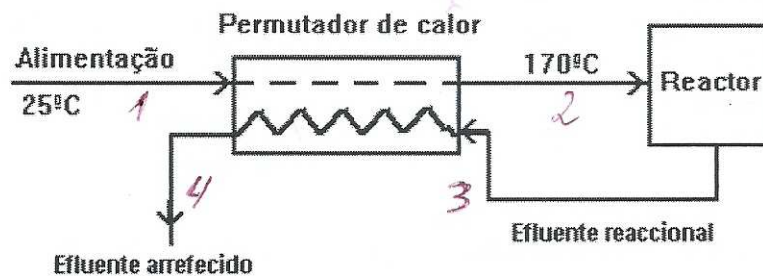


Caso 2.2

Os constituintes de uma gasolina (hidrocarbonetos em C_8) podem ser obtidos por reacção de alquilação entre o iso-buteno (C_4H_8) e o isobutano (C_4H_{10}), de modo a produzir iso-octano e di-isobutilo, respectivamente segundo as reacções:



O efluente reaccional é arrefecido, num permutador de calor, por circulação em contra corrente com os reagentes. Apresenta-se seguidamente o diagrama de blocos simplificado do processo e a correspondente tabela de entradas e saídas (em kmoles)



	Alimentação	Efluente
isobuteno	19,5	0,5
isobutano	79,5	60,5
iso-octano	-	11,0
di-isobutilo	-	8,0

Admitindo que:

- * as perdas caloríficas no reactor e nas tubagens não são significativas;
- * o arrefecimento do efluente do reactor não provoca condensação de qualquer dos constituintes;
- * as capacidades caloríficas dos gases (cal/mol, K) são descritas por:

$$C_4H_8 \quad C_p^0 = 1,65 + 0,07702 T \text{ (K)}$$

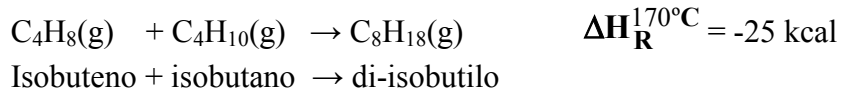
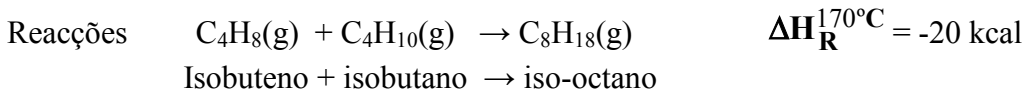
$$C_4H_{10} \quad C_p^0 = -1,89 + 0,09936 T \text{ (K)}$$

$$C_8H_{18} \text{ (iso-octano)} \quad C_p^0 = 43,4$$

$$C_8H_{18} \text{ (di-isobutilo)} \quad C_p^0 = 42,6$$

determine a temperatura da mistura gasosa à saída do permutador de calor. (R: 149,5 °C)

Balanco de massa (dado no enunciado)

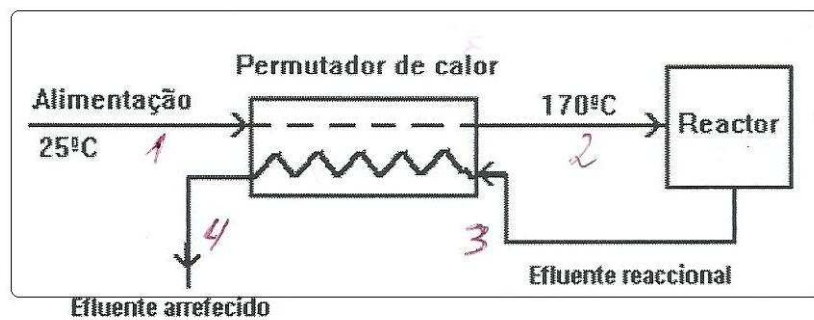


Kmole	Alimentação	Efluente
Isobuteno	19,5	0,5
Isobutano	79,5	60,5
Iso-octano		11
Di-isobutilo		8

Balanco entálpico

Neste problema nada se diz sobre a temperatura da corrente (3) nem nada é perguntado. Assim é preferível alargar o balanço para que esta corrente se transforme numa corrente interior.

A zona de controle vem assim:



Estado de Referência: 170°C, todos(g), Pt

Escolhe-se 170°C porque no enunciado é dado o ΔH_R a 170 °C e deve-se sempre escolher para Tref a temperatura a que temos o Q_R .

O Balanço entálpico vem: $\Delta H_1 = \Delta H_4 + Q_R^{170^\circ C}$

$$\bar{C}_p^{25,170^\circ C} \text{ do } C_4H_8 = 30,197 \text{ cal/moleK}$$

$$\bar{C}_p^{25,170^\circ C} \text{ do } C_4H_{10} = 34,938 \text{ cal/moleK}$$

Nota: Como os C_p do C_4H_8 e do C_4H_{10} são rectas (polinómios do 1º grau) não é necessário integrar.

Para uma recta: $\bar{C}_p = C_p a \bar{T}$.

Assim basta substituir na recta dos C_p o valor \bar{T} para se obter o \bar{C}_p

$$\Delta H_1 = (19,5 \times 30,197 + 79,5 \times 34,938) \times 10^3 \times (25 - 170) = -4,8813 \times 10^8 \text{ cal}$$

$$Q_R^{170^\circ C} = 11 \times 10^3 \times (-20) \times 10^3 + 8 \times 10^3 \times (-25) \times 10^3 = -4,2 \times 10^8 \text{ cal}$$

Substituindo-se:

$$-4,8813 \times 10^8 = \Delta H_4 - 4,2 \times 10^8$$

$$\text{Vem: } \Delta H_4 = -6,813 \times 10^7 \text{ cal}$$

Agora tira-se a temperatura a partir do ΔH_4

C_p do iso-octano = 43,4 cal/mole K

C_p do di-isobutilo = 42,6 cal/mole K

$$\Delta H_4 = (0,5 \times \bar{C}_p_{C_4H_8} + 60,5 \times \bar{C}_p_{C_4H_{10}} + 11 \times 43,4 + 8 \times 42,6) \times 10^3 \times (T - 170) = -6,813 \times 10^7$$

O cálculo da T em (4) pode ser interactivo ou analítico. Ambos estão correctos.

O cálculo analítico torna-se mais fácil porque não é necessário recorrer a integrais para se obter os \bar{C}_p :

Como $C_p = a + bT$ então

$$\bar{C}_p = \int_{T_{ref}}^T \frac{a + bT}{T - T_{ref}} dt = \frac{a(T - T_{ref}) + \frac{b}{2}(T^2 - T_{ref}^2)}{T - T_{ref}} = a + \frac{b}{2}(T + T_{ref})$$

Substituindo obtem-se $T = 149,49^\circ C$