

ASSINATURA OU RUBRICA

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

Questão 1)

i) Em um processo químico, a depender do processo, muitos são os equipamentos envolvidos para obtenção do produto de interesse. Nisso, cada equipamento pode vir a integrar-se com outros, paralelamente ou em série, com esse propósito. Em cada equipamento, uma série de transformações físicas e químicas podem ocorrer. Entretanto, a cada um desses equipamentos, a quantidade de massa e energia precisa se conservar, isso é, o balanço de energia ^{e massa} no sistema analisado precisa ser atendido. Dado um sistema de um processo químico, o volume de controle e o conjunto de equipamentos escolhidos arbitrariamente, onde o balanço de massa e energia precisa ser atendido. É nesse volume de controle que se avaliará se tudo que entra através de suas fronteiras, menos tudo que sai pelas suas fronteiras, mais tudo que é gerado (ou menos tudo que é consumido) no volume de controle (no seu interior) é igual a tudo que acumula no interior desse volume de controle. O volume de controle é a região arbitrária em que se analisam os balanços de massa e energia, a que se quer efetuar a avaliação.

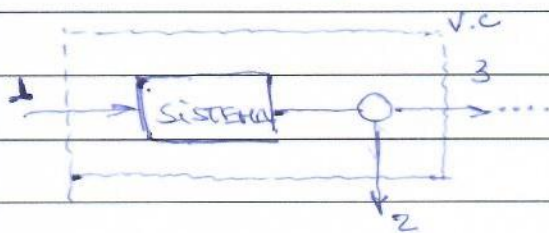
ii) O balanço de massa global é toda a quantidade de matéria que ~~entra~~ ^{entra pelas} fronteiras do sistema, menos a quantidade de matéria ^{total} que sai pelas fronteiras do sistema ~~menos a quantidade de matéria que se acumula no sistema~~ é igual ao que acumula no sistema. Já o balanço de massa individual, cada espécie química é avaliada individualmente. Com isso, o balanço do que entra menos o que

ASSINATURA OU RUBRICA _____

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

sai pelas fronteiras do sistema em termos de quantidade de matéria, mais o que é gerado (ou menos o que é consumido) da espécie química no volume de controle é igual ao acúmulo da espécie química no volume de controle. A diferença do balanço global para o individual é que no individual espécies químicas podem ser geradas ou consumidas no processo reacional, tendo conversões de espécies químicas em outras ao longo do processo. Isso precisa ser contabilizado.

iii) A purga é uma corrente de saída de um sistema que não fará mais parte da continuidade do processo. O reciclo é uma corrente de saída de um equipamento que retorna e se mistura a uma corrente de entrada do processo. Veja o esquema abaixo:



A corrente (1) é a corrente de entrada no volume de controle (envoltória V.C. escolhida).

A corrente (2) é uma corrente de purga, uma corrente de alívio ou descarte do sistema; e a corrente (3) dá a continuidade ao processo químico. Se a corrente (1) tiver uma vazão mássica F com fração mássica do componente A igual a y_A ; se a corrente (2) tiver uma vazão mássica de purga de P e fração mássica de A igual a y_A e a corrente (3) tiver a vazão mássica igual a β com fração mássica de A igual a z_A , tem-se pelo balanço que:

ATENÇÃO:
NÃO ESCREVA SEU NOME EM NENHUM LUGAR DA PROVA NÃO USE O VERSO NUMERE
TODAS AS FOLHAS

ASSINATURA OU RUBRICA

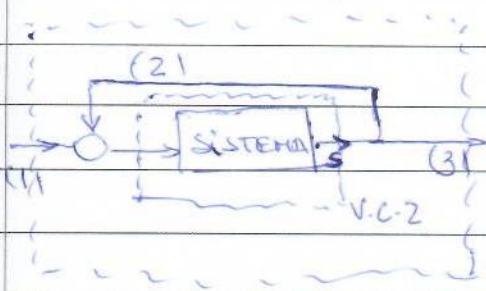
NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

Balanco global: $F = P + B$

Balanco por componente A: $F \cdot y_{A0} = P \cdot y_A + B \cdot z_A$

Sabe-se que no separador da corrente 2-3, as frações do componente A são iguais, logo: $F \cdot y_{A0} = P \cdot y_A + B \cdot y_A$

Com o reciclo, tem-se para as mesmas condições que:



No volume de controle 1 (V.C.1)

$$F = B$$

No volume de controle 2 (V.C.2)

$F + P = S$, sendo S a corrente de saída do sistema.

