

Questão nº 1

Padrão de Resposta Esperado:

Sabe-se que

$$K_{eq} = \frac{k_d}{k_i} \quad (1)$$

em que K_{eq} é a constante de equilíbrio, k_d é a constante da velocidade da reação direta e k_i , a constante da velocidade da reação inversa. Por outro lado,

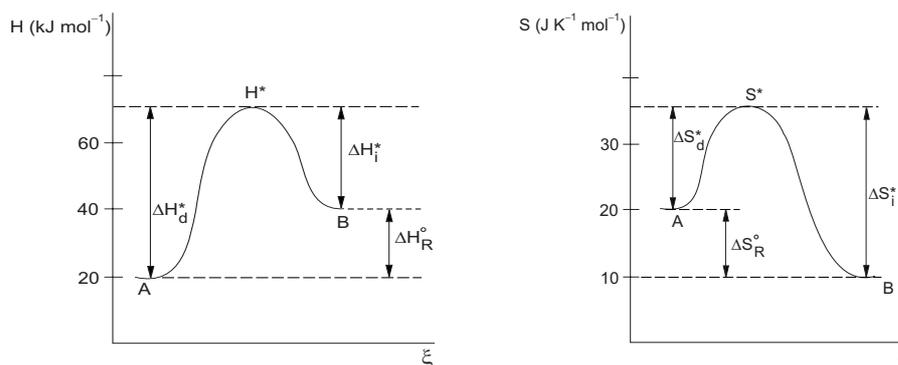
$$K_{eq} = \exp\left(-\frac{\Delta G_R^0}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{\Delta H_R^0}{RT} + \frac{\Delta S_R^0}{R}\right) \quad (2)$$

em que

$$\Delta H_R^0 = \Delta H_d^* - \Delta H_i^* \quad (3)$$

$$\Delta S_R^0 = \Delta S_d^* - \Delta S_i^* \quad (4)$$

As grandezas designadas por * estão identificadas nas figuras abaixo.



A partir dos gráficos, obtém-se:

$$\Delta H_d^* = 70 - 20 = 50 \text{ kJ mol}^{-1}; \quad \Delta H_i^* = 70 - 40 = 30 \text{ kJ mol}^{-1};$$

$$\Delta S_d^* = 35 - 20 = 15 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}; \quad \Delta S_i^* = 35 - 10 = 25 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

Portanto, de (3) e (4) obtém-se:

$$\Delta H_R^0 = 20 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta S_R^0 = -10 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

Os valores acima podem ser obtidos, alternativamente, sem o uso do estado intermediário do complexo, como também mostram as figuras.

Da equação (2), obtém-se:

$$K_{eq} = \exp\left(-\frac{20 \times 10^3}{8,314 \times 500} - \frac{10}{8,314}\right) = 2,44 \times 10^{-3}$$

Da equação (1), resulta:

$$k_i = \frac{0,01}{2,44 \times 10^{-3}} = 4,09 \text{ s}^{-1}$$

(valor: 10,0 pontos)

Questão nº 2

Padrão de Resposta Esperado:

Processo A: termodinamicamente **inviável**.

Justificativa: embora o fluxo de calor seja constante ao longo da parede, de acordo com a 1ª Lei da Termodinâmica (conservação de energia), o fluxo de entropia diminui, o que é termodinamicamente inviável, pois viola a 2ª Lei da Termodinâmica (não-destruição da entropia).

Processo B: termodinamicamente **viável**.

Justificativa: o fluxo de calor é constante ao longo da parede, de acordo com 1ª Lei da Termodinâmica, e o fluxo de entropia aumenta ao longo da parede, de acordo com a 2ª Lei da Termodinâmica (geração de entropia num processo de transferência de calor).

Processo C: termodinamicamente **inviável**.

Justificativa: embora o fluxo de entropia aumente ao longo da parede, o que é termodinamicamente viável pela 2ª Lei da Termodinâmica (geração de entropia), o fluxo de calor aumenta, o que contraria a 1ª Lei da Termodinâmica. **(valor: 10,0 pontos)**

Questão nº 3

Padrão de Resposta Esperado:

a) A conversão pode diminuir porque o aumento da vazão F_{A0} também provoca uma redução do tempo de residência de A no reator e, conseqüentemente, da sua conversão. **(valor: 5,0 pontos)**

b) O coeficiente de transporte k_m é uma medida da facilidade com que uma dada substância (no caso, B) passará através da membrana. Quanto maior o valor de k_m , mais facilmente o produto B será retirado do reator. Com isso, haverá um deslocamento da reação no sentido de se produzir mais B (Princípio de Le Chatelier), aumentando a conversão do reagente A. **(valor: 5,0 pontos)**

Questão nº 4

Padrão de Resposta Esperado:

O valor da razão

$$\frac{L_s}{A} = \frac{2L_s}{2A} = 24,4 \text{ kg de sólido seco por m}^2 \text{ de superfície exposta é o mesmo para ambos os casos.}$$

Em função da simetria, R_c é constante e igual nos dois casos.

