol gás seco}} \right) = 65,0 \text{ lbmol N}_2$$

Quantidade de gás úmido:

$$(100)(0,110) = 11,0 \text{ lbmol CO}$$

$$(100)(0,140) = 14,0 \text{ lbmol CO}_2$$

$$(100)(0,100) = 10,0 \text{ lbmol O}_2$$

Quantidade de *gás úmido*:

$$107,5 \text{ lbmol } \textit{gás úmido}$$

As frações molares de cada componente no gás de chaminé são calculadas:

$$\frac{7,53}{107,5} = 0,070 \frac{\text{lbmol H}_2\text{O}}{\text{lbmol gás úmido}}$$

$$\frac{65,0}{107,5} = 0,605 \frac{\text{lbmol N}_2}{\text{lbmol gás úmido}}$$

$$\frac{14,0}{107,5} = 0,130 \frac{\text{lbmol CO}_2}{\text{lbmol gás úmido}}$$

$$\frac{11,0}{107,5} = 0,102 \frac{\text{lbmol CO}}{\text{lbmol gás úmido}}$$

$$\frac{10,0}{107,5} = 0,093 \frac{\text{lbmol O}_2}{\text{lbmol gás úmido}}$$

Ar teórico e em excesso

Se dois reagentes participam em uma reação e um deles é consideravelmente mais caro do que o outro, a prática usual consiste em alimentar o componente mais barato em excesso em relação ao mais caro. Isto tem o efeito de aumentar a conversão do reagente valioso à custa do gasto de reagente barato e os gastos de bombeamento adicionais. As reações de combustão costumam ocorrer com ar em excesso para fornecer ao combustível o oxigênio em proporções estequiométricas. Os seguintes termos são comumente utilizados para descrever as proporções de combustível e ar alimentados a um reator.

Oxigênio teórico: os moles (em batelada) ou vazões molares (contínuo) de O_2 necessários para a combustão completa de todo o combustível fornecido ao reator, admitindo que todo o carbono no combustível é oxidado a CO_2 e todo o hidrogênio é oxidado a H_2O .

- Ar teórico: a quantidade de ar que contém o oxigênio teórico.
- Ar em excesso: a quantidade pela qual o ar alimentado excede ao ar teórico.

Se a vazão de alimentação e a equação estequiométrica são conhecidas para a combustão completa do combustível, podem-se calcular as vazões de alimentação de oxigênio e do ar teóricos. Com a vazão de alimentação real de ar, pode-se calcular a percentagem de ar em excesso da equação 3.6, bem como calcular a vazão de ar alimentado do ar teórico e de um valor dado da percentagem em excesso.

$$\% \text{ ar em excesso} = \frac{(\text{moles ar})_{\text{alimentado}} - (\text{moles ar})_{\text{teórico}}}{(\text{moles ar})_{\text{teórico}}} \times 100$$

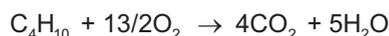


Exemplificando

100 moles/h de butano e 5.000 moles/h de ar são fornecidos a um reator de combustão. Calcule a percentagem de ar em excesso (adaptado de FELDER; ROUSSEAU, 2011, p. 128).

Solução:

Calcule o ar teórico da vazão de alimentação do combustível e da equação estequiométrica para a completa combustão do butano.



$$(O_2)_{\text{teórico}} = \left(\frac{100 \text{ moles } C_4H_{10}}{h} \right) \times \left(\frac{6,5 \text{ moles } O_2 \text{ requerido}}{\text{mol } C_4H_{10}} \right) = 650 \text{ moles } O_2/h$$

$$(\text{ar})_{\text{teórico}} = \left(\frac{650 \text{ moles O}_2}{\text{h}} \right) \times \left(\frac{4,76 \text{ moles ar}}{\text{mol O}_2} \right) = 3094 \text{ moles ar/h}$$

Então,

$$\% \text{ ar em excesso} = \frac{(\text{moles ar})_{\text{alimentado}} - (\text{moles ar})_{\text{teórico}}}{(\text{moles ar})_{\text{teórico}}} \times 100 = 61,6 \%$$

Se fosse dada a percentagem de excesso, 61,6%, o ar alimentado seria calculado como

$$(\text{ar})_{\text{alimentado}} = 1,616 \times 3094 = 5000 \text{ h}$$



Refleta

O ar teórico requerido para queimar uma dada quantidade de combustível não depende de quanto é realmente queimado. O combustível pode não reagir completamente e pode ser parcialmente queimado para formar tanto CO quanto CO_2 , mas o ar teórico é ainda aquele que seria necessário para reagir com todo o combustível para formar unicamente CO_2 .

O valor da percentagem de ar em excesso depende apenas do ar teórico e da vazão de alimentação do ar, não de quanto O_2 é consumido no reator ou de a combustão ser parcial ou completa.

Balanços de massa em reatores de combustão

O procedimento para escrever e resolver balanços materiais para um reator de combustão é igual para qualquer sistema reativo, portanto pode ser realizado através de qualquer um dos métodos apresentados na seção anterior, lembrando que a análise de graus de liberdade também deve ser aplicada.

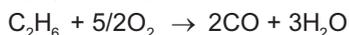


Exemplificando

O etano é queimado com 50% em excesso de ar. A percentagem de conversão do etano é 90%; do etano queimado, 25% reage para formar CO e o resto forma CO_2 . Calcule a composição molar do gás de chaminé em base seca e a razão molar da água para o gás de chaminé seco (adaptado de FELDER; ROUSSEAU, 2011, p. 130).

Solução:

Base: 100 moles de etano alimentado.



Análise de Graus de Liberdade:

Itens fontes	Processo
Número de variáveis desconhecidas	7 incógnitas ($n_0, n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6$)
Número de equações independentes	3 balanços atômicos (C, H, O) + 1 balanço de N_2
Número de relações	1 especificação de excesso de ar (relacionado com a quantidade de combustível alimentado)
	1 especificação da conversão de etano
Número de graus de liberdade (ngl)	1 especificação da razão CO/CO_2
	0 graus de liberdade

50% de ar em excesso:

$$(n_{\text{O}_2})_{\text{teórico}} = \left(\frac{100 \text{ moles } \text{C}_2\text{H}_6}{1} \right) \times \left(\frac{3,50 \text{ moles } \text{O}_2}{1 \text{ mol } \text{C}_2\text{H}_6} \right) = 350 \text{ moles } \text{O}_2$$

Logo

$$0,21(n_0) = (1,50)(350) \rightarrow n_0 = 2500 \text{ moles ar fornecidos}$$

90% de conversão de etano (10% não reagem):

$$n_1 = 0,100(100 \text{ moles de } \text{C}_2\text{H}_6 \text{ fornecido}) = 10,0 \text{ moles de } \text{C}_2\text{H}_6$$

$$0,900 (100 \text{ moles de } \text{C}_2\text{H}_6 \text{ fornecido}) = 90,0 \text{ moles de } \text{C}_2\text{H}_6 \text{ reagem}$$

25% de conversão a CO:

$$n_4 = \left(\frac{(0,25)(90,0) \text{ moles } \text{C}_2\text{H}_6 \text{ reagem para formar CO}}{1} \right) \times \left(\frac{2 \text{ moles CO gerados}}{1 \text{ mol } \text{C}_2\text{H}_6 \text{ reage}} \right) =$$

$$n_4 = 45,0 \text{ moles CO}$$

Balanço de N_2 (entrada = saída):

$$n_3 = (0,79)(2500) = 1974 \text{ moles de } \text{N}_2$$

Balanço de carbono atômico:

$$\left(\frac{100 \text{ moles C}_2\text{H}_6}{1}\right) \times \left(\frac{2 \text{ moles C}}{1 \text{ mol C}_2\text{H}_6}\right) = \left(\frac{n_1 \text{ moles C}_2\text{H}_6}{1}\right) \times \frac{2 \text{ moles C}}{1 \text{ mol C}_2\text{H}_6} + \left(\frac{n_4 \text{ moles CO}}{1}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol CO}}\right) + \left(\frac{n_5 \text{ moles CO}_2}{1}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol CO}_2}\right) =$$

$$n_5 = 135 \text{ moles de CO}_2$$

Balço de hidrogênio atômico:

$$\left(\frac{100 \text{ moles C}_2\text{H}_6}{1}\right) \times \left(\frac{6 \text{ moles H}}{1 \text{ mol C}_2\text{H}_6}\right) = \left(\frac{10 \text{ moles C}_2\text{H}_6}{1}\right) \times \left(\frac{6 \text{ moles H}}{1 \text{ mol C}_2\text{H}_6}\right) + \left(\frac{n_6 \text{ moles H}_2\text{O}}{1}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol H}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}}\right)$$

$$n_6 = 270 \text{ moles de H}_2\text{O}$$

Balço de oxigênio atômico:

$$\left(\frac{525 \text{ moles O}_2}{1}\right) \times \left(\frac{2 \text{ moles O}}{1 \text{ mol O}_2}\right) = \left(\frac{n_2 \text{ moles O}_2}{1}\right) \times \left(\frac{2 \text{ moles O}}{1 \text{ mol O}_2}\right) + \left(\frac{45 \text{ moles CO}}{1}\right) \times \left(\frac{1 \text{ mol O}}{1 \text{ mol CO}}\right) + \left(\frac{135 \text{ moles CO}_2}{1}\right) \times \left(\frac{2 \text{ moles O}}{1 \text{ mol CO}_2}\right) + \left(\frac{270 \text{ moles H}_2\text{O}}{1}\right) \times \frac{1 \text{ mol O}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}}$$

$$n_2 = 232 \text{ moles O}_2$$

A análise do gás de combustão está completa. Somando:

$$\left(\begin{array}{l} n_1 = 10 \text{ moles C}_2\text{H}_6 \\ n_2 = 232 \text{ moles O}_2 \\ n_3 = 1974 \text{ moles N}_2 \\ n_4 = 45 \text{ moles CO} \\ n_5 = 135 \text{ moles CO}_2 \\ \hline 2396 \text{ moles gás seco} \\ n_6 = 270 \text{ moles H}_2\text{O} \\ \hline 2666 \text{ moles totais} \end{array} \right) \Leftrightarrow \left(\begin{array}{l} \text{a composição do gás em base seca é:} \\ y_1 = \frac{10 \text{ moles C}_2\text{H}_6}{2396 \text{ moles gás seco}} = 0,00417 \\ y_2 = \frac{232 \text{ moles O}_2}{2396 \text{ moles gás seco}} = 0,0970 \\ y_3 = \frac{1974 \text{ moles N}_2}{2396 \text{ moles gás seco}} = 0,824 \\ y_4 = \frac{45 \text{ moles CO}}{2396 \text{ moles gás seco}} = 0,019 \\ y_5 = \frac{135 \text{ moles CO}_2}{2396 \text{ moles gás seco}} = 0,0563 \end{array} \right)$$

$$\text{E a razão de água para gás seco é: } \frac{270 \text{ moles H}_2\text{O}}{2396 \text{ moles gás seco}} = 0,113$$

Reações múltiplas e rendimento

Na maior parte das reações químicas, os reagentes são combinados com o objetivo de produzir um determinado produto em uma reação química simples. Porém, os reagentes costumam combinar-se em mais de uma forma, e o produto formado pode, pela sua vez, reagir para transformar-se em algum outro produto menos desejável. O resultado destas reações paralelas é uma perda econômica: menos produto desejado é obtido para uma dada quantidade de reagente, ou uma maior quantidade de reagente é necessária para obter uma quantidade específica de produto.

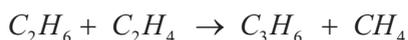
Felder e Rousseau (2011) abordam a produção do etileno através da desidrogenação do etano como um exemplo desse tipo de reação, como mostrado a seguir.



O hidrogênio produzido pode reagir com etano para produzir metano:



Assim como o etileno pode reagir com etano para formar propileno:



Já que o objetivo é produzir etileno, apenas a primeira destas três reações é desejável: a segunda consome reagente sem fornecer o produto desejado, e a terceira consome tanto o reagente quanto o produto desejado. O engenheiro que projeta o reator e as condições de operação para este processo deve considerar não apenas como maximizar a produção do produto desejado, mas também como minimizar a produção de componentes não desejados.

O termo rendimento é usado para descrever o grau em que uma determinada reação prevalece sobre as outras, sendo calculado pela equação a seguir, em que os moles que deveriam ter sido formados correspondem aos moles que teriam sido formados se não houvesse reações paralelas e se o reagente limitante fosse consumido completamente.

$$\text{rendimento} = \frac{\text{moles formados de produto desejado}}{\text{moles que deveriam ser formados}}$$

O rendimento definido pela equação é sempre uma fração; pode ser expressa como uma porcentagem multiplicando por 100. Altos valores de rendimento significam que as reações paralelas indesejadas foram suprimidas com sucesso em relação à reação desejada.



Refleta

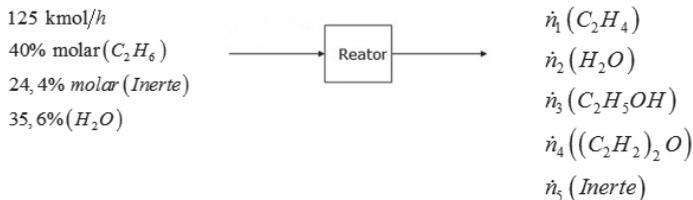
O rendimento às vezes também é definido como as moles do produto desejado divididas pelas moles de alimentação ao reator ou pelas moles de reagente consumido no reator. Para uma composição dada da alimentação e da corrente de produtos, o rendimento definido destas três maneiras pode ter três valores completamente diferentes, de forma tal que, quando falamos de rendimento, é importante especificar a definição usada.



Exemplificando

O etanol pode ser produzido comercialmente pela hidratação em fase gasosa do etileno: $C_2H_4 + H_2O \rightarrow C_2H_5OH$ (Figura 3.6). Parte do produto é, entretanto, convertida a dietil éter na reação indesejada: $2C_2H_5OH \rightarrow (C_2H_5)_2O + H_2O$. Em um reator contínuo, em estado estacionário, são alimentados de uma corrente cuja composição é de 40% molar de etileno, 24,4% de um gás inerte, e o resto é de vapor de água. Se há 85% de conversão de etileno e o rendimento de etanol é 75%, determine a composição molar da corrente de saída do reator para todos os componentes envolvidos.

Figura 3.6 | Representação da produção de etanol



Fonte: adaptada de Felder e Rousseau. (2011, p.154).

Solução:

Reunindo as informações:

Considere a base de cálculo: 125 kmol/h de entrada, então as vazões da alimentação são:

$$125 \text{ kmol/h}$$

$$\dot{n}_{1,o} = (0,4) \times (125) = 50 \text{ kmol/h}$$

$$\dot{n}_{5,o} = (0,244) \times (125) = 30,5 \text{ kmol/h}$$

$$\dot{n}_{2,o} = (0,356) \times (125) = 44,5 \text{ kmol/h}$$

A conversão do etileno é:

$$X_{C_2H_4} = \frac{\dot{n}_{1,o} - \dot{n}_1}{\dot{n}_{1,o}} = 0,85 \Rightarrow 0,85 = \frac{0,4 \times 125 - \dot{n}_1}{0,4 \times 125} \Rightarrow \dot{n}_1 = 42,5 - 50 \Rightarrow \underline{\underline{\dot{n}_1 = 7,5 \text{ kmol de } C_2H_4}}$$

O rendimento do etanol é,

$$rend_{C_3H_5OH} = \frac{\dot{n}_3}{\dot{n}_{2,o}} = \frac{\text{Moles formados do produto desejado}}{\text{Moles que deveriam ser formados}}$$

$$0,75 = \frac{\dot{n}_3}{\dot{n}_2} = \frac{\dot{n}_3}{44,5} \Rightarrow \underline{\underline{\dot{n}_3 = 33,375 \text{ kmol/h}}}$$

Devem-se fazer os balanços molares por elementos (espécies atômicas):

Balanço para o inerte:

$$\dot{n}_5 \left(\frac{\text{kmol de I}}{h} \right) = (0,244) \times \left(125 \frac{\text{kmol}}{h} \right) = 30,5 \frac{\text{kmol}}{h} \Rightarrow \underline{\underline{\dot{n}_5 = 30,5 \frac{\text{kmol}}{h}}}$$

Balanço para o "C" atômico:

$$(2) \times (125) \times (0,4) = 2\dot{n}_1 + 2\dot{n}_3 + 4\dot{n}_4$$

$$100 = 2(7,5) + 2(33,375) + 4\dot{n}_4$$

$$100 = 15 + 66,75 + 4\dot{n}_4 \Rightarrow \underline{\underline{\dot{n}_4 = 4,575 \text{ kmol/h}}}$$

Balanço para o "H" atômico:

$$(4) \times (125) \times (0,4) + (2) \times (0,356) \times (0,4) = 4\dot{n}_1 + 2\dot{n}_2 + 6\dot{n}_3 + 10\dot{n}_4$$

$$200 + 89 = 4(7,5) + 2\dot{n}_2 + 6(33,375) + 10(4,575)$$

$$\dot{n}_2 = \frac{289 - 30 - 200,25 - 45,75}{2} = 6,5 \text{ kmol/h}$$

$$\underline{\underline{\dot{n}_2 = 6,5 \text{ kmol/h}}}$$

Portanto, todas as vazões de saída foram determinadas:

$$\dot{n}_1 = 7,5 \text{ kmol de } C_2H_4 \quad \dot{n}_2 = 6,5 \text{ kmol/h} \quad \dot{n}_3 = 33,375 \frac{\text{kmol}}{h} \quad \dot{n}_4 = 4,575 \text{ kmol/h} \quad \dot{n}_5 = 30,5 \frac{\text{kmol}}{h}$$



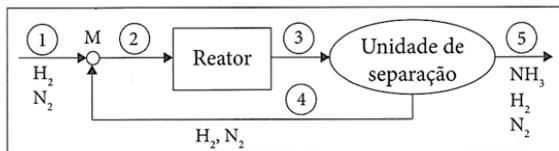
Pesquise mais

Veja mais sobre balanços com reação química no vídeo: <<https://www.youtube.com/watch?v=IH-hzRrb3Ss>>. Acesso em: 31 out. 2016.

Sem medo de errar

Como *trainee* recém-contratado de uma importante indústria química, você está realizando a análise do processo de produção de amônia e verificou que entre as operações unitárias envolvidas estão um reator químico e uma unidade de separação. A conversão de processo em relação ao hidrogênio é 95%. A unidade de separação recicla 98% do H_2 e a taxa de produção de amônia por dia para este processo é de 10 toneladas/dia. Para encontrar a quantidade de reagente reciclado e a conversão no reator, você poderia utilizar os conceitos de balanço material para processos reativos. A Figura 3.7 apresenta o fluxograma do processo de produção de amônia.

Figura 3.7 | Fluxograma do processo de produção de amônia



Fonte: Badino Júnior e Cruz (2010, p. 103).