$F \cdot y_{A0} + P \cdot y_A = S \cdot z_A$ (balanco por componente); z_A depende do balanço.

Em alguns casos, é sabida a razão de reciclo, isto é, é sabido a fração de quanto da vazão S vai para o reciclo e quanto segue na corrente 3.

Quando ocorre o reciclo, convém fazer sempre um balanço de massa global e por espécies, a jusante do reciclo.

iv) O balanço de massa e energia estacionário diz respeito à condição em que nenhuma variação ocorre, no volume de controle, com relação ao tempo. É o estado estacionário do sistema, em que o processo atingiu uma condição de equilíbrio de massa e energia com o tempo. Já os balanços de massa e energia dinâmicos, alterações/variações ocorrem do tempo, havendo, portanto, variações infinitesi-

ASSINATURA OU RUBRICA

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

mais com o tempo.

v) Em um processo químico, convém assinalar todas as variáveis que descrevem o sistema, bem como todas as equações matemáticas (balanços de massa, energia, equilíbrio químico e termodinâmicos, etc.) que descrevem ou modelam os fenômenos que ocorrem no processo. Algumas variáveis são sabidas do processo, ou podem ser assumidas como variáveis de projeto (são definidas a serem atingidas ou requeridas). O balanço do número de variáveis (n_v) menos o número de equações envolvidas no sistema (n_e) menos o número de ~~equações~~ variáveis conhecidas ou de projeto (n_c) fornece o grau de liberdade do sistema (G): $G = n_v - n_e - n_c$. Quando $G < 0$, o sistema não pode ser resolvido. Quando $G = 0$ ele é possível e determinado (há uma solução). Quando $G > 0$, o sistema é possível e indeterminado (há várias soluções) cabendo ao projetista definir se vai atribuir variáveis de projeto ou definir o problema como de otimização, para poder resolver o problema. Se houver 2 graus de liberdade, são duas variáveis a serem resolvidas podendo vir a ser de projeto, ou de otimização. Em $G = 0$ tem-se um problema de simulação ~~de~~ ou dimensionamento. Já para $G > 0$ pode ser um dimensionamento com otimização, por exemplo.

vi) Os balanços de energia com reação química requerem que um balanço de massa global e por componente sejam feitos previamente. Isso porque é preciso saber as espécies químicas envolvidas no sistema. Se posse desse conhecimento, é preciso ~~avaliar~~ avaliar a energia (entalpia) envolvi-

ATENÇÃO:
NÃO ESCREVA SEU NOME EM NENHUM LUGAR DA PROVA NÃO USE O VERSO NUMERE
TODAS AS FOLHAS

ASSINATURA OU RUBRICA

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

da no meio reacional, seja ela endotérmica ou exotérmica. Isso porque há reações que requer energia para ocorrerem, bem como há processos químicos em que energia é liberada no meio reacional. As energias envolvidas no volume de controle precisam ser computadas para o balanço total do sistema. A quantidade de espécies químicas é fundamental pois que a entalpia do sistema é dada em mol de componente. Por isso o balanço de massa das espécies químicas é imprescindível, antes mesmo do balanço de energia. Para tanto, o balanceamento da equação química deve ser feito cuidadosamente, pois que apenas as espécies químicas envolvidas na reação são computadas para o balanço de energia. Os reagentes limitantes ditam o processo reacional; os em excesso não entrarão no cálculo da energia de reação do sistema, por não participarem da conversão/consumo/geração da reação. Após o balanço mássico dos componentes e global, então, faz-se o balanço de energia envolvido naquele processo reacional.