Logo:

$$t = \frac{2L_s}{2AR_c} (X_i - X_f) = \frac{24,4}{2,05} (0,55 - 0,05) \Rightarrow t = 5,95 \text{ h} \quad \textbf{(valor: 10,0 pontos)}$$

Questão nº 5

Padrão de Resposta Esperado:

- Extração empregando **hexano** como solvente: o processo é realizado em pressão atmosférica. Portanto, a sua operação é menos dispendiosa e utiliza equipamentos mais simples. O produto obtido exige, no entanto, cuidadosa retirada do solvente para torná-lo adequado ao consumo humano e animal, face à toxicidade do hexano. Dos pontos de vista de segurança e ambiental, o hexano exige cuidados especiais no seu manuseio por ser explosivo e tóxico (solvente orgânico volátil).
- Extração empregando **etanol** como solvente: o etanol é mais volátil e menos tóxico do que o hexano. Portanto, é mais seguro, gerando produtos mais adequados para o consumo humano e animal. A extração a pressão mais elevada do que a atmosférica exige equipamentos e soluções de engenharia mais dispendiosos.
- Extração empregando **CO₂** como solvente: o CO₂ tem a vantagem de ser inócuo à saúde (humana e animal) e não apresentar riscos de toxicidade ambiental. Além disso, não é explosivo. Todavia, as altas pressões de operação necessárias para a processo tornam os custos (equipamentos e operação) mais elevados em comparação com os processos de extração com solventes orgânicos. **(valor: 10,0 pontos)**

Questão nº 6

Padrão de Resposta Esperado:

- a) Como há necessidade de similaridade dinâmica para que os resultados do modelo tenham uma relação com os do agitador a ser projetado, os grupos adimensionais apresentados devem permanecer constantes.

Dessa forma, utilizando o terceiro grupo:

$$\frac{g}{\omega_m^2 D_m} = \frac{g}{\omega_A^2 D_A} \Rightarrow \left(\frac{\omega_m}{\omega_A} \right)^2 = \frac{D_A}{D_m} = \frac{4}{1} \Rightarrow \frac{\omega_m}{\omega_A} = 2 \quad (\text{valor: 6,0 pontos})$$

- b) Utilizando o segundo grupo adimensional:

$$\frac{\mu_m}{D_m^2 \omega_m \rho_m} = \frac{\mu_A}{D_A^2 \omega_A \rho_A} \Rightarrow \frac{\mu_m \rho_A}{\mu_A \rho_m} = \left(\frac{D_m}{D_A} \right)^2 \frac{\omega_m}{\omega_A} = \left(\frac{1}{4} \right)^2 \times 2 = \frac{1}{8}$$

Como $\mu_A = 4,0 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$ e $\rho_A = 1 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$, temos que o fluido a ser utilizado no modelo deve ter as suas viscosidade e massa específica relacionadas da seguinte forma, nas unidades utilizadas:

$$\frac{\mu_m 1 \times 10^3}{4,0 \times 10^{-3} \rho_m} = \frac{1}{8} \Rightarrow \frac{\mu_m}{\rho_m} = \frac{1}{2} \times 10^{-6}$$

O fluido que satisfaz as condições requeridas é o B.

(valor: 4,0 pontos)

Questão nº 7

Padrão de Resposta Esperado:

- a) Considerando saturação na superfície do clorofórmio:

$$y_{A,s} = 26,6 \text{ kPa} / 101,3 \text{ kPa} \Rightarrow y_{A,s} = 0,263$$

Substituindo na expressão os dados fornecidos pelo experimento:

$$D_{AB} = \frac{1.480}{119} \frac{1}{0,0409 \ln \left[\frac{1-0}{1-0,263} \right]} 36.000 \left(\frac{0,0784^2 - 0,074^2}{2} \right)$$

$$D_{AB} = 9,28 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

(valor: 8,0 pontos)

- b) A característica que permite a adoção da hipótese de regime pseudo-estacionário é o fato de a taxa de evaporação ser muito pequena. (valor: 2,0 pontos)

Questão nº 8

Padrão de Resposta Esperado:

- a) O programa representa uma reação do tipo $A + B \Rightarrow C + D$, irreversível, de segunda ordem ($n = 2$), pois se trata de uma reação de primeira ordem em relação a A e de primeira ordem em relação a B, conforme a equação da linha 10, na janela do *ODE Solver* (à esquerda). **(valor: 3,0 pontos)**
- b) Trata-se de um reator semicontínuo (ou semibatelada). Isso pode ser verificado pelas equações de balanço (linhas 1–4) e pela vazão de alimentação de B ($v_{00} = 0,05$). Da linha 8 e do gráfico de trajetórias, há uma concentração inicial de A ($Ca_0 = 0,05$) e B aumenta seu valor com o tempo. **(valor: 3,0 pontos)**
- c) Após 100 unidades de tempo, a concentração molar cai de $Ca_0 = 0,05$ para aproximadamente $Ca = 0,015$ unidades de concentração molar. Da linha 12, temos que a conversão (X) pode ser calculada pela equação

$$X = (Ca_0 \cdot v_0 - Ca \cdot v) / (Ca_0 \cdot v_0)$$

e, da linha 11, $v = v_0 + v_{00} \cdot t$ com $v_{00} = 0,05$.

Como da linha 8, $v_0 = 5$, temos:

$$X = [0,05 \cdot 5 - 0,015 \cdot (5 + 0,05 \cdot 100)] / (0,05 \cdot 5)$$

$$X = (0,25 - 0,15) / 0,25$$

$$X = 0,10 / 0,25 = 0,4$$

Portanto, a conversão de A, decorridas 100 unidades de tempo do início da reação, será 40%.

(valor: 4,0 pontos)

Questão nº 9

Padrão de Resposta Esperado:

1. Absorvedora ou coluna de absorção.

Função: remover o O_2 e N_2 da mistura de gases ($CO_2 + O_2 + N_2 + H_2O + \text{etanol}$) retirada da dorna de fermentação, por absorção do CO_2 em um solvente líquido.

2. Trocador de calor.

Função: reduzir a temperatura do solvente líquido, de modo a aumentar a solubilidade do CO_2 , para tornar possível a operação de absorção.

3. Coluna de esgotamento (stripping) do CO_2 .

Função: retirar (separar) o CO_2 do solvente líquido por aumento de temperatura.

4. Compressor.

Função: aumentar a pressão do gás para permitir a condensação a temperaturas tecnicamente viáveis.

5. Trocador de calor.

Função: reduzir a temperatura do gás comprimido, facilitando a compressão do segundo estágio.

6. Coluna de adsorção.

Função: retirar a umidade da mistura gasosa, evitando a formação de gelo no trocador seguinte.

7. Controlador de nível.

Função: manter o selo líquido no fundo da torre absorvedora.

8. Válvula de segurança e alívio.

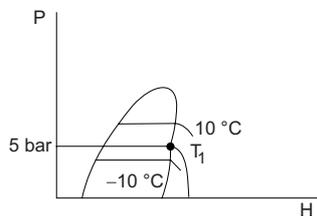
Função: impedir danos físicos provocados pela elevação da pressão acima dos níveis preestabelecidos nos equipamentos.

(valor: 10,0 pontos)

Questão nº 10

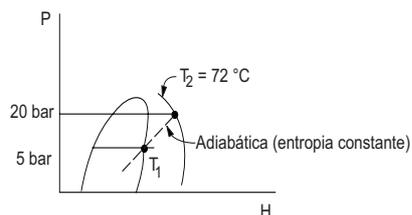
Padrão de Resposta Esperado:

a) Do diagrama: $T_1 \sim -5\text{ °C}$



(valor: 1,5 ponto)

b) Do diagrama: $T_2 \sim 72\text{ °C}$



(valor: 1,5 ponto)

c) A 30 °C e 20 bar : $H_1 \sim 770\text{ kJ kg}^{-1}$

a -5 °C e 5 bar : $H_2 \sim 1.060\text{ kJ kg}^{-1}$

Logo: $\Delta H = 1.060 - 770 = 290\text{ kJ kg}^{-1}$

$m_{\text{gás}} = 290.000/290 = 1.000\text{ kg h}^{-1}$

(valor: 4,0 pontos)

d) Cálculo da carga térmica do condensador. Do diagrama:

– a 72 °C e 20 bar : $H_1 \sim 1.130\text{ kJ kg}^{-1}$

– a 30 °C e 20 bar : $H_2 \sim 770\text{ kJ kg}^{-1}$

Portanto: $\Delta H = -360\text{ kJ kg}^{-1}$

Para 1.000 kg h^{-1} : $Q = -360.000\text{ kJ h}^{-1}$

(valor: 3,0 pontos)