Resolução

- 1º Passo: alterar a base da produção em ton/dia para kmol/h:

$$\dot{n}_{NH_3,5} = \frac{10 \text{ ton } NH_3}{\text{dia}} \times \left(\frac{1 \text{ ton mol } NH_3}{17 \text{ ton } NH_3} \right) \times \left(\frac{10^3 \text{ kmol}}{1 \text{ ton mol}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ dia}}{24 \text{ h}} \right) = 24,51 \frac{\text{kmol } NH_3}{h}$$

- 2º Passo: calcular a conversão de processo em relação ao hidrogênio: para isso pode-se calcular a relação entre o hidrogênio que entra na corrente 1 e sai na corrente 5. Assim, 95% de conversão do H_2 no processo implica em 5% não convertido.

$$X_{\text{processo}} = \frac{\dot{n}_{H_2,1} - \dot{n}_{H_2,5}}{\dot{n}_{H_2,1}} \Rightarrow 0,95 = \frac{\dot{n}_{H_2,1} - \dot{n}_{H_2,5}}{\dot{n}_{H_2,1}} \Rightarrow 0,95\dot{n}_{H_2,1} - \dot{n}_{H_2,1} = -\dot{n}_{H_2,5} \Rightarrow \dot{n}_{H_2,5} = 0,05\dot{n}_{H_2,1}$$

- 3º Passo: estabelecer relações entre as correntes. Além das correntes 1 e 5, o H_2 está presente nas correntes 3 e 4, portanto uma relação entre as correntes deve ser estabelecida. Como a unidade de separação recicla 98% do H_2 que não foi convertido no reator, os 2% restantes saem na corrente de produto (corrente 5), então:

$$\dot{n}_{H_2,4} = 0,98\dot{n}_{H_2,3} \text{ (vazão de reciclo, com base em } H_2) \text{ e } \dot{n}_{H_2,5} = 0,02\dot{n}_{H_2,3}$$

- 4º Passo: calcular as vazões molares de hidrogênio nas correntes 4 e 5. Os balanços molares por elementos ou espécies atômicas, e por espécies moleculares

poderiam ser usados, segue o balanço por espécies atômicas a seguir para o hidrogênio atômico:

$$\begin{array}{l}
 \text{sai}(H) = \text{Entra}(H) \\
 24,51 \left(\frac{\text{kmol NH}_3}{h} \right) \times \left(\frac{3 \text{ kmol H}_2}{1 \text{ kmol NH}_3} \right) + \dot{n}_{H_{2,5}} \left(\frac{\text{kmol H}_2}{h} \right) \times \left(\frac{2 \text{ kmol H}_2}{1 \text{ kmol H}_2} \right) = \dot{n}_{H_{2,1}} \left(\frac{\text{kmol H}_2}{h} \right) \times \left(\frac{2 \text{ kmol H}_2}{1 \text{ kmol H}_2} \right) \\
 H \quad 73,53 + 2 \cdot \dot{n}_{H_{2,5}} = 2 \cdot \dot{n}_{H_{2,1}}, \text{ mas } \dot{n}_{H_{2,5}} = 0,05 \cdot \dot{n}_{H_{2,1}} \Rightarrow 73,53 + 2 \cdot (0,05) \dot{n}_{H_{2,1}} = 2 \cdot \dot{n}_{H_{2,1}} \Rightarrow \dot{n}_{H_{2,1}} = 38,7 \frac{\text{kmol H}_2}{h} \\
 \text{como } \dot{n}_{H_{2,5}} = 0,05 \cdot \dot{n}_{H_{2,1}} \Rightarrow \dot{n}_{H_{2,5}} = 0,05 \times 38,7 \Rightarrow \dot{n}_{H_{2,5}} = 1,94 \frac{\text{kmol H}_2}{h}
 \end{array}$$

Através da relação encontrada no terceiro passo, é possível encontrar a vazão molar de hidrogênio na corrente 4.

$$\begin{aligned}
 \dot{n}_{H_{2,5}} = 0,02 \dot{n}_{H_{2,3}} \Rightarrow \dot{n}_{H_{2,3}} &= \frac{1,94}{0,02} = 97 \frac{\text{kmol H}_2}{h} \Rightarrow \dot{n}_{H_{2,3}} = 97 \frac{\text{kmol H}_2}{h} && \text{Logo,} \\
 \dot{n}_{H_{2,4}} = 0,98(97) \Rightarrow \dot{n}_{H_{2,4}} &= 95,1 \frac{\text{kmol H}_2}{h} . \text{ Sendo a corrente 4 a vazão de reciclo.}
 \end{aligned}$$

- 5° Passo: calcular a conversão no reator e a taxa de reciclo:

$$X_{H_2} = \frac{\dot{n}_{H_{2,2}} - \dot{n}_{H_{2,3}}}{\dot{n}_{H_{2,2}}} , \text{ precisamos achar a vazão de } H_2 \text{ na corrente 2, entrada}$$

do reator, que pode ser calculada pelo balanço no subsistema misturador (Ponto M), em que:

$$\dot{n}_{H_{2,1}} + \dot{n}_{H_{2,4}} = \dot{n}_{H_{2,2}} \Rightarrow \dot{n}_{H_{2,2}} = 38,7 + 95,1 = 133,8 \Rightarrow \dot{n}_{H_{2,2}} = 133,8 \frac{\text{kmol H}_2}{h}$$

Assim sendo, podemos calcular a conversão da reação:

$$X_{H_2} = \frac{\dot{n}_{H_{2,2}} - \dot{n}_{H_{2,3}}}{\dot{n}_{H_{2,2}}} = \frac{133,8 - 97,0}{133,8}$$

$$\underline{\underline{X_{H_2} = 0,275 \text{ ou } 27,5\%}}$$

A taxa de reciclo com base no reagente limitante é a relação entre a vazão de reciclo e a vazão que deixa o processo,

$$\text{taxa de reciclo} = \frac{\dot{n}_{H_{2,4}}}{\dot{n}_{H_{2,5}}} = \frac{95,1 \frac{\text{kmol H}_2}{h}}{1,94 \frac{\text{kmol H}_2}{h}} \Rightarrow \underline{\underline{\text{taxa de reciclo} = 49}}$$

Dessa forma, podemos observar que a corrente de reciclo é de extrema importância no processo, pois devolve ao processo o reagente não convertido na reação, evitando o descarte indevido dos reagentes.

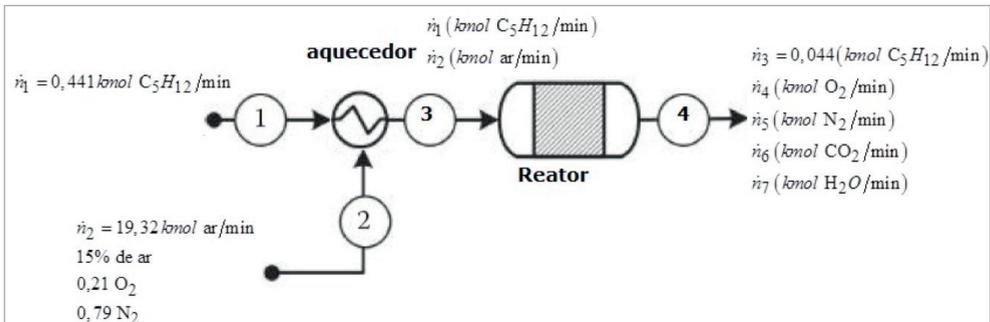
Avançando na prática

Aquecimento e combustão do n-pentano líquido

Descrição da situação-problema

Uma vazão de 0,441 kmol/min de n-pentano líquido flui para dentro de uma câmara de aquecimento, onde evapora junto com uma corrente de ar com 15% de excesso da quantidade necessária para queima completa do n-pentano. O gás aquecido alimenta uma câmara de combustão, onde ocorre a queima do n-pentano que pode ser representada pela equação química: $C_5H_{12} + 8O_2 \rightarrow 5CO_2 + 6H_2O$. O n-pentano não processado sai da câmara a uma vazão de 0,044 kmol/min, conforme Figura 3.8. Como a conversão de processo pode ser calculada? Qual será a vazão dos outros gases que deixam a câmara de combustão? Fonte: (FELDER; ROUSSEAU, 2011, p. 197).

Figura 3.8 | Esquema do processo de combustão do n-pentano



Fonte: adaptada de Ghasem e Henda (2015, p. 379).

Resolução da situação-problema

Para que a conversão da reação seja calculada é necessário relacionar as correntes 1 e 4:

$$X_{C_5H_{12}} = \frac{\dot{n}_{C_5H_{12},1} - \dot{n}_{C_5H_{12},4}}{\dot{n}_{C_5H_{12},1}} = \frac{0,441 - 0,044}{0,441} \times 100 = 90\% \text{ } C_5H_{12} \text{ convertido}$$

Dada a vazão molar de saída do pentano e aplicando o balanço por conversão fracional, bem como considerando o percentual de ar em excesso, podemos calcular as vazões molares de saída da câmara de combustão:

$$\dot{n}_4 = 0,441 \frac{\text{kmol } C_5H_{12}}{\text{min}} \left| \frac{(0,15)(8 \text{ kmol } O_2)}{\text{kmol } C_5H_{12}} \right| = 0,528 \frac{\text{kmol } O_2}{\text{min}}$$

$$\dot{n}_5 = 19,28 \frac{\text{kmol } ar}{\text{min}} \left| \frac{0,79(\text{kmol } N_2)}{1 \text{ kmol } ar} \right| = 15,23 \frac{\text{kmol } N_2}{\text{min}}$$

$$\dot{n}_6 = (0,9)(0,441) \frac{\text{kmol } C_5H_{12}}{\text{min}} \left| \frac{(5 \text{ kmol } CO_2)}{\text{kmol } C_5H_{12}} \right| = 1,98 \frac{\text{kmol } CO_2}{\text{min}}$$

$$\dot{n}_7 = (0,9)(0,441) \frac{\text{kmol } C_5H_{12}}{\text{min}} \left| \frac{(6 \text{ kmol } H_2O)}{\text{kmol } C_5H_{12}} \right| = 2,38 \frac{\text{kmol } H_2O}{\text{min}}$$

Faça valer a pena

1. Metanol, conhecido também como álcool metílico, pode ser desidrogenado em um reator catalítico com a finalidade de se produzir formaldeído, conforme a equação química: $CH_3OH \rightarrow HCHO + H_2$. O formaldeído formado no reator é separado do metanol e do hidrogênio que não reagiram.

Se a conversão do processo é de 60%, a quantidade de metanol requerida que alimenta o processo para uma taxa de produção do formaldeído de 30 kmol/h é:

- 100 kmol/h.
- 80 kmol/h.
- 50 kmol/h.
- 10 kmol/h.
- 60 kmol/h.

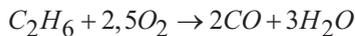
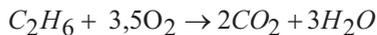
2. Para uma determinada produção de amônia, a alimentação de um reator contínuo é composta por 100 mol/s de nitrogênio, 300 mol/s de hidrogênio e 1 mol/s de argônio. A reação de formação da amônia pode ser representada pela seguinte equação química: $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$.

Se a conversão fracional do hidrogênio no reator é de 60%, a vazão molar de amônia produzida é:

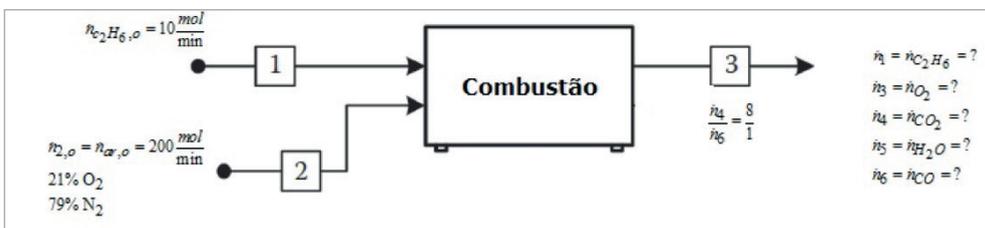
- 401 mol/s.
- 300 mol/s.
- 1 mol/s.
- 100 mol/s.
- 120 mol/s.

3. Etano é queimado com ar em um reator de combustão contínuo em estado estacionário para produzir uma mistura de monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO_2) e água (H_2O). A alimentação do reator contém 10 mol C_2H_6 /min e 200 mol ar/min. A conversão percentual do etano é de 80%, e o gás de saída do reator contém uma razão molar de 8 mol CO_2 /1 mol CO.

Considerando o fluxograma de processo dado a seguir e a reação química,



Fluxograma do processo de combustão do etano



Fonte: adaptado de Ghasem e Henda (2015, p. 178).

A vazão molar do etano e a total na corrente de produto são:

- 21 mol/min e 32,99 mol/min.
- 21 mol/min e 20 mol/min.
- 2 mol/min e 16,99 mol/min.
- 200 mol/min e 179 mol/min.
- 2 mol/min e 20 mol/min.

Seção 2.3

Aplicações de balanço de massa com reação química em reações múltiplas

Diálogo aberto

No decorrer da presente unidade de ensino, aprendemos métodos para a execução do balanço de massa em processos com reações químicas, bem como os conceitos envolvidos em reações de combustão. Nesta seção serão explorados diversos exemplos que envolvem todos os conceitos abordados nas seções anteriores dessa unidade, em especial, as reações de combustão e as reações múltiplas, além dos conceitos e das terminologias de resolução destes problemas estudados anteriormente. Os problemas serão resolvidos utilizando-se a ferramenta *Solver* do Excel para resolver os balanços. Serão revisitados conceitos de conversão, balanços nas espécies atômicas, reagente limitante e em excesso, % em excesso. A partir dos principais conceitos e variáveis envolvidas em processos químicos, bem como das metodologias para os cálculos de balanço de massa com reações químicas aprendidos em seções anteriores, você será capaz de identificar e analisar balanços de massa em processos em regime estacionário com reações químicas e aplicar a ferramenta *Solver* do Excel para resolver estes balanços. Os problemas abordados farão com que você, caro aluno, desenvolva um raciocínio crítico, analítico, colaborativo e de flexibilidade na solução dos problemas com a abordagem numérica oferecida pelo uso do *Solver*.

Você está muito satisfeito e empenhado na sua função como *trainee* de uma importante empresa fabricante de ácido acético e amônia. Nesse momento, o seu gestor solicitou que você apresente um relatório técnico referente à simulação e avaliação realizada por você sobre o processo de queima do hidrogênio junto com o nitrogênio para produzir amônia em um reator catalítico, a partir das quantidades estequiométricas da reação e das quantidades alimentadas de nitrogênio e hidrogênio. Esse relatório deverá apresentar uma análise de conhecimento do processo acerca de diversas questões que devem ser respondidas e acrescentadas no relatório, tais como: saber sobre o reagente limitante, em excesso, a conversão

de nitrogênio (N_2) e de hidrogênio (H_2), a percentagem (%) em excesso do reagente em excesso e as composições molares das correntes de entrada e de saída do reator. Como a ferramenta *Solver* do Excel poderá auxiliar você na confecção desse relatório? Quais conceitos deverão ser inseridos na ferramenta para que você obtenha a análise correta?

Pronto para encerrar mais uma unidade de ensino e acumular mais conhecimentos? Vamos lá!

Não pode faltar

Nesta seção serão explorados diversos exemplos que envolvem todos os conceitos abordados nas seções anteriores, e em especial serão tratadas as reações de combustão e reações múltiplas abordadas na Seção 3.2, além dos conceitos e das terminologias de resolução destes problemas estudados anteriormente. Os problemas serão resolvidos utilizando-se da ferramenta *Solver* para resolver os balanços.

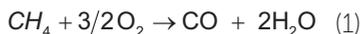


Exemplificando

Exemplos de reações de combustão e de múltiplas reações assistidos por computador (Excel)

Combustão incompleta do metano

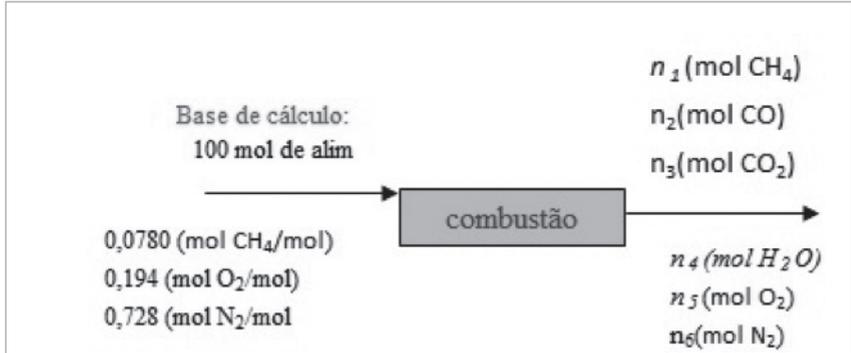
O metano é queimado com ar em um reator contínuo no estado estacionário para produzir uma mistura de monóxido de carbono, dióxido de carbono e água. As reações envolvidas são:



A alimentação contém 7,80% molar de CH_4 , 19,4% de O_2 e 72,8% de N_2 . A conversão do metano é de 90% e o gás que sai do reator contém 8 moles CO_2 /mol CO. Calcule a composição molar da corrente de produto usando balanços nas espécies atômicas e resolva o balanço usando o *Solver* do Excel (adaptado de FELDER; ROUSSEAU, 2011, p. 115).

Solução analítica: Base: 100 moles de alimentação

Figura 3.9 | Representação para a combustão no metano



Fonte: elaborada pelo autor.

Antes de escrever os balanços, a conversão especificada do metano pode ser usada para determinar n_{CH_4} .

Conversão de 90% do Metano:

$$n_{CH_4} = 0,100(7,80 \text{ mol } CH_4 \text{ alimentado}) = \mathbf{0,780 \text{ moles } CH_4}$$

Balanço na espécie molécula não reativa (N_2).

Balanço de N_2 (entrada = saída):

$$\mathbf{n_{N_2} = 72,8 \text{ moles } N_2}$$

Balanço de C:

$$\frac{7,8 \text{ moles } CH_4}{1} \left| \frac{1 \text{ mol } C}{1 \text{ mol } CH_4} \right| = \frac{0,78 \text{ moles } CH_4}{1} \left| \frac{1 \text{ mol } C}{1 \text{ mol } CH_4} \right| + \frac{n_{CO} \text{ moles } CO}{1} \left| \frac{1 \text{ mol } C}{1 \text{ mol } CO} \right| + \frac{8n_{CO} \text{ moles } CO_2}{1} \left| \frac{1 \text{ mol } C}{1 \text{ mol } CO_2} \right|$$

$$\Rightarrow \mathbf{n_{CO} = 0,780 \text{ moles de CO}}$$

$$\mathbf{n_{CO_2} = (0,780) \times 8 \text{ moles de } CO_2 = 6,24 \text{ mol de } CO_2}$$

Balanço de H:

$$\frac{7,80 \text{ moles } CH_4}{1} \left| \frac{4 \text{ mol } H}{1 \text{ mol } CH_4} \right| = \frac{0,78 \text{ moles } CH_4}{1} \left| \frac{4 \text{ mol } H}{1 \text{ mol } CH_4} \right| + \frac{n_{H_2O} \text{ moles } H_2O}{1} \left| \frac{2 \text{ mol } H}{1 \text{ mol } H_2O} \right|$$

$$\Rightarrow \mathbf{n_{H_2O} = 14,0 \text{ moles de } H_2O}$$

Balanço de O:

$$\frac{19,4 \text{ moles } O_2}{1} \left| \frac{2 \text{ mol } O}{1 \text{ mol } O_2} \right| = \frac{n_{O_2} \text{ moles } O_2}{1} \left| \frac{2 \text{ mol } O}{1 \text{ mol } O_2} \right| + \frac{0,78 \text{ moles } CO}{1} \left| \frac{1 \text{ mol } O}{1 \text{ mol } CO} \right|$$

$$+ \frac{6,24 \text{ moles } CO_2}{1} \left| \frac{2 \text{ mol } O}{1 \text{ mol } CO_2} \right| + \frac{14,0 \text{ moles } H_2O}{1} \left| \frac{1 \text{ mol } O}{1 \text{ mol } H_2O} \right|$$

$$\Rightarrow \mathbf{n_{O_2} = 5,75 \text{ moles de } O_2}$$

Resolução no Excel:

As quantidades molares deste processo podem ser determinadas pela resolução simultânea → Solver. Será adotada a resolução simultânea → Solver, já que a ferramenta Solver foi explorada nas seções anteriores, e a análise sequencial necessitaria do método de tentativa e erro.

Sejam os balanços preparados para a resolução simultânea usando o Solver:

Considerando: 1 – CH_4 ; 2 – CO ; 3 – CO_2 ; 4 – H_2O ; 5 – O_2 e 6 – N_2

Balanço para n_1

$$\text{Conversão de 90\% do Metano: } 0,78 - n_1 = 0$$

$$\text{Balanço para } n_2: 7,8 - n_1 - n_2 - 8*n_2 = 0$$

$$\text{Balanço para } n_3: -n_3 + 8*n_2 = 0$$

$$\text{Balanço para } n_4: 31,2 - 4*n_1 - 2*n_4 = 0$$

$$\text{Balanço para } n_5: 38,8 - n_1 - 2*n_3 - n_4 - 2*n_5 = 0$$

$$\text{Balanço para } n_6: \text{Balanço na espécie molécula não reativa (} N_2 \text{)}$$

$$72,8 - n_6 = 0$$

Construir uma planilha e selecionar a faixa A1: L2 e pressionar CTRL+SHIFT+F3

Digitar a fórmula " $=0,78 - n_1$ " em G2

Digitar a fórmula " $=7,8 - n_1 - n_2 - 8*n_2$ " em H2

Digitar a fórmula " $= -n_3 + 8*n_2$ " em I2

Digitar a fórmula " $=31,2 - 4*n_1 - 2*n_4$ " em J2

Digitar a fórmula " $=38,8 - n_1 - 2*n_3 - n_4 - 2*n_5$ " em K2

Digitar a fórmula " $=72,8 - n_6$ " em L2

Figura 3.10 | Aplicação da combustão do metano em uma planilha eletrônica

f2.		f2 = 7,8*n1 - n2 - 8*n2										
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	n1.	n2.	n3.	n4.	n5.	n6.	f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.
2		0	0	0	0	0	0,78	7,8	0	31,2	38,8	72,8

Preencher a caixa de diálogo do Solver

f1.		f1 = 0,78*n1										
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	n1.	n2.	n3.	n4.	n5.	n6.	f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.
2		0	0	0	0	0	0,78	7,8	0	31,2	38,8	72,8

Parâmetros do Solver

Definir célula de destino:

Igual a: Máx MÍN Valor de:

Células variáveis:

Submeter às restrições:

f2. = f1.

f3. = f1.

f4. = f1.

f5. = f1.

f6. = f1.

Fonte: elaborada pela autora.

Resposta:

Figura 3.11 | Resolução apresentada pela ferramenta Solver para a combustão do metano

f1.		f1					
	A	B	C	D	E	F	
1	n1.	n2.	n3.	n4.	n5.	n6.	
2		0,78	0,78	6,24	14,04	5,75	72,8

	G	H	I	J	K	L
f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.	
	0	0	0	0	0	-1E-06

Fonte: elaborada pela autora.