Questão 2)

i) Reatores ideais, que podem ser adiabáticos ou isotérmicos, é aquele que consegue realizar a conversão dos reagentes de maneira total, em produto de interesse. Aqui, frisa-se produto de interesse porque é possível que, em uma reação, ocorram reações paralelas, que geram produtos indesejáveis ao propósito reacional (subprodutos). Quando o produto de interesse é atingido em sua totalidade, há uma seletividade de 100% da reação. Seletividade é a razão de quantidade de matéria do produto de interesse pela ~~reação~~

ATENÇÃO:
NÃO ESCREVA SEU NOME EM NENHUM LUGAR DA PROVA NÃO USE O VERSO NUMERE
TODAS AS FOLHAS

ASSINATURA OU RUBRICA _____

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

quantidade de matéria dos subprodutos gerados. Um reator ideal é aquele que faz 100% de conversão dos reagentes e fornece 100% de seletividade do produto de interesse.

ii) A seleção reacional em um processo químico não é simples. O reator é o equipamento mais importante no processo, pois que a depender do reator, será avaliada a necessidade de trocadores de calor, separadores, correntes de reciclo, etc. de um processo. Para isso, é preciso conhecer a reação química, a pureza dos reagentes, a temperatura e pressão do processo, etc. Para reações irreversíveis, por exemplo, o uso de um reator PFR na temperatura máxima de conversão é o preferível. Já para reações reversíveis, para gases, um aumento de pressão favorece a formação de produtos, quando estes estão em maior proporção estequiométrica (os produtos). Em reações de equilíbrio, para reações endotérmicas, um aumento de temperatura favorece a formação dos produtos, o oposto acontece para reações exotérmicas, em que uma redução de temperatura auxiliará a formação dos produtos.

A escolha da rota química dependerá das condições envolvidas no sistema de análise, com base no supracitado.

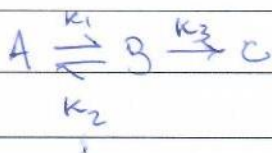
iii) Devido à reação em si depender de diversas condições específicas, é difícil promover critérios que sejam únicos para ~~uma~~ integração de reatores químicos. Há três critérios que são comumente empregados para esse feito. O primeiro é o heurístico, que usa um processo gráfico. O segundo é o de otimização estrutural. O terceiro é o da

ASSINATURA OU RUBRICA

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

região atingível. ~~Os métodos de otimização são aplicados para encontrar a melhor solução para um problema de otimização, considerando as restrições e o objetivo da função. O primeiro método é aplicado para reações simples. O segundo é mais complexo exigindo recursos mais sofisticados (computacionais). O terceiro possui uma série de regras e etapas a serem seguidas (um algoritmo) que avalia a convexidade ou não da região atingível pelo reator, levando para cada condição um direcionamento entre usar um PFR, ou usar um PFR com bypass, ou um CSTR, ou um CSTR com bypass, ou o conjunto dos reatores. O problema quanto ao uso do método da região atingível requer que ele também seja empregável para condições reacionais simples. Para reações mais complexas, é preciso usar mais do método dos reagentes invariantes em que é realizado um arranjo matemático de variáveis dependentes e independentes, em relação ao produto de interesse, levando em conta um balanço por elemento químico envolvido. O método da região atingível requer que o projetista use o sistema de equações químicas que governam a reação, ou seja, seu balanço. Por exemplo~~

O primeiro método é aplicado para reações simples. O segundo é mais complexo exigindo recursos mais sofisticados (computacionais). O terceiro possui uma série de regras e etapas a serem seguidas (um algoritmo) que avalia a convexidade ou não da região atingível pelo reator, levando para cada condição um direcionamento entre usar um PFR, ou usar um PFR com bypass, ou um CSTR, ou um CSTR com bypass, ou o conjunto dos reatores. O problema quanto ao uso do método da região atingível requer que ele também seja empregável para condições reacionais simples. Para reações mais complexas, é preciso usar mais do método dos reagentes invariantes em que é realizado um arranjo matemático de variáveis dependentes e independentes, em relação ao produto de interesse, levando em conta um balanço por elemento químico envolvido. O método da região atingível requer que o projetista use o sistema de equações químicas que governam a reação, ou seja, seu balanço. Por exemplo



Para um PFR:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A + k_2 C_B \\ \frac{dC_B}{dt} = -k_3 C_B - k_2 C_B + k_1 C_A \end{cases}$$

sendo C_i a concentração do componente i .