Assimile

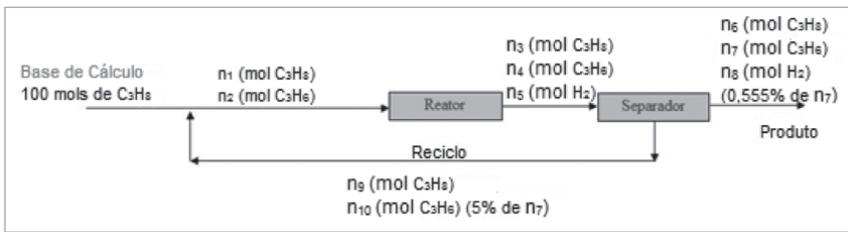
Na hora em que for preparar os balanços para a resolução simultânea usando o Solver, lembre-se de que as entradas serão sempre positivas e as saídas, negativas.



Exemplificando

Seja a desidrogenação do propano para forma propileno em um reator catalítico, cuja reação é: $C_3H_8 \rightarrow C_3H_6 + H_2$. O processo precisa ser projetado para uma conversão de 95% do propano. Os produtos da reação são separados em duas correntes: a primeira, que contém H_2 , C_3H_8 e 0,555% do propano que deixa o reator, é considerada a corrente de produto; a segunda, que contém o resto do propano não reagido e 5% do propileno da corrente do produto, é reciclada para o reator. Calcule a composição do produto, a razão (moles reciclados)/(moles de alimentação virgem) e a conversão no reator (adaptado de FELDER; ROUSSEAU, 2011, p. 120).

Figura 3.12 | Fluxograma do processo



Fonte: elaborada pela autora.

Resolução analítica:

95% de conversão no processo do propano: (5% não convertido)

$n_6 = 0,05 \times (100) = 5 \text{ moles } C_3H_8$

Balço de C no processo global:

$$\frac{100 \text{ moles } C_3H_8}{1 \text{ mol } C_3H_8} \left| \frac{3 \text{ moles C}}{1 \text{ mol } C_3H_8} \right. = \frac{n_6 \text{ moles } C_3H_8}{1 \text{ mol } C_3H_8} \left| \frac{3 \text{ moles C}}{1 \text{ mol } C_3H_8} \right. + \frac{n_7 \text{ moles } C_3H_6}{1 \text{ mol } C_3H_6} \left| \frac{3 \text{ moles C}}{1 \text{ mol } C_3H_6} \right.$$

$\Rightarrow n_7 = 95 \text{ moles } C_3H_6$

Balço de H no processo global:

$$\frac{100 \text{ moles } C_3H_8}{1 \text{ mol } C_3H_8} \left| \frac{8 \text{ moles H}}{1 \text{ mol } C_3H_8} \right. = \frac{n_6 \text{ moles } C_3H_8}{1 \text{ mol } C_3H_8} \left| \frac{8 \text{ moles H}}{1 \text{ mol } C_3H_8} \right. + \frac{n_7 \text{ moles } C_3H_6}{1 \text{ mol } C_3H_6} \left| \frac{6 \text{ moles H}}{1 \text{ mol } C_3H_6} \right. + \frac{n_8 \text{ moles } H_2}{1 \text{ mol } H_2} \left| \frac{2 \text{ moles H}}{1 \text{ mol } H_2} \right.$$

$\Rightarrow n_8 = 95 \text{ moles } H_2$

Portanto, o produto contém:

5 moles C_3H_8	\Rightarrow	2,6% C_3H_8
95 moles C_3H_6		48,7% C_3H_6
95 moles H_2		48,7% H_2

195 moles totais

Relações entre as variáveis do separador:

$$n_6 = 0,00555 \times n_3 \quad \Rightarrow \quad n_3 = \mathbf{900 \text{ moles } C_3H_8}$$

$$n_{10} = 0,05 \times n_7 \quad \Rightarrow \quad n_7 = \mathbf{4,75 \text{ moles } C_3H_6}$$

Balço de propano no separador:

$$n_3 = n_6 + n_9 \quad \Rightarrow \quad n_9 = \mathbf{895 \text{ moles } C_3H_8}$$

Poderíamos continuar escrevendo balanços em torno do separador para determinar os valores de n_4 e n_5 , mas não há necessidade disso, já que estes valores não são solicitados pelo enunciado do problema. O único valor que falta determinar é n_1 , que pode ser calculado através do balanço de propano no ponto de mistura.

Balço de propano no ponto de mistura:

$$100 + n_9 = n_1 \quad \Rightarrow \quad n_1 = \mathbf{995 \text{ moles } C_3H_8}$$

Já temos todas as variáveis necessárias. As quantidades desejadas são:

$$\text{Razão de reciclo: } \frac{n_9 + n_{10}}{100} \Rightarrow \mathbf{9,0} \frac{\text{moles de reciclo}}{\text{moles de alimentação virgem}}$$

$$\text{Conversão no processo: } \frac{n_1 - n_3}{n_1} \times 100 \Rightarrow \mathbf{9,6\%}$$

Resolução no Excel

As vazões deste processo podem ser determinadas de duas maneiras:

Resolução sequencial \rightarrow atingir meta ou resolução simultânea \rightarrow *Solver*

Será adotada a resolução simultânea \rightarrow *Solver*, já que a ferramenta *Solver* foi explorada nas seções anteriores e a análise sequencial necessitaria do método de tentativa e erro.

Sejam os balanços para a resolução simultânea:

Balço de massa no processo global

95% de conversão no processo do propano

$$n_6 - 0,05 \cdot 100 = 0$$

Balço de C global

$$300 - 3 \cdot n_6 - 3 \cdot n_7 = 0$$

Balço de H global

$$800 - 8 \cdot n_6 - 6 \cdot n_7 - 2 \cdot n_8 = 0$$

Relação de dados entre as variáveis do separador

$$n_6 - 0,00555 * n_3 = 0$$

$$n_{10} - 0,0500 * n_7 = 0$$

Balanço de massa no separador

$$n_3 - n_6 - n_9 = 0$$

Balanço de massa do propano no ponto de mistura

$$100 + n_9 - n_1 = 0$$

Construa uma planilha conforme a Figura 3.13.

Figura 3.13 | Representação da construção da planilha

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	n1.	n3.	n6.	n7.	n8.	n9.	n10.	f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.	f7.
2														

Fonte: elaborada pela autora.

Selecionar a faixa A1: N2 e para converter rótulos existentes em nomes, você pode pressionar CTRL+SHIFT+F3 ou na guia Fórmulas, no grupo Definir Nomes, clique em Criar a partir da Seleção.

Digitar a fórmula "`=n6.- 0,05*100`" em H2

Digitar a fórmula "`= 300 - 3*n6.- 3*n7.`" em I2

Digitar a fórmula "`=800-8*n6.-6*n7.-2*n8.`" em J2

Digitar a fórmula "`=n6.-0,00555*n3.`" em K2

Digitar a fórmula "`=n10.-0,05*n7.`" em L2

Digitar a fórmula "`=n3.-n6.-n9.`" em M2

Digitar a fórmula "`=100+n9.-n1.`" em N2

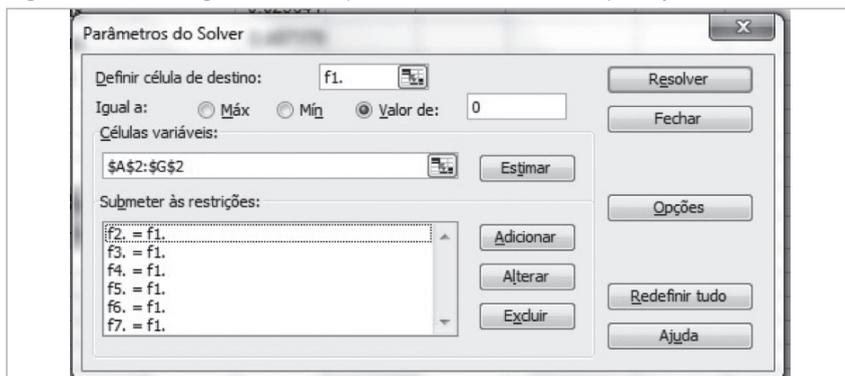
Figura 3.14 | Representação da inserção das equações na planilha

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	n1.	n3.	n6.	n7.	n8.	n9.	n10.	f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.	f7.
2								-5	300	800	0	0	0	100

Fonte: elaborada pela autora.

Preencher a caixa de diálogo do *Solver*, conforme Figura 3.15.

Figura 3.15 | Diálogo do Solver preenchido conforme aplicação



Fonte: elaborada pela autora.

Respostas

Figura 3.16 | Representação do resultado da aplicação

	A	B	C	D	E	F	G
1	n1.	n3.	n6.	n7.	n8.	n9.	n10.
2	995,9011	900,9011	5	95	95	895,9011	4,75
	H	I	J	K	L	M	N
	f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.	f7.
	0	0	-4,8E-13	-1E-06	0	0	0
5	Composição dos produtos:				УС3Н8		0,025641
6					УС3Н6		0,487179
7					УН2		0,487179
8							
9							
10							
11	Conversão no reator=(n1.-n3.)/n1.*100						
12					Razão de reciclo=		9,01
13		C₃H₈			(n9.+n10.)/100		
14		9,5 %					

Fonte: elaborada pela autora.



Refleta

São usadas duas definições para a conversão dos reagentes. Aqui foi usado, no item *Exemplificando*, a conversão do propano no processo. E se fosse dada a conversão do propano no reator, como seria definida a conversão no reator?



Pesquise mais

Quer saber mais sobre balanços com reações químicas e reciclo? Veja o vídeo: <<https://www.youtube.com/watch?v=B41GUyQr2YY>>. Acesso em: 14 nov. 2016.

Sem medo de errar

Na posição de um trainee de uma importante empresa fabricante de ácido acético e amônia, você deverá entregar um relatório técnico em planilha eletrônica ao seu gestor, apresentando uma análise de conhecimento do processo acerca de diversas questões que devem ser respondidas e acrescentadas no relatório, tais como: saber sobre o reagente limitante, em excesso, a conversão de nitrogênio (N_2) e de hidrogênio (H_2), a percentagem (%) em excesso do reagente em excesso e as composições molares das correntes de entrada e de saída do reator.

O reator químico envolvido no processo é alimentado com nitrogênio e hidrogênio, produzindo amoníaco. A reação química ocorre segundo a equação que se segue: $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$. O fabricante do catalisador sempre recomenda certa vazão de gás inerte na entrada do reator. São alimentados no reator 113,4 mol de N_2/min , 378 mol de H_2/min para produzir 200 mol de NH_3/min .

Solução:

- Criar uma planilha, conforme a Figura 3.17.

Figura 3.17 | Aplicação dos dados da formação de amônia em uma planilha eletrônica

	A	B	C	D	E
2					
3		N_2	H_2	NH_3	Total
4	Entrada	113,4	378	0	
5	Produção	0	0	200	
6	Reação				
7	Saída			200	

Fonte: elaborada pela autora.

- Digitar a fórmula: =SOMA(B4:D4) em **E4**.
- Digitar a fórmula: =D5/2 em **B6**.
- Digitar a fórmula = B4-B6 em **B7**.

- Digitar a fórmula: =3*B6 em **C6**.
- Digitar a fórmula: =SOMA(B5:D5) em **E5**.
- Digitar a fórmula: =SOMA (B6:D6) em **E6**.
- Digitar a fórmula: =SOMA(B7:D7) em **E7**.
- **Criar planilha para conversão molar.**
- Preencher a planilha
- Razão estequiométrica/alimentação.
- Determinar reagente limitante (lógica).

(SE(Alim.>Esteq.; "H₂"; "N₂")

Os resultados podem ser observados conforme a planilha eletrônica representada pela Figura 3.18.

Figura 3.18 | Representação dos resultados em planilha eletrônica

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	Matriz Estequiométrica						Composição molar				
2											
3		N₂	H₂	NH₃	Total			N₂	H₂	NH₃	Total
4	Entrada	113,4	378	0	491,4		Entrada	23,1	76,9	0	100
5	Produção	0	0	200	200		Saida	4,60	26,77	68,63	100
6	Reação	100	300	0	400						
7	Saída	13,4	78	200	291,4						
8											
9											
10		Conversão			Relação estequiométrica			N₂/H₂	0,33		
11		N₂	H₂		Alimentação			N₂/H₂	0,30		
12		88,2	79,4								
13											
14											
15		Reagente limitante		Reagente em excesso							
16		N2		FALSO	H ₂						
17											
18											
19	% de excesso do reagente em excesso										
20		11,11	Hidrogênio								

Fonte: elaborada pela autora.

Você poderá apresentar o relatório técnico ao seu gestor no formato de uma planilha eletrônica, contendo um resumo dos resultados obtidos através da sua análise, conforme a Figura 3.19.

Figura 3.19 | Resumo dos resultados

	A	B	C	D	E	F	G	H
13								
14	Espécie	Coef. Esteq.	Entrada	yi ent	Saída	yi sai		Conv
15	N2	-1	113,4	0,231	13,4	0,046		0,882
16	H2	-3	378	0,769	78	0,268		0,794
17	NH3	2	0	0,000	200	0,686		
18	TOTAL		491,4	1,000	291,4	1,000		
19								
20	N2:H2 est	0,333		Reagente em excesso	% excesso			
21	N2:H2alim	0,3		H2		11,111		
22								
23								

Fonte: elaborada pela autora.

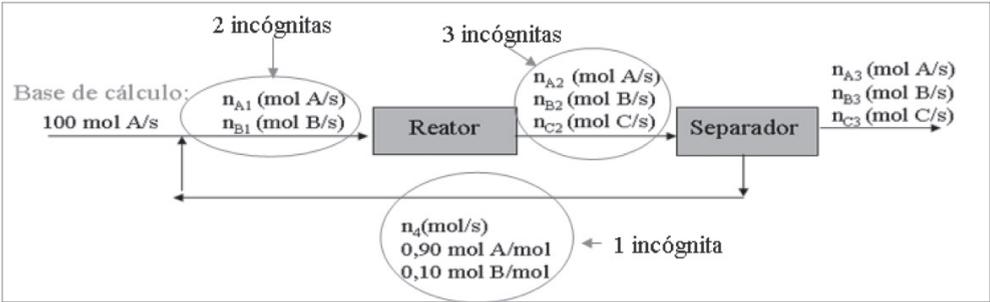
Avançando na prática

Balanço de massa para o processo de desidrogenação do isobutano a isobuteno

Descrição da situação-problema

Você foi encarregado de simular o processo de desidrogenação do isobutano a isobuteno. A desidrogenação em fase gasosa do isobutano a isobuteno acontece segundo a reação química: $C_4H_{10} \rightarrow C_4H_8 + H_2$, sendo conduzida em um reator contínuo. Uma corrente de isobutano puro (a alimentação virgem para o processo) é misturada com uma corrente de reciclo contendo 90% molar de isobutano e o resto de isobuteno, e a corrente combinada passa a um reator catalítico. O efluente deste processo passa através de um processo de separação de etapas múltiplas: uma corrente de produto contendo todo o hidrogênio e 1% do isobutano que sai do reator, bem como algum isobuteno, é enviada a outra parte da planta para processamento adicional, e a outra corrente de produto é reciclada ao reator. A conversão de isobutano no reator é 35%. Considerando: A – $i-C_4H_{10}$; B – $i-C_4H_8$ e C – H_2 (adaptado de FELDER; ROUSSEAU 2011, p. 449).

Figura 3.20 | Fluxograma do processo



Fonte: elaborada pela autora.

Resolução da situação-problema

Sejam os balanços para a resolução simultânea:

- Balanço de massa no reator

Para A	Para B	Para C
$n_{A1} - n_{A2} - 0,35 * n_{A1} = 0$	$n_{B1} + 0,35 * n_{A1} - n_{B2} = 0$	$0,35 * n_{A1} - n_{C2} = 0$

- Relação de conversão: $n_{A2} - n_{A1} * (1 - 0,35) = 0$

- Balanço de massa no separador

Para A	Para B	Para C
$n_{A2} - n_{A3} - 0,9 * n_4 = 0$	$n_{B2} - n_{B3} - (1 - 0,9) * n_4 = 0$	$n_{C2} - n_{C3} = 0$

- Especificação do processo: $n_{A3} - 0,01 * n_{A2} = 0$

- Balanço de massa no ponto de mistura

Para A	Para B
$100 + 0,90 n_4 - n_{A1} = 0$	$0,10 n_4 - n_{B1} = 0$

Selecionar a faixa A1:S2 e pressionar CTRL+SHIFT+F3. Posteriormente, digite as equações na sequência apresentada nas células J2 a S2 da planilha eletrônica construída previamente, conforme 3.21.

Figura 3.21 | Representação da planilha eletrônica

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S
1	nA1.	nB1.	nA2.	nB2.	nC2.	nA3.	nB3.	nC3.	n4.	f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.	f7.	f8.	f9.	f10.
2										0	0	0	0	0	0	0	0	100	0

Fonte: elaborada pela autora.

Preencha a caixa de diálogo do *Solver*, conforme já visto anteriormente nessa seção, e em seguida resolva o problema apresentado. A Figura 3.22 apresenta os resultados obtidos.

Figura 3.22 | Representação da planilha eletrônica contendo os resultados obtidos

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	nA1.	nB1.	nA2.	nB2.	nC2.	nA3.	nB3.	nC3.	n4.
2	280,5049	20,0561	182,3282	118,2328	98,17672	1,823282	98,17672	98,17672	200,561

J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S
f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.	f7.	f8.	f9.	f10.
0	0	0	0	0	0	0	-2,2E-14	-1E-06	0

Fonte: elaborada pela autora.

Faça valer a pena

1. A amônia, ou amoníaco, é utilizada como matéria-prima em diversos processos de produção, por exemplo, na produção de fertilizantes. Um reator químico é alimentado com nitrogênio e hidrogênio, produzindo amoníaco. A reação química ocorre segundo a equação que se segue: $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$.

A planilha a seguir apresenta os resultados dos cálculos feitos para descobrir na reação quem é o reagente limitante e quem está em excesso.

Matriz Estequiométrica					Composição molar		
	N ₂	H ₂	NH ₃	Total		N ₂	H ₂
Entrada	113,4	378	0	491,4	Entrada	23,1	76,9
Produção	0	0	200	200	Saida	4,60	26,77
Reação	100	300	0	400			
Saída	13,4	78	200	291,4			
Conversão				Relação estequiométrica	N ₂ /H ₂	0,33	
				Alimentação	N ₂ /H ₂	0,30	
Reagente limitante				Reagente em excesso			
N2				FALSO	H ₂		

Ao analisar a condição imposta na célula B16, conclui-se que o reagente limitante é N₂ porque:

- A célula I11 é maior à célula I10, então a razão da alimentação é maior que a razão estequiométrica.
- A célula I11 é maior ou igual à célula I10, então a razão da alimentação é maior ou igual à razão estequiométrica.
- A célula I11 é igual à célula I10, então a razão da alimentação é maior ou igual à razão estequiométrica.
- A célula I11 é menor que a célula I10, então a razão da alimentação é menor que a razão estequiométrica.
- A célula I11 é menor ou igual à célula I10, então a razão da alimentação é menor ou igual à razão estequiométrica.

2. Um reator químico é alimentado com nitrogênio e hidrogênio, produzindo amoníaco. A reação química ocorre segundo a equação que se segue: $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$.

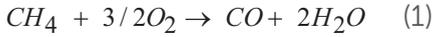
A planilha a seguir apresenta os resultados dos cálculos feitos para descobrir na reação quem é o reagente limitante e quem está em excesso.

E16 =SE(I11>I10;"N2;H2")									
A	B	C	D	E	F	G	H	I	
Matriz Estequiométrica					Composição molar				
1									
2									
3		N₂	H₂	NH₃	Total		N₂	H₂	
4	Entrada	113,4	378	0	491,4	Entrada	23,1	76,9	
5	Produção	0	0	200	200	Saída	4,60	26,77	
6	Reação	100	300	0	400				
7	Saída	13,4	78	200	291,4				
8									
9									
10	Conversão			Relação estequiométrica		N₂/H₂		0,33	
11	N₂	H₂		Alimentação		N₂/H₂		0,30	
12	88,2	79,4							
13									
14									
15	Reagente limitante			Reagente em excesso					
16	N2			FALSO		H ₂			

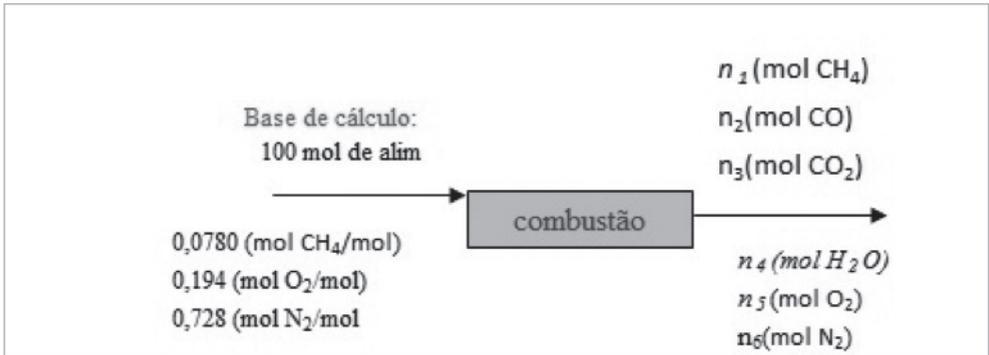
Ao analisar o resultado lógico na célula E16, conclui-se que o reagente em excesso é H_2 porque:

- A condição avaliada na célula E16, de que $I11 > I10$ é verdadeira, então H_2 está em excesso, pois $(0,3 > 0,33)$.
- A condição avaliada na célula E16, de que $I11 > I10$ é falsa, então N_2 está em excesso, pois $(0,3 < 0,33)$.
- A condição avaliada na célula E16, de que $I11 > I10$ é falsa, então NH_3 não está em excesso, pois $(0,3 < 0,33)$.
- A condição avaliada na célula E16, de que $I11 > I10$ é falsa, então NH_3 está em excesso, pois $(0,3 < 0,33)$.
- A condição avaliada na célula E16, de que $I11 > I10$ é falsa, então H_2 está em excesso, pois $(0,3 < 0,33)$.