~~Os métodos de otimização são aplicados para encontrar a melhor solução para um problema de otimização, considerando as restrições e o objetivo da função.~~

ASSINATURA OU RUBRICA _____

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 35219089158

Com base nas equações descritas, deve-se realizar a representação gráfica das concentrações das espécies A e B envolvidas nesse exemplo e por fim, realizar o algoritmo para provimento da região atingível pelo(s) reator(es). Isso é, no exemplo, plotar $C_A \times C_B$ e avaliar a condição de convexidade do problema e avaliar os reatores aplicáveis para realização da conversão.

v) O reator é a unidade mais importante no processo químico, de maneira que o processo químico será delineado a partir do reator. A análise econômica de um reator deve levar em conta a necessidade do catalisador ou não na reação e o quanto o catalisador é recuperável; precisa levar em conta as trocas térmicas envolvidas no processo (a depender da reação ser endotérmica ou exotérmica); o volume do reator (que vai depender do tipo e do tempo de residência envolvido); vai depender se é um reator em batelada ou contínuo (no primeiro há possibilidade de uso sazonais, embora também possa ser usado ao longo de todo o ano; o segundo opera 24h/dia, 7 dias/semana, durante todo o ano, excetuando-se em paradas programadas ou emergenciais). Há uma série de fatores que precisam ser analisados e avaliados a depender do processo.

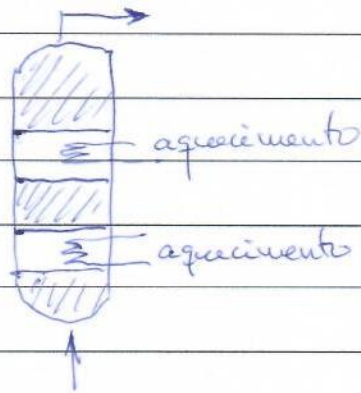
vi) Muitas reações são altamente endotérmicas ou exotérmicas no sistema reacional, exigindo reatores específicos. Para isso, algumas vezes é preciso reatores encamisados para fluxo constante de refrigerantes no sistema reacional e manutenção da reação, por exemplo. As temperaturas podem ser tão extremas que podem parar a reação, degradar componentes, peças, e os pro-

ATENÇÃO:
NÃO ESCREVA SEU NOME EM NENHUM LUGAR DA PROVA NÃO USE O VERSO NUMERE
TODAS AS FOLHAS

ASSINATURA OU RUBRICA

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

deixos, freixando serem controladas. Há situações onde são colocados reagentes altamente diluídos para minimizar a energia reacional gerada. Em outra ocasião, um reator pode ser dividido em seções para serem resfriadas ou aquecidas as etapas da reação (ver esquema abaixo) e preservar a reação em andamento e na sua máxima conversão.



Nesse exemplo, na região hachurada ocorre a reação e a não hachurada ocorre aquecimento para manter a reação (possivelmente endotérmica).

O controle da temperatura é fundamental para manutenção da reação e maximização do produto.

vi) Há alguma ferramentas de simulação computacional disponíveis que otimizam e realizam uma avaliação geral sobre a reação e sistema envolvido. Elas realizam todo o balanço de massa e energia, avaliando a viabilidade quanto ao uso e situações reacional. É preciso que o usuário diga se se trata de PFR, CSTR e as condições e ocorrem as simulações computacionais.