3. O metano é queimado com ar em um reator contínuo no estado estacionário para produzir uma mistura de monóxido de carbono, dióxido de carbono e água. As reações envolvidas são:



Seja o fluxograma do processo apresentado a seguir:



Fonte: elaborada pela autora.

Sejam as planilhas de construção dos balanços pelo Solver e de suas respostas para este processo apresentadas a seguir:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	n1.	n2.	n3.	n4.	n5.	n6.	f1.	f2.	f3.	f4.	f5.	f6.
2	0	0	0	0	0	0	0,78	7,8	0	31,2	38,8	72,8

Resposta:

	A	B	C	D	E	F
1	n1.	n2.	n3.	n4.	n5.	n6.
2	0,78	0,78	6,24	14,04	5,75	72,8

Ao observar o balanço inserido na célula H2, cujo objetivo é encontrar o valor de n2, qual é o valor de n1 que deve ser inserido na célula para se obter o valor correto de n2, apresentado na célula B2?

- a) 0
- b) 6,24
- c) 7,8
- d) 0,78
- e) 14,04

Referências

BADINO JÚNIOR, A. C.; CRUZ, A. J. G. **Fundamentos de balanços de massa e energia**: um texto básico para a análise de processos químicos. São Carlos, SP: EdUFSCar, 2010.

FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W. **Princípios elementares dos processos químicos**. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

GHASEM, N.; HENDA, R. **Principles of chemical engineering processes-material and energy balances**. 2. ed. New York: CRC Press, 2015.

HIMMELBLAU, D. M.; RIGGS, J. B. **Engenharia química**: princípios e cálculos. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.

MOURA, L. F. **Excel para engenharia**: formas simples para resolver problemas complexos. São Carlos, SP: EdUFSCar, 2007.

Balanços de massa em regime transiente

Convite ao estudo

Chegamos à nossa última unidade de *Princípios de Processos Químicos*! Ao longo dos nossos estudos aprendemos a utilizar os conceitos de balanços de massa em regime permanente aplicados em uma única ou em múltiplas operações unitárias, com ou sem reação química, bem como conhecemos as correntes especiais de processo, como reciclo, purga e *by-pass*. Estudamos os conceitos de graus de liberdade e as principais variáveis aplicadas aos balanços de massa. Nesta unidade, encerraremos os nossos estudos aprendendo os conceitos de balanço de massa em regime transiente, ou seja, quando ao menos uma variável de processo apresenta alteração de suas propriedades em função do tempo.

Dessa forma, temos como competência geral a ser desenvolvida na presente disciplina conhecer e compreender os principais conceitos e variáveis envolvidas em processos químicos, bem como as metodologias para os cálculos de balanço de massa, e como competência técnica a aplicação prática dos conceitos de balanços de massa em processos em regime transiente com e sem reações químicas. Consequentemente, esta unidade está relacionada com os seguintes objetivos de aprendizagem: (1) conhecer os conceitos sobre os balanços diferenciais; (2) conhecer os conceitos sobre os balanços integrais; (3) estudar as aplicações sobre balanço de massa em regime transiente sem reação química; e (4) compreender as aplicações sobre balanço de massa em regime transiente com reação química utilizando planilhas eletrônicas.

As borrachas sintéticas são largamente empregadas na fabricação de diversos utensílios presentes em nosso cotidiano, entre elas está o Látex SBR (*Styrene-Butadiene Rubber*). Produzida utilizando estireno e butadieno como matérias-primas, essa borracha sintética é utilizada na fabricação de tapetes, colchões e na indústria de papel e celulose como revestimento. Dependendo do processo de fabricação (a quente ou a frio), a reação química responsável pela conversão dos reagentes pode apresentar um tempo de reação de aproximadamente 12 horas, e dessa forma são adotados reatores em batelada e em paralelo, o que caracteriza a presença de operações unitárias em regime transiente.

Neste contexto, você foi contratado como engenheiro químico por uma empresa fabricante de borrachas sintéticas com a finalidade de operar uma planta para a produção de Látex SBR. Sabendo que a planta foi projetada de forma que algumas operações unitárias, como os tanques de recuperação dos reagentes, os reatores e as colunas de destilação, sejam operadas em regime transiente, é necessário que você realize uma análise perante determinadas variáveis de processos com a finalidade de verificar se estão calculadas corretamente, por exemplo, o percentual de pureza dos reagentes antes da alimentação nos reatores, o tratamento da água proveniente do processo e o tempo de reação. Como aplicar os conceitos de balanço de massa em regime transiente para calcular essas variáveis?

Nesta unidade, teremos oportunidade de, mais uma vez, conhecer, compreender e aplicar as metodologias para o cálculo de balanços de massa, desta vez em regime transiente, desenvolvendo habilidades de raciocínio lógico, raciocínio crítico e de solução de problemas, iniciativa, colaboração e flexibilidade. Bons estudos!

Seção 4.1

Definição do balanço de massa em regime transiente

Diálogo aberto

Além do regime permanente, os processos químicos podem operar em batelada ou semicontínuos (semibatelada), sendo que ambos os processos, pelas suas próprias naturezas, ocorrem em regime transiente. Nesses processos realizam-se variações da massa total ou da massa dos componentes envolvidos no processo num dado volume de controle em função do tempo. A variação da massa com o tempo, dependendo do caso, traz como consequências variações de volume, densidade e composição neste volume de controle. Na aplicação dos balanços de massa total ou para um componente em processos em regime transiente, o termo de acúmulo é diferente de zero, ao contrário da aplicação em regime permanente.

Nesta seção, todos os equacionamentos serão detalhados a respeito dos processos em regime transiente, apresentando duas abordagens na elaboração dos balanços, os do ponto de vista dos balanços diferenciais e dos integrais aplicados em processos químicos, envolvendo processos em batelada e semicontínuos.

Contratado para operar uma planta de produção de Látex SBR, você iniciará a sua análise certificando-se de que o estireno está sendo alimentado nos reatores em batelada na porcentagem de pureza adequada. Conforme o projeto da planta, sabe-se que a conversão da reação é de 65%, portanto os reagentes (estireno e butadieno) precisam ser reciclados de modo que as quantidades não reagidas retornem ao processo. Após um processo de separação utilizado para separar ambos os reagentes, posteriormente à reação química, observa-se que o estireno deixa o processo com um percentual de pureza de 91,3%, ou seja, 90 kg/m^3 de estireno e $8,6 \text{ kg/m}^3$ de butadieno. Sabendo-se que o estireno deve ser introduzido nos reatores com um percentual de pureza de 94%, um processo semicontínuo sem reação química deve ser realizado visando o aumento da pureza do estireno. Esse processo ocorre em um tanque agitado semicontínuo com capacidade total de 20 m^3 , operando inicialmente com 8 m^3 . Em um instante $t=0$ inicia-se a alimentação de estireno puro com concentração de 40 kg/m^3 à vazão de $1,5 \text{ m}^3/\text{h}$. Considerando uma mistura perfeita, ou seja, densidades constantes e iguais em todas as correntes, você deverá verificar se o estireno apresentará a porcentagem

de pureza adequada para a alimentação nos reatores após 6 horas de operação. A concentração de estireno é adequada para garantir o percentual de pureza requerido para a alimentação dos reatores? Como os conceitos de balanço de massa em regime transiente podem ser aplicados nessa análise?

Com os conhecimentos adquiridos através dos estudos desta seção, você resolverá diversos problemas perante às operações unitárias em regime transiente. Bons estudos!

Não pode faltar

Fundamentos gerais sobre balanço de massa em regime transiente

Até este momento dos nossos estudos, aplicamos os conceitos de balanço de massa com ou sem reação química em operações unitárias que operam em regime permanente, ou seja, unidades de processos que não apresentam variações de suas propriedades em função do tempo. Nesta seção, introduziremos os conceitos para a aplicação do balanço de massa em operações unitárias em regime transiente, isto é, que apresentam variações em função do tempo. Dessa forma, vale recordar a equação geral do balanço de massa, bem como os termos que constituem essa equação.

A equação geral do balanço

Um balanço de uma quantidade conservada (massa total, massa de uma espécie particular, energia, momento) em um sistema (uma unidade de processo, uma série de unidades ou um processo completo) pode ser escrito pela equação geral:

$$\begin{array}{cccccc} \text{Entrada} & + & \text{Geração} & - & \text{Saída} & - & \text{Consumo} & = & \text{Acúmulo} \\ \left\{ \begin{array}{l} \text{entra através dos} \\ \text{limites do sistema} \end{array} \right\} & & \left\{ \begin{array}{l} \text{produzido dentro} \\ \text{do sistema} \end{array} \right\} & & \left\{ \begin{array}{l} \text{sai através dos} \\ \text{limites do sistema} \end{array} \right\} & & \left\{ \begin{array}{l} \text{consumido dentro} \\ \text{do sistema} \end{array} \right\} & & \left\{ \begin{array}{l} \text{acumula-se dentro} \\ \text{do sistema} \end{array} \right\} \end{array}$$

Visando introduzir as características de um determinado processo com o objetivo de realizar o balanço de massa de forma adequada, podemos utilizar as seguintes regras:

- Se não há reação química no sistema, então geração = 0 e consumo = 0, caso contrário, geração \neq 0 e consumo \neq 0. O termo de geração representa a formação de um produto através de uma reação química, e o termo consumo representa a quantidade de reagentes consumida na reação.
- Se um sistema está em estado estacionário, o termo acúmulo = 0, caso

contrário acúmulo $\neq 0$ (regime transiente), lembrando que o termo acúmulo descreve a variação da massa em um intervalo de tempo

Dessa forma, em sistemas não reativos em estado estacionário, a equação geral do balanço de massa se resumirá em **Entrada = Saída**, como visto nos estudos anteriores, porém em sistema em regime transiente, a equação geral do balanço de massa será representada por:

$$\text{Acúmulo} = \text{Entrada} - \text{Saída}$$



Pesquise mais

Sobre balanços em regime transiente convido você a consultar o artigo científico a seguir:

MILLI, B. B. et al. **Análise do processo de mistura de água e cal utilizando o SCILAB**. Disponível em: <<http://www.conhecer.org.br/enciclop/2011b/engenharias/analise%20do%20processo.pdf>>. Acesso em: 8 dez. 2016.

O balanço de massa em regime transiente pode ser escrito através de dois tipos de balanço, o balanço diferencial e o balanço integral. Consideraremos os balanços gerais de processos em estado não estacionário e mostraremos como os balanços diferencial e integral estão relacionados; de fato, como um deles pode ser derivado do outro.



Assimile

Nos processos químicos em regime transiente você deve assimilar que do balanço geral você sempre terá como resultado acúmulo = entrada – saída ou em algumas situações, por exemplo, na realização do balanço em um tanque de esvaziamento, acúmulo = – saída.

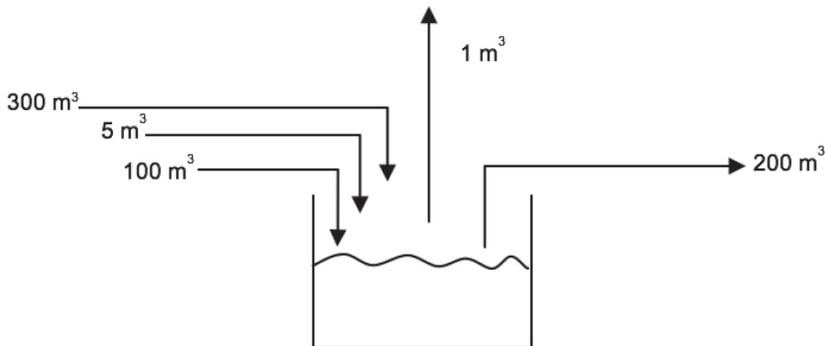
1. **Balanço diferencial** indica o que está acontecendo em um sistema em um instante determinado do tempo. Este tipo de balanço é mais comumente utilizado em processos contínuos, porém pode ser aplicado em processos em regime transiente para a realização de uma análise em um determinado ponto do processo.



Exemplificando

Em uma indústria produtora de fertilizantes há uma lagoa artificial utilizada para armazenar a água que deixa o processo produtivo, bem como água da chuva. Após 24 horas de operação, foram despejados na lagoa 300 m^3 oriundos da lavadora de gases, 5 m^3 provenientes de água da chuva e 100 m^3 resultantes do sistema de resfriamento do reator, ao passo que 200 m^3 foram retirados da lagoa para diversos usos e 1 m^3 foi perdido através de evaporação. Sabendo que a lagoa continha 240 m^3 anteriormente, qual é o volume de água que haverá na lagoa após esse período?

Figura 4.1 | Representação do balanço de massa em uma lagoa artificial



Fonte: elaborada pela autora.

Solução:

O processo em questão está em regime transiente e, portanto, a equação do balanço de massa se dá por: **Acúmulo = Entrada – Saída**. Deseja-se encontrar o volume de água em um dado instante, dessa forma, o balanço diferencial deve ser aplicado. Assim, temos que:

$$\text{Entrada} = 300 + 5 + 100 = 405 \text{ m}^3$$

$$\text{Saída} = 1 + 200 = 201 \text{ m}^3$$

$$\text{Acúmulo} = 405 - 201 = 204 \text{ m}^3$$

Se a lagoa já possuía 240 m^3 , então, ao final das 24 horas, a lagoa terá um volume de $240 + 204 = 444 \text{ m}^3$.

2. **Balço integral** descreve o que acontece no processo em um espao de tempo. Este tipo de balço normalmente é aplicado a processos em regime transiente, uma vez que processos em regime permanente não apresentam variações (propriedades constantes), portanto a derivada da equação é nula.



Exemplificando

Balços em um processo de mistura em batelada

Duas misturas metanol-água estão contidas em recipientes separados. A primeira mistura contém 40% em peso de metanol e a segunda contém 70%. Se 200 g da primeira mistura são combinados com 150 g da segunda, quais são a massa e a composição do produto?

Figura 4.2 | Processo de mistura em batelada



Fonte: adaptada de Felder e Rousseau (2011, p. 77).

Solução:

As "correntes" de entrada e saída mostradas no esquema acima denotam os estados "inicial" e "final" para este processo em batelada. Já que não há reações químicas envolvidas, os termos de consumo e geração podem ser omitidos, de forma que todos os balanços tenham a forma simples "entrada = saída".

$$\text{Balço de massa total: } 200 \text{ g} + 150 \text{ g} = m(\text{g}) \quad \Rightarrow \quad m = 350 \text{ g}$$

$$\text{Balço de metanol: } \frac{200 \text{ g}}{\text{g}} \left| \frac{0,4 \text{ g CH}_3\text{OH}}{\text{g}} \right. + \frac{150 \text{ g}}{\text{g}} \left| \frac{0,7 \text{ g CH}_3\text{OH}}{\text{g}} \right. = \frac{m(\text{g})}{\text{g}} \left| \frac{x(\text{g CH}_3\text{OH})}{\text{g}} \right. \Rightarrow$$

$$x = 0,529 \text{ g CH}_3\text{OH/g}$$

Agora conhecemos tudo acerca do processo, incluindo a fração mássica da água. Um balanço de água serve apenas para checar o cálculo.

$$\text{Balanço de água: } (200)(0,600) + (150)(0,300) - (350)(1 - 0,529)$$

(Verifique!)

$$165 \text{ g H}_2\text{O} = 165 \text{ g H}_2\text{O} \checkmark$$

Os balanços integrais também podem ser escritos para processos contínuos e semicontínuos. Na maior parte dos casos, os cálculos requeridos são mais complexos que aqueles vistos até agora; no entanto, alguns problemas deste tipo são relativamente diretos, como o apresentado no seguinte exemplo.

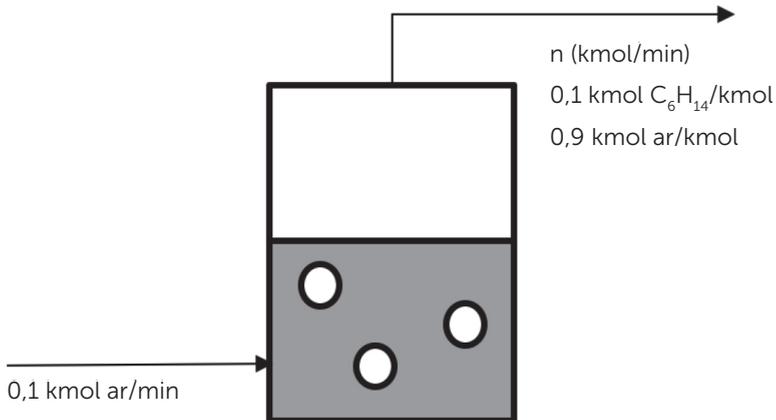


Exemplificando

Balanços em um processo semicontínuo

Borbulha-se ar através de um tambor de hexano líquido a uma vazão de **0,100 kmol/min**. A corrente de gás que deixa o tambor contém 10,0% molar de vapor de hexano. O ar pode ser considerado insolúvel no hexano líquido. Use um balanço integral para estimar o tempo requerido para vaporizar 10,0 m³ de hexano.

Figura 4.3 | Processo semicontínuo



Fonte: adaptada de Felder e Rousseau (2011, p. 78).

Solução:

Começamos com um balanço diferencial de ar. Já que admitimos que o ar não se dissolve no líquido (acúmulo = 0) nem reage com o hexano (geração = consumo = 0), o balanço se reduz à entrada = saída.

$$0,100 \text{ kmol ar/min} = 0,900 \dot{n} \Rightarrow \dot{n} = 0,111 \text{ kmol/min}$$

Escrevemos depois um balanço integral de hexano, desde o tempo $t = 0$ até $t = t_f$ (**min**), o tempo que desejamos calcular. O balanço tem a forma acúmulo = - saída (verifique). O termo de acúmulo, que é a mudança total do número de moles de hexano líquido no sistema durante o tempo t_f , tem que ser negativo, já que o hexano está saindo do sistema. Uma vez que o número de moles do hexano evaporado ocupará um volume de 10 m^3 e que a densidade relativa do hexano é 0,659, o termo de acúmulo é igual a

$$\Delta n = \frac{-10,0 \text{ m}^3}{1} \left| \frac{0,659 \text{ kg}}{\text{L}} \right| \frac{10^3 \text{ L}}{\text{m}^3} \left| \frac{1 \text{ kmol}}{86,2 \text{ kg}} \right| = -76,45 \text{ kmol } \text{C}_6\text{H}_{14}$$

O termo de saída no balanço é a taxa na qual o hexano sai do sistema ($0,100 \dot{n}$ $0,100 \dot{n} \text{ kmol de } \text{C}_6\text{H}_{14}/\text{min}$) vezes o tempo do processo, t_f (**min**).

Portanto, o balanço (acúmulo = - saída) é

$$-76,45 \text{ kmol} = -0,100 \cdot \dot{n} \cdot t_f \Rightarrow \quad t_f = 6880 \text{ min}$$



Reflita

E se você agora fosse convidado a estabelecer o balanço em um regime transiente, não mais em tanque de esvaziamento, e sim em tanque de alimentação, em que a vazão de saída do tanque fosse menor que a vazão de entrada, como você simplificaria a equação geral do balanço de massa?

Sem medo de errar

Para a produção de Látex SBR, o estireno deve ser alimentado nos reatores com um percentual de pureza de 94%. Dessa forma, após um processo de separação utilizado para obter ambos os reagentes estireno e butadieno, posteriormente à reação química, observa-se que o estireno deixa o processo com um percentual de pureza de 91,3%, ou seja, $90 \text{ kg}/\text{m}^3$ de estireno e $8,6 \text{ kg}/\text{m}^3$ de butadieno. Sabendo-se que o estireno deve ser introduzido nos reatores com um percentual de pureza de 94%, um processo semicontínuo sem reação química deve ser realizado visando o aumento da pureza do estireno. Esse processo ocorre em um tanque agitado semicontínuo com capacidade total de 20 m^3 , operando inicialmente com 8 m^3 . Em um instante $t=0$ inicia-se a alimentação de estireno puro com concentração de $40 \text{ kg}/\text{m}^3$ à vazão de $1,5 \text{ m}^3/\text{h}$. Contratado para operar a planta, você deverá verificar se o estireno apresentará a pureza adequada para a alimentação nos reatores após 6 horas de operação do referido processo para o aumento da sua pureza.



Atenção

Trata-se de um processo semicontínuo sem reação química em relação à massa total e ao reagente estireno e um processo em batelada sem reação química em relação ao reagente butadieno.

Visando o cálculo do percentual de pureza do estireno, você deverá, primeiramente, calcular o volume final após as 6 horas de operação, com a finalidade de calcular a concentração final dos reagentes e também para verificar se o tanque comportará o volume do processo. Assim sendo, temos que a equação geral o balanço de massa para um processo semicontínuo resultará em:

$$\text{Acúmulo} = \text{Entrada}$$

Em termos matemáticos, considerando um tanque de mistura perfeita, temos que:

$$\frac{dV}{dt} = \dot{V}_e = 1,5 \frac{m^3}{h}$$

Integrando a equação e considerando $V_0 = 8m^3$, tem-se que, após 6 horas de alimentação,

$$\frac{dV}{dt} = 1,5 \rightarrow dV = 1,5 dt \rightarrow \int_{V_0}^V dV = \int_0^t 1,5 dt$$

$$V - V_0 = 1,5(6 - 0) \rightarrow V = 8 + 9 = 17m^3 \rightarrow V = 17m^3$$

Podemos verificar que o tanque em questão comportará o volume necessário para a realização do processo. Encontrado o volume final do processo, neste momento é importante encontrar as massas finais dos reagentes com o objetivo de se calcular as concentrações finais, bem como o percentual de pureza do estireno que será alimentado nos reatores. Realizando-se o balanço para o estireno (A), tem-se que:

$$\text{Acúmulo(A)} = \text{Entra(A)}$$

Em termos matemáticos:

$$\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{Ae} = C_{Ae} \cdot \dot{V}_e = 40 \frac{kg}{m^3} \cdot 1,5 \frac{m^3}{h} = 60 \frac{kg}{h} \rightarrow \frac{dm_A}{dt} = 60 \frac{kg}{h}$$

Sabendo-se que inicialmente para um tempo $t=0$ a concentração é de $90kg/m^3$, temos que a massa inicial de A é:

$$m_{A0} = C_{A0} \cdot V_0 = 90 \frac{kg}{m^3} \cdot 8 m^3 = 720kg,$$

Da equação $\frac{dm_A}{dt} = 60 \frac{kg}{h}$, integrando-a e após 6 horas de alimentação:

$$\int_{m_{Ao}}^{m_A} dm_A = 60 \frac{kg}{h} \int_0^6 dt \Rightarrow$$

$$m_A - 720 = 60 \cdot 6 \Rightarrow$$

$$\underline{m_A = 1080 kg \ A}$$

Logo, a concentração de A, após 6 horas de alimentação é:

$$C_A = \frac{m_A}{V} = \frac{1080}{17} \rightarrow C_A = 63,5 \frac{kg}{m^3} \left(\frac{g}{L} \right)$$

Quanto ao butadieno (B), o processo ocorre em batelada e sem reação química, logo:

$m_{B-Final} = m_{B-Inicial}$ ou $C_B \cdot V = C_{Bo} \cdot V_o$, substituindo os valores, tem-se que:

$$C_B \cdot V = C_{Bo} \cdot V_o \Rightarrow C_B \cdot 17 m^3 = 8,6 \frac{kg}{m^3} \cdot 8 m^3 \Rightarrow C_B = 4,1 \frac{kg}{m^3}$$

$$C_B = \frac{m_B}{V} \Rightarrow m_B = C_B \cdot V = 4,1 \frac{kg}{m^3} \cdot 17 m^3 = 68,94 kg$$

Dessa forma, pode-se calcular o percentual de pureza do estireno, sabendo que a massa total é a soma das massas de ambos os reagentes, temos que $m_T = m_A + m_B = 1080 + 68,94 = 1148,94 kg$, assim sendo o percentual de pureza do estireno é dado por:

$$\% \text{pureza} = \frac{m_A}{m_T} = \frac{1080}{1148,94} = 94\%$$

Podemos concluir que o processo realizado e as concentrações utilizadas garantem que o estireno seja alimentado nos reatores com o percentual de pureza correto, conforme o projeto da planta para a produção do Látex SBR.

Avançando na prática

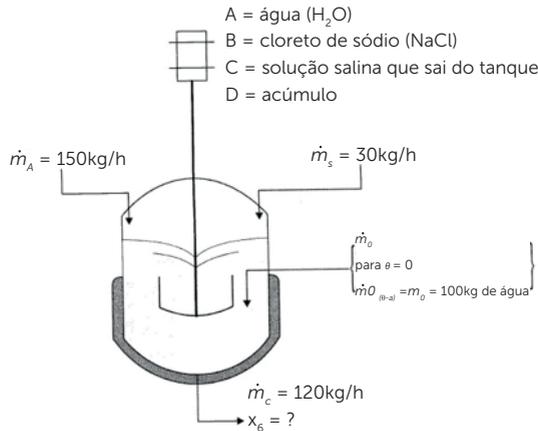
Preparação de uma solução salina em um tanque agitado em regime transiente

Descrição da situação-problema

Uma empresa de química fina está produzindo uma solução de cloreto de

sódio, em um tanque agitado semicontínuo, representado pela Figura 4.4. Nesse processo, o tanque é alimentado por 150 kg/h de água e 30 kg de cloreto de sódio e a solução resultante é retirada com uma vazão de 120 kg/h , sendo que 100 kg de água tinham sido inseridos no tanque anteriormente. Como analista de processo dessa empresa, você acredita ser interessante obter uma expressão que represente o acúmulo de massa de água em função do tempo para este processo. Considerando que o tanque possui uma mistura perfeita, como você obterá essa expressão utilizando os conceitos de balanço de massa em regime transiente?

Figura 4.4 | Tanque agitado para a preparação da solução salina



Fonte: Terron (2012, p. 432).

Resolução da situação-problema

De um balanço total do sistema, tem-se: $\dot{m}_E = \dot{m}_S + \dot{m}_A$ ou seja: $\dot{m}_A + \dot{m}_B = \dot{m}_C + \dot{m}_D$.

O acúmulo irá variar de modo infinitesimal com o tempo, o que é representado como a derivada do acúmulo em relação ao tempo: $\dot{m}_D = \frac{dm_D}{dt}$, substituindo-se os valores de $\dot{m}_A, \dot{m}_B, \dot{m}_C$ e \dot{m}_D , tem-se: $150 + 30 = 120 + \frac{dm_D}{dt}$. Portanto, $\frac{dm_D}{dt} = 60 \text{ kg/h}$. Separando as variáveis e integrando esta equação, tem-se que:

$$\int dm_D = 60 \int dt \Rightarrow m_D = 60t + C$$

Para $t = 0 \Rightarrow m_D = m_0 = 100 \text{ kg/h} \Rightarrow C = m_D = 100 \text{ kg/h}$. Portanto, a expressão que representa o acúmulo para esse processo é, então: $m_D = 60t + 100$.

Faça valer a pena

1. Os balanços diferenciais são formas de escrever os balanços de massa, de modo que a equação pode ser deduzida na sua forma diferencial e depois se integra esta equação entre os tempos inicial e final, resolvendo-se a equação resultante para a quantidade desconhecida.

Seja a equação geral do balanço diferencial de massa:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{entra} - \dot{m}_{sai} + \dot{m}_{gerada} - \dot{m}_{consumida} .$$

Ao se considerar a equação geral do balanço de massa na sua forma diferencial aplicada ao balanço de água em um reservatório, os termos do balanço neste tipo de problema que podem ser desprezados quando se deseja saber a variação da massa total no sistema em termos de variação de volume do reservatório são:

- a) $\dot{m}_{gerada} = \dot{m}_{consumida} = 0$ (a água não é produzida e consumida no reservatório).
- b) $\dot{m}_{entra} = \dot{m}_{sai} = 0$ (nenhuma vazão de água é alimentada e nem retirada).
- c) $\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{entra} = 0$ (não há nenhum acúmulo e nenhuma vazão de alimentação, tanque de esvaziamento).
- d) $\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{sai} = 0$ (não há nenhum acúmulo e nenhuma vazão de saída, tanque de transbordamento).
- e) $\frac{dm}{dt} \neq 0$ (há acúmulo, mas sem vazão de entrada, tanque de esvaziamento).

2. Para um sistema fechado (batelada), se a quantidade balanceada é a massa, a vazão mássica que entra é igual à vazão mássica que sai ($\dot{m}_{entra} = \dot{m}_{sai} = 0$), e a equação geral do balanço pode ser escrita como

$$\text{sendo, } M_{inicial} + \int_{t_0}^{t_f} \dot{m}_{gerada} dt = M_{final} + \int_{t_0}^{t_f} \dot{m}_{consumida} dt .$$

Ao observar a equação do balanço na sua forma integral para um sistema em batelada (sistema fechado), a outra forma de escrever o balanço integral é:

$$a) M_{inicial} + \int_{t_0}^{t_f} \dot{m}_{gerada} dt = M_{final} + \int_{t_0}^{t_f} \dot{m}_{consumida} dt .$$

$$b) \text{ Acúmulo} = \text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Geração} - \text{Consumo} .$$

$$c) \text{ Entrada inicial} + \text{Geração} = \text{Saída final} - \text{Consumo} .$$

$$d) \text{ Acúmulo} = \text{Entrada} = \text{Saída} + \text{Geração} - \text{Consumo} .$$

$$e) \text{ Acúmulo} = \text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Geração} = \text{Consumo} .$$

3. Um líquido A é vertido em um tanque contendo um segundo líquido B. O que aconteceria se as duas substâncias reagissem, em que A fosse consumido?

Analisando a equação geral do balanço de massa ($\text{Acúmulo} = \text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Geração} - \text{Consumo}$) para o problema em questão, assinale a alternativa que apresenta o(s) termo(s) que possui(em) um valor diferente de zero, ou seja, que não deve(m) ser anulado(s):

$$a) \text{ Acúmulo} \neq 0 .$$

$$b) \text{ Acúmulo} \neq 0, \text{ Entrada} \neq 0 \text{ e Saída} \neq 0 .$$

$$c) \text{ Entrada} \neq 0 .$$

$$d) \text{ Geração} \neq 0 \text{ e Consumo} \neq 0 .$$

$$e) \text{ Geração} \neq 0 .$$

Seção 4.2

Balanço de massa em regime transiente sem reação química

Diálogo aberto

Nesta seção continuaremos explorando os conceitos de balanços em regime transiente, considerando mais aplicações em operações unitárias fundamentais aos processos químicos, enfatizando as metodologias para os cálculos de balanço de massa transiente e sem reações químicas. O desenvolvimento do raciocínio crítico nos problemas e suas soluções continuarão em destaque, delineando-se caminhos de aprendizagem que enalteçam as habilidades em iniciativa, flexibilização e colaboração.

Caro aluno, você será convocado novamente a colocar em prática o seu aprendizado e o seu raciocínio analítico desenvolvido para resolver um problema, desta vez com base no tratamento de efluentes. Um dos problemas enfrentados industrialmente em muitos processos é a quantidade de compostos orgânicos contidos nos efluentes industriais e que somam as estatísticas de contaminação da água e dos solos, tornando-se um problema ambiental grave.

Um desses compostos orgânicos provenientes de processos industriais que poluem as águas é o Terc-Dodecil Mercaptano (TDM), que possui um odor que se assemelha à cebola deteriorada. O TDM é largamente utilizado para inserir odor ao gás natural devido às questões de segurança e na polimerização de borrachas sintéticas, por exemplo, o Látex SBR, como agente de transferência de cadeia, exercendo a função de agente que eleva o peso molecular dos monômeros, ajustando o peso molecular do polímero desejado.

Contratado para operar uma planta de produção de Látex SBR, você analisará o processo de tratamento de efluentes da planta em questão. A água que sai do processo é descarregada em um grande tanque de concreto que contém 44.000 litros de água com 10.000 kg de TDM a uma vazão de **40.000L/h** e, após o tratamento, a água residuária deixa o tanque na mesma vazão. Sabendo que a água residuária deve possuir uma concentração máxima de **0,016kg/L** de TDM, você precisará estimar qual deverá ser o tempo de residência para que a água deixe

o tanque na concentração adequada após o tratamento. Como você aplicará os conceitos de balanço de massa em regime transiente para realizar essa análise?

Nesta seção, veremos aplicações do balanço de massa em regime transiente em operações unitárias fundamentais aos processos químicos. Pronto? Bons estudos!

Não pode faltar

Aplicações sobre balanço de massa em regime transiente sem reação química

Um balanço de massa total em regime transiente sem reação química tem necessariamente a forma resumida da equação geral ($\text{Acúmulo} = \text{Entrada} - \text{Saída}$), em que se considera que a massa não pode ser gerada e nem consumida, o termo de acúmulo terá sempre a forma, dm/dt , com $m(t)$ sendo a massa do conteúdo do sistema. Uma vez que é determinada esta quantidade através da resolução da equação do balanço diferencial, é possível verificar se a solução matemática não extrapola a realidade física, seja em um tanque, por exemplo, de esvaziamento ou de transbordamento, quando o acúmulo é negativo ou quando é excedida a capacidade total do sistema. No exemplo mostrado a seguir, veremos uma aplicação do balanço geral de massa, em que estas questões são levantadas.



Exemplificando

Em um tanque de 100 litros há uma solução aquosa composta por sal e água em que 5 kg de sal são dissolvidos. A água flui dentro do tanque a uma vazão de **5 L/min**, a solução salina sobrenadante está a uma mesma vazão e é sabido também que a concentração de sal varia com o tempo. Após um tempo de 10 min, qual é o valor da quantidade de sal presente no tanque?

Fonte: adaptado de Ghasem e Henda (2015, p. 386).

Solução:

São conhecidas as variáveis: volume, massa e vazões volumétricas de entrada, e pede-se a quantidade de sal no tanque, após um período de 10 min.

Considerações:

1. Assumir que a solução no tanque é misturada.
2. Assumir que a densidade da solução de sal é essencialmente a mesma que da água pura.

A equação geral do balanço de massa em estado não estacionário, em termos de vazões mássicas é:

Acúmulo = Entrada - Saída + Geração - Consumo

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{entra} - \dot{m}_{sai} + \dot{m}_{gerada} - \dot{m}_{consumida}$$

Como se trata de um balanço sem reação química, então os termos de geração e de consumo são desprezados e a equação geral do balanço se resume a:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{entra} - \dot{m}_{sai}$$

Logo,

A vazão mássica que entra pode ser expressa em função da concentração de sal da seguinte forma:

$$\dot{m}_{entra} = \dot{V}_{entra} \cdot C_{entra} = \frac{L}{\text{min}} \times \frac{kg}{L} = \frac{kg}{\text{min}}$$

A vazão mássica na saída é:

$$\dot{m}_{sai} = \dot{V}_{sai} \cdot C_{sai} = \frac{L}{\text{min}} \times \frac{kg}{L} = \frac{kg}{\text{min}}$$

Note que a massa total m pode ser representada pelo produto do volume do tanque e da concentração, e fazendo-se a análise de unidades novamente, o termo de acúmulo também é dado em kg/min , como veremos a seguir:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d(V \cdot C)}{dt} = \frac{L \frac{kg}{L}}{\text{min}} = \frac{kg}{\text{min}}$$

Substituindo os termos das vazões na equação do balanço material

$$\frac{d(V \cdot C)}{dt} = (\dot{V}_{entra} \cdot C_{entra}) - (\dot{V}_{sai} \cdot C_{sai})$$

Como o tanque é bem misturado e a concentração de sal na saída é igual à concentração no tanque:

$$\frac{d(V \cdot C)}{dt} = (\dot{V}_{entra} \cdot C_{entra}) - (\dot{V}_{sai} \cdot C)$$

Na entrada temos apenas água pura, o que implica que a concentração de sal na entrada é zero, $C_{entra} = 0$.

As vazões volumétricas na entrada e na saída são iguais, assim:

$$(\dot{V}_{entra}) = (\dot{V}_{sai})$$

Bem como o volume do tanque V é constante, então:

$$V \frac{d(C)}{dt} = 0 - (\dot{V}_{sai} \cdot C) \Rightarrow$$

$$V \frac{d(C)}{dt} = -\dot{V}_{sai} \cdot C$$

Para resolver esta equação diferencial é requerida uma condição inicial, que corresponde à concentração de sal no tanque no tempo zero:

$$C|_{t=0} = \frac{5 \text{ kg}}{100 \text{ L}} = 0,05 \text{ kg/L}$$

Separando as variáveis, integrando a equação diferencial desenvolvida e resolvendo para a concentração no tempo de 10 minutos, deve-se achar a solução analítica, dada a seguir.

$$\frac{d(C)}{C} = -\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot dt \Rightarrow$$

$$\ln \frac{C}{C_o} = -\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot t$$

Substituindo as quantidades conhecidas e rearranjando os termos, chega-se a:

$$\int_{C_o}^C \frac{d(C)}{C} = -\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot \int_0^t dt \Rightarrow$$

$$\ln \frac{C}{C_o} = -\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot t$$

$$\frac{C}{C_o} = \exp\left(-\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot t\right) \Rightarrow C = C_o \exp\left(-\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot t\right)$$

$$C = 0,05 \exp\left(-\frac{5 \text{ L/min}}{100 \text{ L}} \times 10 \text{ min}\right) = \underline{\underline{0,03 \text{ kg/L}}}$$

Ao passar, portanto, **10 min**, a concentração de sal no tanque é de

0,03 kg/L .



Assimile

Ao observar a solução analítica da concentração de sal através da equação

$C = C_o \exp\left(-\frac{\dot{V}_{sai}}{V} t\right)$, conclui-se que, a concentração de sal no tanque decresce com o tempo.



Refleta

Você já pensou como o balanço de massa em regime transiente pode ser realizado via software? Leia o artigo a seguir e reflita sobre essa aplicação:

SAWAKI, R. V. et al. **Modelagem e simulação do desempenho de reatores de fluxo contínuo e em batelada no tratamento de efluente têxtil utilizando o software livre Python**. Disponível em: <<http://pdf.blucher.com.br/s3-sa-east-1.amazonaws.com/chemicalengineeringproceedings/cobeqic2015/311-33902-260242.pdf>>. Acesso em: 8 jan. 2017.

Referindo-se às operações unitárias em regime transiente, destacam-se equipamentos que podem operar de forma contínua ou transiente, como a destilação, a evaporação e os reatores em tanque, que serão tratados na próxima seção. Neste momento, vamos conhecer as características e executar o balanço de massa em regime transiente para a destilação e evaporação em batelada.

Balanço material não estacionário em uma coluna de destilação em batelada

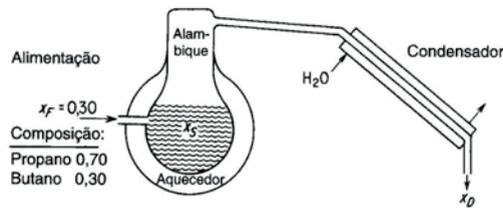
A destilação em batelada possui características transientes, isto é, sua operação é realizada no estado não estacionário. A operação dessa operação unitária é inerente do esgotamento da solução alimentada do refeedor antes do início do seu funcionamento, ao passo que, opostamente à destilação contínua, nenhuma solução é continuamente alimentada no refeedor. Destilação em batelada possui a vantagem de possibilitar que misturas multicomponentes sejam separadas em seus constituintes mais puros em uma única coluna, além da flexibilidade que esse sistema proporciona, uma vez que é possível utilizar o mesmo equipamento na separação de diferentes misturas, fato importante no que se diz respeito ao processamento de diversos produtos em pequenas quantidades e com elevado grau de pureza, como produtos farmacêuticos, por exemplo.



Exemplificando

Um pequeno alambique, conforme é mostrado na Figura 4.5, está separando propano e butano a 135 °C, contendo inicialmente 10 kgmols de uma mistura composta por 30% de butano em base molar. Uma mistura adicional ($x_F = 0,30$) é alimentada à taxa de 5 kgmols/h. Se o volume total do líquido no alambique for constante e a concentração do vapor proveniente do alambique (x_D) estiver relacionada à x_S , como dado a seguir: $\left(x_D = \frac{x_S}{1 + x_S}\right)$, quanto tempo levará para o valor de x_S mudar de 0,3 para 0,4? Qual é o valor no estado estacionário ("equilíbrio") de x_S no alambique (isto é, quando x_S se torna constante)?

Figura 4.5 | Representação de um equipamento de destilação em batelada



Fonte: Himmelblau e Riggs (2014, p. 746).