Questão 3) i) A diferença entre inflamabilidade e explosividade está na taxa de energia liberada de um e outro. Ambos podem ser perigosos para a indústria e a vida. Um material pode começar um processo

ATENÇÃO:
NÃO ESCREVA SEU NOME EM NENHUM LUGAR DA PROVA NÃO USE O VERSO NUMERE
TODAS AS FOLHAS

ASSINATURA OU RUBRICA

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

de combustão, ^{principal reação química com liberação de energia acidental} quando estão presentes oxigênio, combustível e ignição. Havendo isso (triângulo do fogo) em processo inflamável ou explosão pode ocorrer.

ii) Para evitar, geralmente ~~usam-se~~ ^{usam-se} processos mais voltados à limitação de Oxigênio, como método primeiro. Para tanto, inertização de tanques com material inflamável pode ser uma medida. A inertização visa a redução de Oxigênio para valores abaixo do limite mínimo de oxigênio (depende de cada material). Pode-se usar processo de purga, onde ~~em~~ em vez da inserção de gás inerte no recipiente contendo o combustível, admite-se vácuo para reduzir a concentração de oxigênio. Outra medida é a combinação de ambos. Há também o processo de sifão com entrada de gás inerte no sistema, arrastando o oxigênio presente. Quando não se faz uso desses métodos, é possível usar o critério de eliminação da ignição. Geralmente a ignição é ocasionada pela estática. Nesse caso, tenta-se minimizar a estática gerada no transporte de correntes no sistema. Geralmente usam-se aterramentos e ligações entre as conexões e equipamentos, além de tubulações, mangueiras e etc. (devendo serem aterradas e conectadas). A estática pode ser gerada no atrito, na interface de líquidos, na transmissão de corrente por cargas, etc.

iii) As normas reguladoras requerem adequado armazenamento dos materiais químicos. Por exemplo, materiais inflamáveis separados de oxidantes, ácidos e bases. Manter as áreas com produtos químicos sempre bem ventiladas para diluição dos químicos.

ASSINATURA OU RUBRICA

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

do do processo: Minimizar a quantidade de armazenamento de materiais inflamáveis. A área de pessoal deve ser afastada da área de reações e químicas presentes, entre várias que devem ser seguidas visando ao salvaguardar a saúde e a segurança das pessoas envolvidas no processo.

iv) a identificação dos perigos é a avaliação de possíveis acidentes que podem ocorrer num processo. Nela, geralmente um grupo de pessoas se reúne para a realização desse tipo de identificação. Pode-se citar, por exemplo a elaboração de HAZOP, muito utilizado no Brasil. Com a identificação dos perigos é possível minimizar os riscos. A análise de riscos na verdade avalia quais as consequências e probabilidade do ~~o~~ perigo ocorrer. Nessa análise, a probabilidade do risco e quais as medidas que devem ser tomadas para minimizar o risco devem ser tomadas. Se houver alta probabilidade, utilizar mecanismos para minimizar e salvaguardar.

v) Os póis têm alta estática e devem ser avariados com cuidado, principalmente se forem combustíveis. Não se deve realizar uma descarga de pó maior que 0,5 kg/s, por exemplo. Convém também sempre conectar e aterrar a alimentação e o receptor de pó. Pó pode, a depender, gerar faíscas e descargas que podem atingir a flama bilidade de processos, por isso, sua estática deve ser ainda do sa-

ATENÇÃO:
NÃO ESCREVA SEU NOME EM NENHUM LUGAR DA PROVA NÃO USE O VERSO NUMERE
TODAS AS FOLHAS

ASSINATURA OU RUBRICA

NÚMERO DE IDENTIFICAÇÃO 95319089158

mente avaliada.

vi) Projetos de sistemas de combate a incêndio devem levar em conta o uso correto de sprinklers, deve ter o processo químico isolado e protegido para contenção de possíveis acidentes. Deve estudar cada etapa do processo químico para saber onde encontrar-se os seus riscos e quais camadas protetivas devem ser usadas em tais casos. Deve ter acesso de água disponível, bem como área ventilada e extintores adequados para cada tipo de situação. O sistema e treinamento de evacuação deve ser bem conhecido e sempre verificado e atualizado. Sistemas de segurança do trabalho (treinamento por pessoas especializadas) deve sempre estar em dia.