Solução:

Considerações:

Butano e propano formam uma solução ideal, então a variação no volume na mistura ou na separação não é levado em consideração, com "t" sendo a variável independente e x_S a variável dependente, pode-se escrever o balanço material para o sistema, então:

Balanço por componente para o butano (C_4): a entrada para o alambique é:

$$\frac{5 \text{ mols de alimentação}}{h} \quad \left| \quad \frac{0,30 \text{ mol de } C_4}{\text{mol de alimentação}} \right.$$

A saída do alambique é igual à quantidade condensada

$$\frac{5 \text{ mols de condensado}}{h} \quad \left| \quad \frac{x_D \text{ mol de } C_4}{\text{mol de condensado}} \right.$$

O acúmulo é $\frac{10dx_S}{dt}$

A equação para o estado não estacionário é, então:

(Acúmulo = Entrada - Saída) \Rightarrow

$$\frac{dx_S}{dt} = 0,15 - 0,5x_D \therefore x_D = \frac{x_S}{1+x_S}, \text{ logo}$$

$$\frac{dx_S}{dt} = 0,15 - (0,5) \frac{x_S}{1+x_S}$$

Separando as variáveis e integrando a equação diferencial entre os seguintes limites de integração:

$$t=0 \Rightarrow x_S = 0,30$$

$$t = \theta \Rightarrow x_S = 0,40$$

$$\int_{0,3}^{0,4} \frac{dx_S}{0,15 - \left[\frac{0,5x_S}{(1+x_S)} \right]} = \int_0^\theta dt = \theta \Rightarrow$$

$$\int_{0,3}^{0,4} \frac{(1+x_S) dx_S}{0,15 - 0,35x_S} = \theta$$

$$\theta = \left[-\frac{x_S}{0,35} - \frac{1}{(0,35)^2} \ln(0,15 - 0,35x_S) \right]_{0,30}^{0,40} \Rightarrow$$

$$\theta = 5,85h \text{ (tempo que levar para o valor de } x_S \text{ mudar de } 0,3 \text{ para } 0,4)$$

O valor de x_S no estado estacionário é estabelecido em um tempo infinito, ou alternativamente, quando o acúmulo for zero. Neste tempo, portanto,

$$0,15 = \frac{0,5x_S}{1+x_S} \Rightarrow \underline{x_S = 0,428}, \text{ para estas condições o valor de } x_S \text{ nunca poderia ser maior do que } 0,428.$$

Balanço material não estacionário em um evaporador em batelada

A evaporação como uma operação unitária envolve a concentração de mais um dos solutos por transferência do solvente do líquido para a fase de vapor. A evaporação também pode ser simplesmente a formação de vapor a partir de um líquido. O meio de aquecimento, normalmente vapor, é introduzido na caixa de vapor ligada a um conjunto de tubos no interior do corpo do evaporador. O vapor condensa-se fazendo com que o líquido fora dos tubos vaporize. Como uma questão de economia, muitas vezes uma série múltipla de evaporadores são conectados de modo que o vapor de um evaporador seja introduzido (a uma pressão mais baixa) na caixa de vapor do evaporador seguinte onde se condensa,

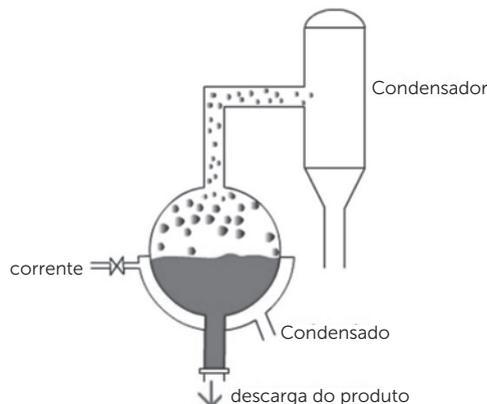
e assim por diante. Os sólidos dissolvidos podem ser depositados no exterior dos tubos de aquecimento (dimensionamento) de modo que sejam utilizados diferentes desenhos de evaporadores interiores para reduzir a escala. Pode ser operado de forma contínua ou transiente, sendo que em regime transiente é primeiramente alimentado pela solução que deve ser concentrada antes de entrar em operação, e o funcionamento se encerra quando a solução apresenta a concentração desejada.



Exemplificando

Seja um evaporador em batelada, conforme é mostrado na Figura 4.6, contendo inicialmente 5.000 kg de uma mistura de uma solução de açúcar, cuja composição é $x=0,15$ (x =fração mássica de açúcar), alimentado à taxa de 5.000 kg/h da solução, com uma concentração de alimentação de $(x_F = 0,15)$, com o evaporador operando a 1 atm. A concentração de licor concentrado depende da concentração acumulada de vapor (x_S) no evaporador. Se o volume total do líquido no evaporador for constante e a concentração do licor proveniente do evaporador (x_L) estiver relacionada à x_S , como dado a seguir: $(x_L = x_S / (1 + x_S))$ e considerando também que a solução sendo evaporada é muito diluída e que suas propriedades são iguais à da água pura, calcule qual é a massa de vapor gerada. Quanto tempo levará para o valor de x_S mudar de 0,15 para 0,2?

Figura 4.6 | Representação de um evaporador em batelada



Fonte: adaptada de <http://rpaulsingh.com/animations/evap_pan.html>. Acesso em: 26 dez. 2016.

Solução:

Considerações:

Solução aquosa forma uma solução ideal, então a variação no volume na mistura ou na separação não é levando em consideração.

Com "t" sendo a variável independente e x_S a variável dependente, pode-se escrever o balanço material para o sistema.

Então:

Balanço por componente para o açúcar (soluto):

a entrada para o evaporador é:

$$\frac{5000 \text{ kg de alimentação}}{h} \left| \frac{0,15 \text{ kg de açúcar}}{1 \text{ kg de alimentação}} \right.$$

A saída do evaporador é igual à quantidade concentrada:

$$\frac{3000 \text{ kg de concentrado}}{h} \left| \frac{x_L \text{ kg de açúcar}}{1 \text{ kg de concentrado}} \right.$$

O acúmulo é $\frac{5000 dx_S}{dt}$.

A equação para o estado não estacionário é, então:

(Acúmulo = Entrada - Saída) \Rightarrow

$$\frac{5000 dx_S}{dt} = 5000 \times 0,15 - 3000 \times x_L$$

$$\frac{dx_S}{dt} = 0,15 - 0,6x_L \quad \therefore x_L = \frac{x_S}{1+x_S}, \log o,$$

$$\frac{dx_S}{dt} = 0,15 - 0,6 \frac{x_S}{1+x_S}$$

Separando as variáveis e integrando a equação diferencial entre os seguintes limites de integração: $t=0 \Rightarrow x_S = 0,15$; $t=\theta \Rightarrow x_S = 0,2$

$$\int_{0,15}^{0,2} \frac{dx_S}{0,15 - \frac{0,6x_S}{(1+x_S)}} = \int_0^\theta dt = \theta \Rightarrow$$

$$\int_{0,15}^{0,2} \frac{(1+x_S) dx_S}{0,15 - 0,45x_S} = \theta$$

$$\theta = \left[-\frac{x_S}{0,45} - \frac{1}{(0,45)^2} \ln(0,15 - 0,45x_S) \right]_{0,15}^{0,2} \Rightarrow$$

$$\theta = 1,46h \text{ (tempo que levar para o valor de } x_S \text{ mudar de } 0,15 \text{ para } 0,2)$$

Balanço para o soluto (açúcar):

A concentração de sólidos no vapor é ($y = 0$), tratando-se do vapor como água pura.

Como a concentração do licor proveniente do evaporador (x_L) está relacionada à x_S , pela expressão ($x_L = x_S/1 + x_S$), a concentração do licor (x_L) para atingir a concentração acumulada de vapor no evaporador de 0,2, (x_L) será de $x_L = x_S/1 + x_S = 0,2/1 + 0,2 = 0,25 \Rightarrow$

$$\underline{x_L = 0,25}$$

$$F \cdot x_F = L \cdot x_L + V \cdot y \rightarrow (y = 0)$$

$$L = \frac{F \cdot x_F}{x_L} = \frac{5000 \times 0,15}{0,25} = 3000 \text{ kg/h}$$

$$\underline{L = 3000 \text{ kg/h}}$$

Do balanço global, a quantidade de vapor gerada será:

$$F = L + V \Rightarrow$$

$$V = F - L = 5000 - 3000 \text{ kg/h}$$

$$\underline{V = 2000 \text{ kg/h}} \text{ de vapor gerado}$$



Pesquise mais

Quer se aprofundar mais sobre balanços transientes sem reação química? Convidamos você, a consultar o capítulo 11 do livro *Princípios Elementares dos Processos Químicos*, disponível em Minha biblioteca na sua área do aluno, no link: <<https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/978-85-216-1940-6/cfi/128!/4/4@0.00:51.2>>. Acesso em: 20 dez. 2016.

Sem medo de errar

Contratado para operar uma planta de produção de Látex SBR, você analisará o processo de tratamento de efluentes da planta em questão. A água que sai do processo é descarregada em um grande tanque de concreto que contém 44.000 litros de água com 10.000kg de TDM a uma vazão de **40.000 L/h** e, após o tratamento, a água residuária deixa o tanque na mesma vazão. Estime o tempo de residência para o tratamento do efluente de modo que a concentração final de TDM seja de **0,016 kg/L**.



Atenção

O processo de tratamento de efluentes em questão é caracterizado como transiente, pois existe acúmulo e variação da concentração com o tempo.

Solução:

A equação geral do balanço de massa em estado não estacionário, em termos de vazões mássicas, é:

Acúmulo = Entrada - Saída + Geração - Consumo

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{entra} - \dot{m}_{sai} + \dot{m}_{gerada} - \dot{m}_{consumida}$$

Como se trata de um balanço sem reação química, então os termos de geração e de consumo são desprezados e a equação geral do balanço se resume a:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{entra} - \dot{m}_{sai}$$

As vazões mássicas podem ser expressas em função das concentrações como segue:

$$\frac{d(V.C)}{dt} = (\dot{V}_{entra} \cdot C_{entra}) - (\dot{V}_{sai} \cdot C_{sai})$$

Assumindo a solução no tanque bem misturado, assim, a concentração de sólidos em suspensão na saída é igual à concentração no tanque:

$$\frac{d(V.C)}{dt} = (\dot{V}_{entra} \cdot C_{entra}) - (\dot{V}_{sai} \cdot C)$$

As vazões volumétricas na entrada e na saída são iguais, assim:

$$(\dot{V}_{entra}) = (\dot{V}_{sai}) = 40000 \text{ L/h}$$

E o volume do tanque V é constante, então: $\Rightarrow V = \text{constante} = 440000 \text{ L}$

Água pura é bombeada dentro do vaso a uma vazão de 40000 L/h , o que implica que a concentração inicial de sólidos na água pura é zero, $C_{entra} = 0$.

Portanto, o balanço para o sólido em suspensão é:

$$V \frac{d(C)}{dt} = 0 - (\dot{V}_{sai} \cdot C) \Rightarrow$$

$$V \frac{d(C)}{dt} = -\dot{V}_{sai} \cdot C$$

Para resolver esta equação diferencial é requerida uma condição inicial, que corresponde à concentração de sólidos no tanque no tempo zero:

$$C|_{t=0} = \frac{10000 \text{ kg}}{440000 \text{ L}} = 0,023 \text{ kg/L}$$

Separando as variáveis integrando a equação diferencial desenvolvida, deve-se achar a solução analítica, dada a seguir:

$$\int_{C_o}^{C_f} \frac{d(C)}{C} = -\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \int_0^t dt \Rightarrow$$

$$\ln \frac{C_f}{C_o} = -\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot t$$

$$\frac{C_f}{C_o} = \exp\left(-\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot t\right) \Rightarrow \underline{\underline{C_f = C_o \exp\left(-\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot t\right)}}$$

E, substituindo o valor da concentração final, que deve ser de $0,016 \text{ kg/L}$, tem-se que o tempo de residência deve ser de:

$$C_f = C_o \exp\left(-\frac{\dot{V}_{sai}}{V} \cdot t\right)$$

$$0,016 \frac{\text{kg}}{\text{L}} = 0,023 \frac{\text{kg}}{\text{L}} \exp\left(-\frac{40000 \text{ L/h}}{440000 \text{ L}} \times t\right) = \underline{\underline{4 \text{ horas}}}$$

Portanto, a concentração de TDM será de $0,016 \text{ kg/L}$ após 4 horas de tratamento.

Avançando na prática

Modelagem da variação de volume de um tanque de armazenamento de água

Descrição da situação-problema

Como analista de processos em uma grande indústria alimentícia, você foi solicitado para analisar um vazamento em um tanque de $12,5 \text{ m}^3$ que está sendo cheio com água a uma taxa de $0,050 \text{ m}^3/\text{s}$. Você precisa identificar como está ocorrendo a variação de volume neste tanque com o tempo. Em um dado momento, quando o tanque contém $1,20 \text{ m}^3$ de água, um vazamento aparece no fundo do tanque, aumentando consideravelmente com o tempo. Sabendo que a taxa de vazamento é aproximadamente de $0,0025t \left(\frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right)$, você precisará encontrar uma função que descreva o vazamento.

Resolução da situação-problema

Para encontrar a função que descreve o vazamento, deve-se realizar um balanço de massa no tanque com o objetivo de encontrar uma expressão da variação do volume com o tempo.

Assim sendo, temos que a equação geral do balanço para a água diz que:

Acúmulo = Entrada - Saída + Geração - Consumo

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{entra} - \dot{m}_{sai} + \dot{m}_{gerada} - \dot{m}_{consumida}$$

Novamente trata-se de um problema sem reação química, então os termos de geração e de consumo são desprezados, e a equação geral do balanço se resume a:

Acúmulo = Entrada - Saída

A massa total de conteúdo do tanque é $M(\text{kg}) = \rho \cdot V$, para uma massa específica da água líquida de $\rho = 0,00100 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$. Identificando os termos de balanço, temos que:

$$\text{Acúmulo} \left(\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right) = \frac{d(\rho \cdot V)}{dt} = \rho \cdot \frac{dV}{dt}$$

$$\text{entrada} \left(\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right) = \rho \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \left(0,05 \text{ m}^3/\text{s} \right) = 0,05 \cdot \rho$$

$$\text{saída} \left(\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right) = \rho \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \left(0,025t \left(\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right) \right) = 0,0025 \cdot \rho \cdot t$$

Substituindo os termos na equação geral do balanço e cancelando o termo de ρ , chega-se à equação diferencial da forma:

$$\rho \frac{dV}{dt} = 0,05 \cdot \rho - 0,0025 \cdot \rho \cdot t \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dV}{dt} = 0,05 \left(\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right) - 0,0025 \cdot t \\ \text{com } t = 0, V = 1,2 \text{ m}^3 \end{array} \right.$$

Resta resolver a equação diferencial para a variação do volume com o tempo, basta então separar as variáveis e integrar a equação:

$$dV \left(\text{m}^3 \right) = (0,05 - 0,0025 \cdot t) dt \Rightarrow$$

$$\int_{1,2 \text{ m}^3}^V dV = \int_0^t (0,05 - 0,0025 \cdot t) dt \Rightarrow$$

$$V_{1,2}^V = \left(0,05t - 0,0025 \cdot \frac{t^2}{2} \right)_0^t \Rightarrow$$

$$\underline{\underline{V \left(\text{m}^3 \right) = 1,2 + 0,050t - 0,0025t^2}}$$

Checando a condição inicial: quando $t = 0, V = 1,2 \text{ m}^3$ (*confirmado*).

Ao derivar a equação do volume, chega-se à equação diferencial inicial para a variação do volume com o tempo: $\frac{dV}{dt} = 0,05 - 0,0025 \cdot t$. Mediante essa expressão o vazamento do tanque poderá ser avaliado.

Faça valer a pena

1. Tanques de armazenamento e de esvaziamento são exemplos muito comuns envolvendo a aplicação de balanço de massa total, em que se tem como objetivo avaliar a variação de volume ou de altura em função do tempo para este tipo de sistema.

Considere a equação de variação de volume com tempo dado pela equação $V(m^3) = 1,2 + 0,050t - 0,0025t^2$, que representa o comportamento dinâmico do volume em um tanque de armazenamento de líquido de um processo. Ao observar o comportamento do volume através da solução analítica, o valor inicial do volume no tempo zero é:

- a) $V(m^3) = 1,2$.
- b) $V(m^3) = 0,050$.
- c) $V(m^3) = 0,0025$.
- d) $V(m^3) = 1,2475$.
- e) $V(m^3) = 0$.

2. Em um sistema de tratamento de efluentes, é muito comum a prática de remoção dos sólidos finos em suspensão no líquido, o que torna essencial medir o teor destes sólidos remanescentes nestes sistemas.

A resposta dinâmica para a concentração final de sólidos em suspensão em um tanque de tratamento de efluentes é dada pela solução analítica da equação diferencial $\frac{d(C)}{C} = -\frac{\dot{V}_{sai}}{V}.dt$, cuja solução é $C_f = C_o \exp\left(-\frac{\dot{V}_{sai}.t}{V}\right)$.

Considerando que a concentração inicial de sólidos é $C_o = C|_{t=0} = 0,04 \text{ kg/L}$, a vazão de saída é de $\dot{V}_{sai} = 60000 \text{ L/h}$ e um volume constante de $\Rightarrow V = \text{constante} = 520000 \text{ L}$, o tempo de operação necessário para que a concentração de sólidos finos atinja $C_f = 0,02 \text{ kg/L}$ é de aproximadamente:

- a) 10h.
- b) 8h.
- c) 4h.
- d) 6h.
- e) 2h.

3. Um tanque contém 100 litros de uma solução aquosa sal e água em que 5 kg de sal é dissolvido. A água flui dentro do tanque a uma vazão de $5L/\text{min}$, a solução salina sobrenadante está a uma mesma vazão e é sabido também que a concentração de sal varia com o tempo.

Considerando que este sistema, após um tempo muito longo, atinge o seu estado estacionário, ou seja, quando o tempo t está tendendo a infinito ($t \rightarrow \infty$), qual é o valor da concentração final de sal neste instante?

- a) $C \approx 0,05 \text{ kg/L}$.
- b) $C \approx 0 \text{ kg/L}$.
- c) $C \approx 0,03 \text{ kg/L}$.
- d) $C \approx 0,01 \text{ kg/L}$.
- e) $C \approx 0,04 \text{ kg/L}$.

Seção 4.3

Balanço de massa em regime transiente com reação química

Diálogo aberto

Caro aluno, chegamos ao final dos nossos estudos de *Princípios de Processos Químicos*! Nesta unidade já aprendemos que os processos em bateladas e semicontínuos ocorrem em regime transiente e assimilamos os conceitos sobre o balanço de massa sem reação química nesse regime. Nesta última seção, vamos dar destaque aos processos semicontínuos e de bateladas com reações químicas, observando que os balanços de massa total, ou para um componente em processos em regime transiente (estado não estacionário), com reação química apresentam os termos de acúmulo, geração e consumo como sendo diferentes de zero.

Você foi contratado para operar uma planta de produção de Látex SBR. Nesse momento, o seu gestor solicitou que você realize uma análise com o objetivo de avaliar se a reação química está ocorrendo perante os dados de projeto, apresentando o perfil cinético de consumo do reagente limitante em função do tempo. Você já observou que, na empresa onde trabalha, o Látex SBR é fabricado em reatores em batelada devido ao extenso tempo de reação (12 horas) e a conversão da reação esperada é de 65%. Consultando os dados de projeto, você verificou que a reação química apresenta uma cinética de pseudoprimeira ordem, representada pela equação: $-dC_A/dt = k \times C_A$, onde a constante de velocidade é $k = 0,09 \text{ h}^{-1}$. O butadieno (A), reagente limitante, é alimentado no reator com uma concentração inicial de 0,5 kmol/L. Considerando que os reatores possuem uma mistura perfeita, qual é a concentração de butadieno que deixa os reatores em batelada para ser reciclada? A conversão da reação está adequada perante o projeto? Como os conceitos de balanço de massa podem ser utilizados para encontrar o perfil cinético solicitado pelo seu gestor?

A partir dos principais conceitos e variáveis envolvidas em processos em regime transiente, bem como dos tipos de configurações destes processos, contínuos, semicontínuos e em batelada, aprenderemos os cálculos de balanço molar utilizados

em situações com reações químicas. Dessa forma, você será capaz de identificar e analisar balanços de massa molar em processos em regime não estacionário com reações químicas e realizar cálculos utilizando planilhas eletrônicas. Os problemas abordados farão com que você desenvolva um raciocínio crítico, analítico, colaborativo e de flexibilidade na solução dos problemas envolvendo equações diferenciais ordinárias.

Nesta seção, veremos resoluções do balanço de massa em regime transiente aplicadas às planilhas eletrônicas. Bons estudos!

Não pode faltar

Os processos em batelada e semicontínuos ocorrem em regime transiente, enquanto que os processos contínuos acontecem tanto em regime permanente quanto transiente. Vamos dar destaque aos processos semicontínuos e bateladas nesta seção. Os balanços de massa total ou para um componente em processos em regime transiente (estado não estacionário) apresentam o termo de acúmulo como sendo diferente de zero, sendo que esses processos podem ocorrer sem e com reação química. A seguir, vamos detalhar os equacionamentos dos processos contínuos, semicontínuos e batelada, e seus respectivos exemplos.



Refleta

Você já imaginou que os conceitos de balanço de massa em regime transiente podem ser aplicados em diversos processos de produção na indústria química? Leia o artigo científico a seguir e veja um exemplo da aplicação desses conceitos no processo de fabricação da celulose:

AGUIAR, B. B. A.; CARDOSO, M.; COSTA JÚNIOR, E. F. **Modelagem e simulação dinâmica da fase gasosa de um forno rotativo para indústria de celulose**. Disponível em: <<http://revistas2.unibh.br/index.php/dcet/article/view/1787/1058>>. Acesso em: 21 jan. 2017.

O equacionamento dos processos contínuos será mostrado conforme já apresentado durante os nossos estudos nessa unidade de ensino, sendo que o balanço de massa total em processos contínuos em regime transiente é dado pela equação: $-\frac{dm}{dt} = \dot{m}_s - \dot{m}_e$, análoga à equação: acúmulo = saída – entrada.

Se o processo apresentar o envolvimento de uma reação química, o balanço de massa para um componente A em processos contínuos em regime transiente é dado pela equação: acúmulo = saída – entrada \pm geração/consumo. Substituindo os termos teremos $-\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{As} - \dot{m}_{Ae} \pm R_A$, onde (R_A) é o termo de consumo

ou de geração de A, dependendo se A for um reagente ($-R_A$) ou um produto ($+R_A$).

Geralmente, os problemas transientes estão relacionados com a necessidade de se descobrir a composição no sistema ou na corrente de saída, transcorridos um tempo de processo ou o tempo necessário para que se atinja uma dada composição neste sistema ou na corrente, dadas as condições de entrada e inicial do processo. Considerando todos os termos das equações de balanços, recai-se na solução de um sistema de equações diferenciais que deve ser resolvido numericamente. Para o problema ter solução analítica algumas simplificações são necessárias para a sua resolução.

Inicialmente, vamos considerar os processos envolvendo soluções ou suspensões na fase líquida que não apresentam reação química, ou seja $R_A = 0$. Consideram-se as massas específicas iguais e constantes das correntes de entrada e de saída e tem-se que o balanço desses processos pode ser representado da seguinte forma: $-\frac{dV}{dt} = \dot{V}_s - \dot{V}_e$, onde V representa o volume do sistema em um dado ponto.

Considerando que as vazões de entrada e de saída são iguais, $\dot{V}_s = \dot{V}_e = \dot{V}$, logo: $\frac{dV}{dt} = 0 \Rightarrow$ volume constante ($V = cte.$). Bem como, pode-se expressar a vazão mássica do componente A ou a massa em termos de concentração de A (C_A), a vazão mássica e a massa total em função da massa específica da mistura (ρ), de acordo com as equações que seguem, respectivamente: $\dot{m}_A = C_A \cdot \dot{V}$, $m_A = C_A \cdot V$, $\dot{m} = \rho \cdot \dot{V}$, $m = \rho \cdot V$.

Utilizando o conceito de vazão mássica do componente A para substituir o volume, temos a equação: $-\frac{dC_A}{dt} = C_{As} \cdot \dot{V}_s - C_{Ae} \cdot \dot{V}_e$.

Admitindo-se que o processo ocorra em um tanque com mistura perfeita, a concentração no interior do tanque será a mesma da saída, ou seja, $C_A = C_{As}$ e, sendo, $\dot{V}_s = \dot{V}_e = \dot{V}$, teremos a equação reduzida a: $\frac{dC_A}{dt} = \frac{\dot{V}}{V} \cdot (C_{Ae} - C_A)$. Rearranjando os termos e integrando do tempo zero ($t_0 \rightarrow C_{A0}$) até um tempo t ($t \rightarrow C_A$) qualquer,

$$\text{tem-se que: } \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_{Ae} - C_A} = \frac{\dot{V}}{V} \cdot \int_0^t dt.$$

Como o resultado da integração e conhecendo-se as condições inicial (C_{A0}) e de entrada (C_{Ae} e \dot{V}), podemos obter o tempo necessário para se atingir uma dada concentração de A na saída do sistema, através da equação: $t = \frac{V}{\dot{V}} \cdot \ln\left(\frac{C_{Ae} - C_{A0}}{C_{Ae} - C_A}\right)$, ou conhecer o valor da concentração de saída em um tempo qualquer, utilizando

a equação: $C_A = C_{Ae} - (C_{Ae} - C_{A0}) \cdot e^{-\frac{\dot{V}}{V}t}$.

O equacionamento dos processos semicontínuos diz respeito a uma simplificação da modelagem dos processos contínuos, em que uma das correntes de massa total ou de um componente A (de entrada ou de saída) não existe, ao considerar o equacionamento para processo contínuo apresentado anteriormente e que a alimentação não contenha A, ou seja, ($C_{Ae} = 0$), podemos simplificar as equações, obtendo: $t = \frac{\dot{V}}{V} \cdot \ln\left(\frac{C_{A0}}{C_A}\right)$ e $C_A = C_{A0} \cdot e^{-\frac{\dot{V}}{V}t}$.

No caso de existir só uma corrente de alimentação, ou seja, $\dot{V}_s = 0$, a simplificação da equação leva ao seguinte sistema de equações para ser resolvido: $\frac{dV}{dt} = \dot{V}$ e $\frac{dn_A}{dt} = \dot{m}_{Ae}$.

Para um processo com reação química com a participação de uma espécie A, tem-se que o balanço molar é dado por: $\frac{dn_A}{dt} = \pm R_A$, lembrando que (R_A) é o termo de consumo ou de geração de A, dependendo se A for um reagente ($-R_A$) ou um produto ($+R_A$), de uma reação que ocorra no volume de controle (processo). Como nos sistemas reacionais em batelada, as concentrações das espécies variam com o tempo, havendo formação de produtos e de consumo dos reagentes, os modelos cinéticos relacionam as velocidades de reação com as concentrações dos componentes envolvidos na reação. Ao considerar que A seja um reagente envolvido na reação: $aA \rightarrow bB$, supondo que a velocidade de reação de A seja dada por um modelo cinético de primeira ordem em relação a A, tem-se que: $r_A = k \cdot C_A$ (19), em que k é a constante da velocidade da reação. Substituindo o termo, ($R_A = r_A V$), e sabendo-se que A é um reagente, chega-se a: $-\frac{dn_A}{dt} = k \cdot C_A \cdot V$. Para integrar esta equação, precisa-se substituir o número de mols de A (n_A) por ($n_A = C_A V$), e considerando o volume do meio reacional constante ($V = cte.$), tem-se que $-\frac{dC_A}{dt} = -r_A = k \cdot C_A$, e integrando a equação do tempo zero ($t_0 \rightarrow C_{A0}$) até um tempo t ($t \rightarrow C_A$) qualquer, tem-se que: $t = \frac{\ln(C_{A0}/C_A)}{k}$.



Pesquise mais

Leia o artigo científico a seguir e conheça uma aplicação do balanço de massa com reação química:

SOUZA, M. F. F.; SANTANA, P. L. **Estudo do desempenho de reator de leito gotejante aplicado ao processo de hidrodessulfurização do petróleo**. Disponível em: <<https://www.scienciaplana.org.br/sp/article/view/3003/1438>>. Acesso em: 21 jan. 2017.

O balanço molar para o componente B (produto) pode ser equacionado de forma análoga ao balanço apresentado para o componente A (reagente) acima, considerando que o componente está sendo gerado no sistema.



Exemplificando

Seja um tanque cilíndrico de esvaziamento de diâmetro D , cuja saída na base do tanque é conectada a um tubo cilíndrico (orifício) de diâmetro d , contendo certa massa de líquido que escoar por gravidade através do tubo. Durante o escoamento, o nível de líquido no tanque (h) ou altura de líquido varia com o tempo, assim como a sua vazão de saída (\dot{V}_s). Considerando que ($D \gg d$), encontre as expressões para a variação de h e da vazão de saída com o tempo e trace o perfil da altura em função do tempo para os dados apresentados a seguir.

Encontre a solução utilizando uma planilha eletrônica, aplicando o método numérico de Runge-Kutta 4ª ordem (passo constante) de resolução das equações diferenciais ordinárias (EDO) de massa. Dados do problema:

$$D = 12\text{cm}$$

$$d = 0,8\text{cm}$$

$$g = 980\text{cm/s}^2$$

Dados do método Runge-Kutta:

$$t_0 = 0\text{s}$$

$$h_0 = 100\text{cm}$$

Fonte: adaptado de Badino Júnior e Cruz (2010, p. 221).

Solução analítica:

Modelagem de um processo semicontínuo:

Balanço de massa:

$$SAI = ENTRA + REAGE - ACUMULA$$

$$ENTRA = REAGE = 0$$

$$SAI = -ACUMULA(\text{ESVAZIAMENTO})$$

$$-\frac{dm}{dt} = \rho \dot{V}_s$$

$$-\frac{d(\rho V)}{dt} = \rho \dot{V}_s \quad \text{sendo } \rho = \text{cte.} \rightarrow \frac{dV}{dt} = -\dot{V}_s$$

O volume de água no cilindro é obtido multiplicando-se a área da base (A_b) pela altura (h): $V = A_b \cdot h$, em que $A_b = \frac{\pi \cdot D^2}{4}$, assim sendo:

$$\frac{d(A_b \cdot h)}{dt} = -\dot{V}_s, \text{ onde } A_b = \text{cte.}$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{-\dot{V}_s}{A_b}$$

Sendo que a última equação apresentada representa a EDO de 1ª ordem, que mostra a variação da altura do tanque em função do tempo.

Do balanço de energia:

$$\Delta \dot{E}_c + \Delta \dot{E}_p + \Delta \dot{H} = \dot{Q} + \dot{W}_e$$

Como não há trabalho no eixo (partes móveis) $\rightarrow (\dot{W}_e = 0)$, a temperatura é constante ($\Delta \dot{H} = 0$) e assume-se que não há troca de calor ($\dot{Q} = 0$), a equação é simplificada da seguinte forma:

$$\frac{1}{2} \cdot \dot{m} \cdot (v_2^2 - v_1^2) + \dot{m} \cdot g \cdot (h_2 - h_1) = 0$$

Como ($D \gg \gg \gg d$), assume-se que ($v_2 \gg \gg \gg v_1$) \Rightarrow hipótese de que a velocidade do nível de líquido no cilindro, v_1 , decresce a uma velocidade bem menor que a do líquido no orifício de saída, v_2 . Assumindo também que o nível 2 é zero, $h_2 = 0$ e resolvendo a equação, a velocidade em 2 é:

$v_2 = \sqrt{2 \cdot g \cdot h}$, a vazão de saída (\dot{V}_s) é dada por:

$$\dot{V}_s = a_s \cdot v_2. \text{ Em que a área da seção de escoamento é: } a_s = \frac{\pi \cdot d^2}{4}$$

Finalmente, substituindo as variáveis na equação que representa a EDO de

1ª ordem, temos: $\frac{dh}{dt} = -\frac{d^2 \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h}}{D^2}$, e integrando-a do tempo zero ($t_0 \rightarrow h_0$)

até um tempo t ($t \rightarrow h$) qualquer, a variação da altura com o tempo é dada pela equação (31), a seguir, que representa a equação da variação do nível do tanque cilíndrico (altura) em função do tempo.

$$h = \left(\frac{2 \cdot h_0^{1/2} - (d^2/D^2) \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot t}}{2} \right)^2$$

Para obter a vazão de saída em função da altura, e por consequência em função do tempo, basta substituir o valor da altura na equação:

$\dot{V}_s = a_s \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h}$, representa a vazão de saída em função da altura.

Solução na planilha Excel usando o método numérico Runge-Kutta (4ª ordem):

O problema pode ser resolvido tanto por uma planilha de cálculo simples quanto numericamente, integrando-se a equação que representa a EDO de 1ª ordem, sujeita à condição inicial ($t = 0 \rightarrow h(0) = h_0$), utilizando o método de Runge-Kutta (4ª ordem, passo constante).

Antes da implementação do problema no Excel, segue a sistematização do método Runge-Kutta, sem maiores detalhes numéricos a respeito do método:

É um dos métodos mais eficientes e comuns para resolver EDOs aplicados. Ele consiste em estimar o "iésimo" primeiro valor das variáveis t e h , a partir do "iésimo" valor, de acordo com as seguintes equações:

$$h(i+1) = h(i) + \frac{(r_1 + 2 \cdot r_2 + 2 \cdot r_3 + r_4)}{6}$$

$$\eta = dt \cdot f(t, h) \quad \text{e} \quad dt = \frac{(t_1 - t_0)}{2}$$

$$r_2 = dt \cdot f\left(t(i) + \frac{dt}{2}, h(i) + \frac{\eta}{2}\right)$$

$$r_3 = dt \cdot f\left(t(i) + \frac{dt}{2}, h(i) + \frac{r_2}{2}\right)$$

$$r_4 = dt \cdot f(t(i) + dt, h(i) + r_3)$$

Vale ressaltar que (i) é o valor atual e (i+1) o valor seguinte.

Siga os seguintes passos para a implementação das equações no Excel, usando o método Runge-Kutta:

- Construir uma planilha, considerando as condições de entrada e inicial do problema e dos dados do método:
- Selecione as células C9, D6, D7, H5, H6 e H7 e insira os dados do problema: células: C9=5, D6=0, D7=100, H5=12, H6 =0,8 e H7=980.
- Selecione as células J5 e J6 e insira as equações para o cálculo das áreas: $J5 = PI() * H5 ** 2 / 4$
 $J6 = PI() * H6 ** 2 / 4$

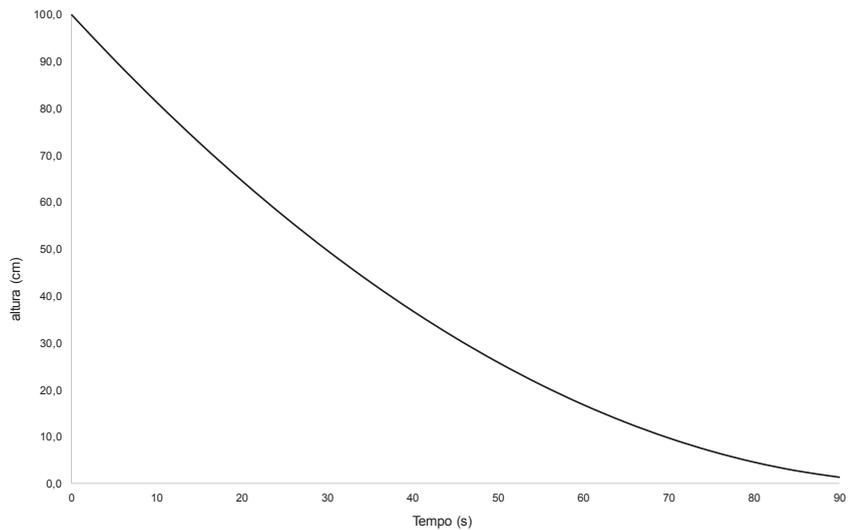
- Selecione as células F12 e F13 e insira, respectivamente,
 $F12 = D6$
- $F13 = F12 + \$C\9
- Puxe pela alça a célula F13 até a célula F31 e gere a coluna com os valores dos tempos.
- Selecione as células G12 e G13 e insira as fórmulas:
 $G12 = D7$
- $G13 = G12 + (I12 + 2 * J12 + 2 * K12 + L12) / 6$
- Selecione as células H12, I12, J12, K12 e L12 e digite as seguintes equações (ver as equações do método de Runge-Kutta):
 - Célula H12 → $= -RAIZ(2 * \$H\$7 * G12) * \$J\$6 / \$J\5
 - Célula I12 → $= \$C\$9 * H12$
 - Célula J12 →
 $= -\$C\$9 * (RAIZ(2 * \$H\$7 * (G12 + I12 / 2)) * \$J\$6 / \$J\$5)$
 - Célula K12 →
 $= -\$C\$9 * (RAIZ(2 * \$H\$7 * (G12 + J12 / 2)) * \$J\$6 / \$J\$5)$
 - Célula L12 →
 $= -\$C\$9 * (RAIZ(2 * \$H\$7 * (G12 + K12)) * \$J\$6 / \$J\$5)$
 - Marque as células H12, I12, J12, K12 e L12 e puxe (com auxílio da alça) até a linha 13.
 - Na sequência, marque as células F13, H13, I13, J13, K13 e L13 e puxe (com auxílio da alça) até a linha 31. E, finalmente, chega-se à solução do problema, destaques para as células F e G.
 - O gráfico da altura *versus* tempo é obtido do plote destas células F e G.

A seguir é apresentada a planilha de cálculo e o perfil da altura em função do tempo.

Figura 4.7 | Representação da planilha de cálculo utilizada

Método Runge-Kutta		t (s)	h (cm)	- dh/dt	r ₁	r ₂	r ₃	r ₄
t ₀	0	0	100,0	-1,9676	-9,8382	-9,5932	-9,5993	-9,3541
h ₀	100	5	90,4	-1,8708	-9,3542	-9,1091	-9,1156	-8,8701
dt	5	10	81,3	-1,7741	-8,8703	-8,6249	-8,6318	-8,3861
D	12	15	72,7	-1,6773	-8,3863	-8,1408	-8,1481	-7,9022
d	0,8	20	64,5	-1,5805	-7,9024	-7,6566	-7,6644	-7,4182
g	980	25	56,9	-1,4837	-7,4184	-7,1724	-7,1807	-6,9342
A	113,10	30	49,7	-1,3869	-6,9345	-6,6881	-6,6971	-6,4502
a	0,50	35	43,0	-1,2901	-6,4505	-6,2039	-6,2135	-5,9662
		40	36,8	-1,1933	-5,9666	-5,7195	-5,7299	-5,4822
		45	31,1	-1,0965	-5,4826	-5,2351	-5,2465	-4,9981
		50	25,8	-0,9997	-4,9987	-4,7506	-4,7632	-4,5141
		55	21,1	-0,9029	-4,5147	-4,2659	-4,2800	-4,0299
		60	16,8	-0,8062	-4,0308	-3,7811	-3,7970	-3,5457
		65	13,0	-0,7094	-3,5469	-3,2960	-3,3144	-3,0614
		70	9,7	-0,6126	-3,0629	-2,8105	-2,8322	-2,5768
		75	6,9	-0,5158	-2,5790	-2,3244	-2,3508	-2,0918
		80	4,5	-0,4190	-2,0950	-1,8372	-1,8709	-1,6057
		85	2,7	-0,3222	-1,6112	-1,3476	-1,3942	-1,1165
		90	1,3	-0,2255	-1,1275	-0,8518	-0,9268	-0,6117

Fonte: elaborada pela autora.

Figura 4.8 | Perfil da altura *versus* o tempo de esvaziamento do tanque

Fonte: elaborada pela autora.



Assimile

OLIVEIRA, S. C.; ZYMBERKNOPF, L.; STREML, D. P. **Estratégias de redução de modelos matemáticos aplicadas ao processo de produção de etanol em biorreator tubular de leito fixo com separadores externos gás-líquido.** Disponível em: <<http://pdf.blucher.com.br/s3-sa-east-1.amazonaws.com/chemicalengineeringproceedings/cobeq2014/0495-25226-173942.pdf>>. Acesso em: 21 jan. 2017.

Sem medo de errar

Contratado para operar uma planta de produção de Látex SBR, você verificou que o tempo de reação para a produção do Látex SBR é de 12 horas e que a conversão esperada é de 65%. Consultando o projeto da planta, observou que a reação química apresenta uma cinética de pseudoprimeira ordem, representada pela equação: $-\frac{dC_A}{dt} = k \times C_A$, onde a constante de velocidade é $k = 0,09 \text{ h}^{-1}$ e o butadieno (A) é o reagente limitante, alimentando o reator com uma concentração inicial de 0,5 kmol/L.

Considerando que os reatores possuem uma mistura perfeita, você precisa verificar a concentração de butadieno que deixa os reatores em batelada para ser reciclada, analisando se a conversão da reação está adequada conforme o projeto. Além dessa análise, você apresentará ao seu gestor o perfil cinético que representa o consumo do butadieno na reação.

Solução:

Para realizar os cálculos necessários, bem como plotar o perfil cinético que representa o consumo do butadieno na reação, requerido pelo seu gestor, você pode utilizar uma planilha eletrônica do Excel e o método Runge-Kutta para resolução equações diferenciais ordinárias (EDO), a seguir:

$$C_A(i+1) = C_A(i) + \frac{(\eta_1 + 2 \cdot r_2 + 2 \cdot r_3 + r_4)}{6}$$

$$\eta_1 = dt \cdot f(t, C_A) \quad \text{e} \quad dt = \frac{(t_1 - t_0)}{2}$$

$$r_2 = dt \cdot f\left(t(i) + \frac{dt}{2}, C_A(i) + \frac{\eta_1}{2}\right)$$

$$r_3 = dt \cdot f\left(t(i) + \frac{dt}{2}, C_A(i) + \frac{r_2}{2}\right)$$

$$r_4 = dt \cdot f(t(i) + dt, C_A(i) + r_3)$$

Os passos para a implementação do método na planilha eletrônica foram apresentados anteriormente e podem ser utilizados analogamente para a resolução deste problema. Após a implementação, a resolução completa pode ser observada através da Figura 4.9.

Observamos que a concentração de butadieno após 12 horas de reação é de 0,17 kmol/h e será reciclado de modo a retornar ao processo. Calculando a conversão da reação, observamos que o processo apresenta uma conversão de 66%, ou seja, o processo apresenta uma conversão da reação coerente com o valor projeto e, dessa forma, não haverá imperfeições quanto à especificação do produto.

$$X_A = \frac{(n_A)_{entrada} - (n_A)_{saida}}{(n_A)_{entrada}} = \frac{0,5 - 0,17}{0,5} = 0,66$$

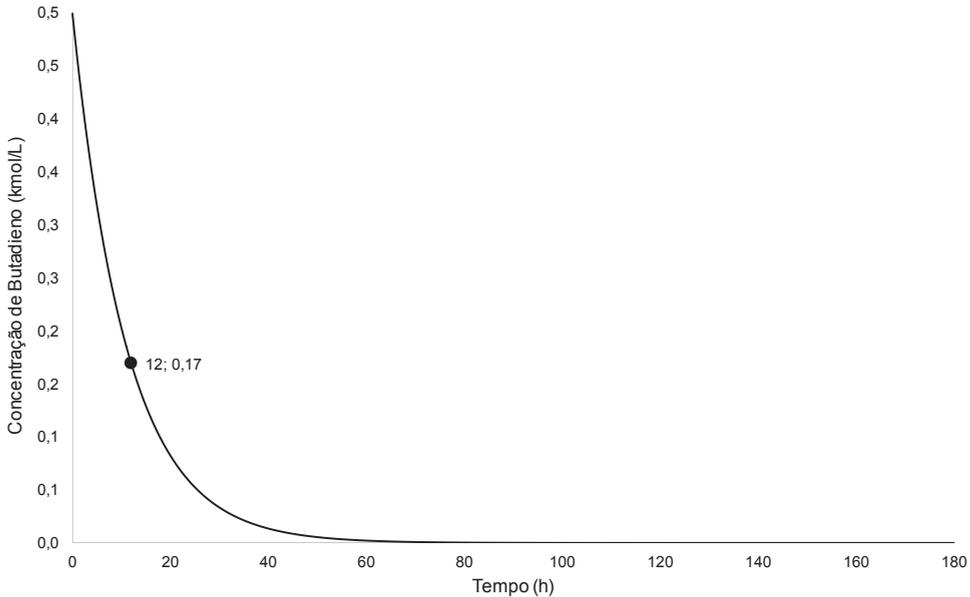
Figura 4.9 | Representação da planilha de cálculo utilizada para o cálculo do consumo do butadieno

Método Runge-Kutta		t (h)	C _A (kmol/h)	- dC _A /dt	r ₁	r ₂	r ₃	r ₄
t ₀ (h)	0	0	0,50	-0,0450	-0,0450	-0,0430	-0,0431	-0,0411
C _{A0} (kmol/h)	0,5	1	0,46	-0,0411	-0,0411	-0,0393	-0,0394	-0,0376
dt	1	2	0,42	-0,0376	-0,0376	-0,0359	-0,0360	-0,0343
k (h ⁻¹)	0,09	3	0,38	-0,0344	-0,0344	-0,0328	-0,0329	-0,0314
		4	0,35	-0,0314	-0,0314	-0,0300	-0,0300	-0,0287
		5	0,32	-0,0287	-0,0287	-0,0274	-0,0275	-0,0262
		6	0,29	-0,0262	-0,0262	-0,0250	-0,0251	-0,0240
		7	0,27	-0,0240	-0,0240	-0,0229	-0,0229	-0,0219
		8	0,24	-0,0219	-0,0219	-0,0209	-0,0210	-0,0200
		9	0,22	-0,0200	-0,0200	-0,0191	-0,0192	-0,0183
		10	0,20	-0,0183	-0,0183	-0,0175	-0,0175	-0,0167
		11	0,19	-0,0167	-0,0167	-0,0160	-0,0160	-0,0153
		12	0,17	-0,0153	-0,0153	-0,0146	-0,0146	-0,0140

Fonte: elaborada pela autora.

Utilizando os resultados apresentados pela Figura 4.9, pode-se traçar o perfil cinético requerido pelo seu gestor, como mostra a Figura 4.10. Observa-se que a reação poderia atingir uma conversão maior, porém, a quantidade de horas de reação também aumentaria, tornando o processo oneroso. A partir de 60 horas de reação a concentração de butadieno se torna constante, caracterizando o final na reação química.

Figura 4.10 | Perfil cinético da concentração do butadieno em função do tempo



Fonte: elaborada pela autora.

Avançando na prática

Variação do tamanho do passo na utilização do método de Runge-Kutta para um reator descontínuo de 1ª ordem

Descrição da situação-problema

Em um reator em batelada há um componente A, com uma concentração inicial de $C_{A0} = 2 \text{ mol/L}$, onde ocorrerá uma reação de degradação. A reação química é de 1ª ordem com uma constante cinética dada pela equação: $-\frac{dC_A}{dt} = k \times C_A$, e uma constante de velocidade $k = 0,05 \text{ s}^{-1}$. Responsável por esse processo, você precisa saber qual é o tempo necessário para que a concentração seja reduzida pela metade ($C_A = 1 \text{ mol/L}$) e analisar o comportamento do consumo do reagente. Como você poderá utilizar a planilha eletrônica do Excel para calcular o tempo e plotar o perfil do consumo desse reagente em função do tempo?

Resolução da situação-problema

Implementando as equações já apresentadas anteriormente, que representam uma reação de primeira ordem em função da concentração do reagente e do tempo de reação, em uma planilha eletrônica e solucionando-as através do

método de Runge-Kutta, utilizando-se do passo "dt"=1, são obtidos os resultados apresentados pela Figura 4.11.

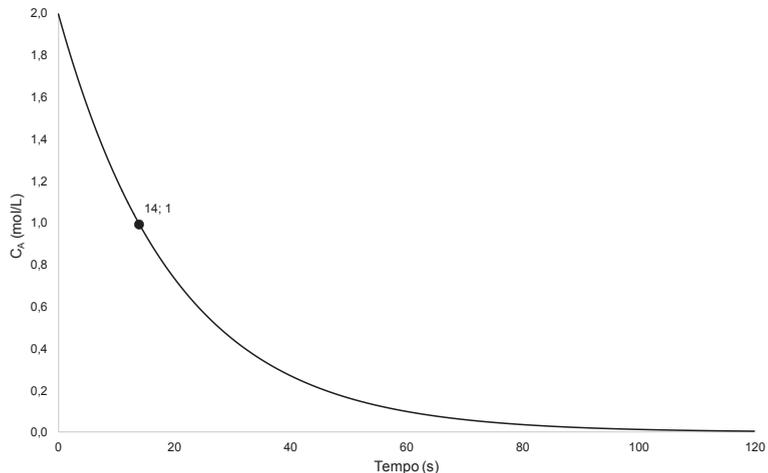
Figura 4.11 | Representação da planilha de cálculo utilizada para o cálculo do consumo do reagente A

Método Runge-Kutta		t (s)	C _A (mol/L)	- dC _A /dt	r ₁	r ₂	r ₃	r ₄
t ₀ (s)	0	0	2,00	-0,1000	-0,1000	-0,0975	-0,0976	-0,0951
C _{A0} (mol/L)	2	1	1,90	-0,0951	-0,0951	-0,0927	-0,0928	-0,0905
dt	1	2	1,81	-0,0905	-0,0905	-0,0882	-0,0883	-0,0861
k (s ⁻¹)	0,05	3	1,72	-0,0861	-0,0861	-0,0839	-0,0840	-0,0819
		4	1,64	-0,0819	-0,0819	-0,0798	-0,0799	-0,0779
		5	1,56	-0,0779	-0,0779	-0,0759	-0,0760	-0,0741
		6	1,48	-0,0741	-0,0741	-0,0722	-0,0723	-0,0705
		7	1,41	-0,0705	-0,0705	-0,0687	-0,0688	-0,0670
		8	1,34	-0,0670	-0,0670	-0,0654	-0,0654	-0,0638
		9	1,28	-0,0638	-0,0638	-0,0622	-0,0622	-0,0607
		10	1,21	-0,0607	-0,0607	-0,0591	-0,0592	-0,0577
		11	1,15	-0,0577	-0,0577	-0,0563	-0,0563	-0,0549
		12	1,10	-0,0549	-0,0549	-0,0535	-0,0535	-0,0522
		13	1,04	-0,0522	-0,0522	-0,0509	-0,0509	-0,0497
		14	0,99	-0,0497	-0,0497	-0,0484	-0,0484	-0,0472

Fonte: elaborada pela autora.

Observa-se que o tempo necessário para que a concentração seja reduzida pela metade é de 14 segundos após o início da reação. Podemos observar também que a reação química é finalizada com 120 segundos de reação, onde o reagente é completamente consumido.

Figura 4.12 | Perfil cinético da concentração do reagente A em função do tempo



Fonte: elaborada pela autora.

Faça valer a pena

1. Os processos em batelada envolvendo reação química são bastante difundidos em problemas com regime transiente e podem ser resolvidos utilizando-se planilhas eletrônicas aplicando-se o método Runge-Kutta 4ª ordem, para resolver a EDO (equação diferencial ordinária) para uma reação química de 1ª ordem em um reator descontínuo.

Considere o reator utilizado, com a sua respectiva EDO: $-\frac{dC_A}{dt} = k \times C_A$ e as condições preestabelecidas para o consumo de um reagente A em uma reação química de 1º ordem, $C_{A0} = 5 \text{ kmol/L}$ e $k = 0,09 \text{ h}^{-1}$, cujo objetivo é descobrir o tempo necessário para que a concentração (C_A) seja reduzida para $1,7 \text{ kmol/L}$.

Fonte: adaptado de Moura (2007, p. 115).

O resumo da planilha do Excel para a concentração em função do tempo, utilizando o método de Runge-Kutta é apresentada a seguir:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1												
2												
3												
4												
5												
6			Método Runge-Kutta			t (h)	C_A (kmol/h)	$-dC_A/dt$	r_1	r_2	r_3	r_4
7			t_0 (h)	0		0	5,00	-0,4500	-0,4500	-0,4298	-0,4307	-0,4112
8			C_{A0} (kmol/h)	5		1	4,57	-0,4113	-0,4113	-0,3928	-0,3936	-0,3758
9			dt	1		2	4,18	-0,3759	-0,3759	-0,3590	-0,3597	-0,3435
10			k (h^{-1})	0,09		3	3,82	-0,3435	-0,3435	-0,3281	-0,3288	-0,3139
11						4	3,49	-0,3140	-0,3140	-0,2998	-0,3005	-0,2869
12						5	3,19	-0,2869	-0,2869	-0,2740	-0,2746	-0,2622
13						6	2,91	-0,2622	-0,2622	-0,2504	-0,2510	-0,2396
14						7	2,66	-0,2397	-0,2397	-0,2289	-0,2294	-0,2190
15						8	2,43	-0,2190	-0,2190	-0,2092	-0,2096	-0,2002
16						9	2,22	-0,2002	-0,2002	-0,1912	-0,1916	-0,1829
17						10	2,03	-0,1830	-0,1830	-0,1747	-0,1751	-0,1672
18						11	1,86	-0,1672	-0,1672	-0,1597	-0,1600	-0,1528
19						12	1,70	-0,1528	-0,1528	-0,1459	-0,1463	-0,1397

Fonte: elaborada pela autora.

Sabendo que a solução analítica para o tempo é dada pela equação $t = \frac{\ln(C_{A0}/C_A)}{k}$, marque a alternativa que apresenta a inserção correta dessa equação na planilha eletrônica de modo a se obter o mesmo resultado indicado:

- a) = LN(D8/G19)/D10 .
- b) = LN(D8/G5)/D3 .
- c) = LN(G19/D8)/D4 .
- d) = LN(D5/G19)/D4 .
- e) = LN(D5/G12)/D4 .

2. Os processos em batelada envolvendo reação química são bastante difundidos em problemas com regime transiente e podem ser resolvidos utilizando-se planilhas eletrônicas aplicando-se do método Runge-Kutta 4ª ordem, para resolver a EDO (equação diferencial ordinária) para uma reação química de 1ª ordem em um reator descontínuo.

Considere o reator utilizado, com a sua respectiva EDO: $-\frac{dC_A}{dt} = k \times C_A$ e as condições preestabelecidas para o consumo de um reagente A em uma reação química de 1º ordem, $C_{A0} = 5 \text{ kmol/L}$ e $k = 0,09 \text{ h}^{-1}$, cujo objetivo é descobrir o tempo necessário para que a concentração (C_A) seja reduzida para 1,7 kmol/L.

Fonte: adaptado de Moura (2007, p. 115).

O resumo da planilha do Excel para a concentração em função do tempo, utilizando o método de Runge-Kutta é apresentada a seguir:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1												
2												
3												
4												
5												
6			Método Runge-Kutta			t (h)	C_A (kmol/h)	$-dC_A/dt$	r_1	r_2	r_3	r_4
7			t_0 (h)	0		0	5,00	-0,4500	-0,4500	-0,4298	-0,4307	-0,4112
8			C_{A0} (kmol/h)	5		1	4,57	-0,4113	-0,4113	-0,3928	-0,3936	-0,3758
9			dt	1		2	4,18	-0,3759	-0,3759	-0,3590	-0,3597	-0,3435
10			k (h^{-1})	0,09		3	3,82	-0,3435	-0,3435	-0,3281	-0,3288	-0,3139
11						4	3,49	-0,3140	-0,3140	-0,2998	-0,3005	-0,2869
12						5	3,19	-0,2869	-0,2869	-0,2740	-0,2746	-0,2622
13						6	2,91	-0,2622	-0,2622	-0,2504	-0,2510	-0,2396
14						7	2,66	-0,2397	-0,2397	-0,2289	-0,2294	-0,2190
15						8	2,43	-0,2190	-0,2190	-0,2092	-0,2096	-0,2002
16						9	2,22	-0,2002	-0,2002	-0,1912	-0,1916	-0,1829
17						10	2,03	-0,1830	-0,1830	-0,1747	-0,1751	-0,1672
18						11	1,86	-0,1672	-0,1672	-0,1597	-0,1600	-0,1528
19						12	1,70	-0,1528	-0,1528	-0,1459	-0,1463	-0,1397

Fonte: elaborada pela autora.

A solução numérica dada para a variável C_A segue o método de Runge-Kutta para o cálculo da concentração final e a fórmula contida na célula G19 para o cálculo da concentração é:

- $C_{A0} + (\eta_1 + 2 \times \eta_2 + 2 \times \eta_3 + \eta_4) / 6$.
- $C_A + (\eta_1 + 2 \times \eta_2 + 2 \times \eta_3 + \eta_4) / 6$.
- $C_{At} + (\eta_1 + 2 \times \eta_2 + 2 \times \eta_3 + \eta_4) / 6$.
- $C_A + (\eta_1 + 2 \times \eta_2 + 2 \times \eta_3 + \eta_4) / 6$.
- $C_A + (\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4) / 6$.

3. Os processos em batelada e semicontínuos ocorrem em regime transiente, enquanto que os processos contínuos ocorrem tanto em regime permanente quanto transiente. Considerando um processo semicontínuo, o seu comportamento dinâmico é bastante estudado, em que os balanços de massa total ou para um componente nestes processos em regime transiente apresentam o termo de acúmulo como sendo diferente de zero. Geralmente, são problemas resolvidos numericamente, com o objetivo de se observar como as variáveis mais importantes para o processo se comportam em função do tempo.

Seja um tanque cilíndrico de esvaziamento de diâmetro D , cuja saída na base do tanque é conectada a tubo cilíndrico (orifício) de diâmetro d , contendo certa massa de líquido que escoar por gravidade através do tubo. Durante o escoamento, o nível de líquido no tanque (h) ou altura de líquido varia com o tempo, assim como a sua vazão de saída (\dot{V}_s). O problema foi resolvido pelo método numérico Runge-Kutta 4ª ordem implementado em uma planilha eletrônica, apresentada a seguir:

Fonte: adaptado de Badino Júnior e Cruz (2010, p. 221).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1												
2												
3												
4			Método Runge-Kutta			t (s)	h (cm)	- dh/dt	r ₁	r ₂	r ₃	r ₄
5			t ₀	0		0	100,0	-1,9676	-9,8382	-9,5932	-9,5993	-9,3541
6			h ₀	100		5	90,4	-1,8708	-9,3542	-9,1091	-9,1156	-8,8701
7			dt	5		10	81,3	-1,7741	-8,8703	-8,6249	-8,6318	-8,3861
8			D	12		15	72,7	-1,6773	-8,3863	-8,1408	-8,1481	-7,9022
9			d	0,8		20	64,5	-1,5805	-7,9024	-7,6566	-7,6644	-7,4182
10			g	980		25	56,9	-1,4837	-7,4184	-7,1724	-7,1807	-6,9342
11			A	113,10		30	49,7	-1,3869	-6,9345	-6,6881	-6,6971	-6,4502
12			a	0,50		35	43,0	-1,2901	-6,4505	-6,2039	-6,2135	-5,9662
13						40	36,8	-1,1933	-5,9666	-5,7195	-5,7299	-5,4822
14						45	31,1	-1,0965	-5,4826	-5,2351	-5,2465	-4,9981
15						50	25,8	-0,9997	-4,9987	-4,7506	-4,7632	-4,5141
16						55	21,1	-0,9029	-4,5147	-4,2659	-4,2800	-4,0299
17						60	16,8	-0,8062	-4,0308	-3,7811	-3,7970	-3,5457
18						65	13,0	-0,7094	-3,5469	-3,2960	-3,3144	-3,0614
19						70	9,7	-0,6126	-3,0629	-2,8105	-2,8322	-2,5768
20						75	6,9	-0,5158	-2,5790	-2,3244	-2,3508	-2,0918
21						80	4,5	-0,4190	-2,0950	-1,8372	-1,8709	-1,6057
22						85	2,7	-0,3222	-1,6112	-1,3476	-1,3942	-1,1165
23						90	1,3	-0,2255	-1,1275	-0,8518	-0,9268	-0,6117

Fonte:elaborada pela autora.

O nível de líquido (altura) é calculado iterativamente para cada tempo na coluna G. Considerando o valor calculado através do método numérico Runge-Kutta apresentado na célula G6, a fórmula especificada para esta célula é:

$$a) = D5 + (G5 + 2 \times I5 + 2 \times J5 + K5) / 6,$$

$$b) = F5 + (G5 + 2 \times H5 + 2 \times I5 + J5) / 6,$$

$$c) = G5 + (I5 + 2 \times J5 + 2 \times K5 + L5) / 6.$$

$$d) = G_{23} + (I_{23} + 2 \times J_{23} + 2 \times K_{23} + L_{23}) / 6 .$$

$$e) = D_6 + (G_6 + 2 \times I_6 + 2 \times J_6 + K_6) / 6 .$$

Referências

- AGUIAR, B. B. A.; CARDOSO, M.; COSTA JÚNIOR, E. F. Modelagem e simulação dinâmica da fase gasosa de um forno rotativo para indústria de celulose. **E-Xacta**, v. 9, n. 2, 2016. Disponível em: <<http://revistas2.unibh.br/index.php/dcet/article/view/1787/1058>>. Acesso em: 21 jan. 2017.
- BADINO JÚNIOR, A. C.; CRUZ, A. J. G. **Fundamentos de balanços de massa e energia**: um texto básico para a análise de processos químicos. São Carlos, SP: EdUScar, 2010.
- FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W. **Princípios elementares dos processos químicos**. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011.
- GHASEM, N.; HENDA, R. **Principles of chemical engineering processes-material and energy balances**. 2. ed. New York: CRC Press, 2015.
- HIMMELBLAU, D. M.; RIGGS, J. B. **Engenharia química**: princípios e cálculos. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.
- MILLI, B. B.; GRIPA, D. C.; SIMONELLI, G.; ALVES, V. M. Análise do processo de mistura de água e cal utilizando o SCILAB. **Enciclopédia Biosfera**, Centro Científico Conhecer, Goiânia, v. 7, n. 13, p. 1711-1719, 2011. Disponível em: <<http://www.conhecer.org.br/enciclop/2011b/engenharias/analise%20do%20processo.pdf>>. Acesso em: 8 dez. 2016.
- MOURA, L. F. **Excel para engenharia**: formas simples para resolver problemas complexos. São Carlos, SP: Ed. Ufscar, 2007.
- OLIVEIRA, S. C.; ZYMBERKNOPF, L.; STREMEL, D. P. Estratégias de redução de modelos matemáticos aplicadas ao processo de produção de etanol em biorreator tubular de leito fixo com separadores externos gás-líquido. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 20., 2014. **Anais...** Florianópolis: COBEC, 19-22 out. 2014. Disponível em: <<http://pdf.blucher.com.br.s3-sa-east-1.amazonaws.com/chemicalengineeringproceedings/cobeq2014/0495-25226-173942.pdf>>. Acesso em: 21 jan. 2017.
- SAWAKI, R. V. et al. Modelagem e simulação do desempenho de reatores de fluxo contínuo e em batelada no tratamento de efluente têxtil utilizando o software livre Python. CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA EM INICIAÇÃO CIENTÍFICA, 11., 2015. Campinas. **Anais...** Campinas: Unicamp, 19-22 jul. 2015. Disponível em: <<http://pdf.blucher.com.br.s3-sa-east-1.amazonaws.com/chemicalengineeringproceedings/cobeqic2015/311-33902-260242.pdf>>. Acesso em: 8 jan. 2017.

SOUZA, M. F. F.; SANTANA, P. L. Estudo do desempenho de reator de leito gotejante aplicado ao processo de hidrodessulfurização do petróleo. **Scientia Plena**, v. 12, n. 5, 2016. Disponível em: <<https://www.scientiaplenu.org.br/sp/article/view/3003/1438>>. Acesso em: 21 jan. 2017.

TERRON, L. A. **Operações unitárias para químicos, farmacêuticos e engenheiros: fundamentos e operações unitárias do escoamento de fluidos**. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

ISBN 978-85-8482-864-7



9 788584 828647 >