



COQ790 – Análise de Sistemas em Engenharia Química

Primeira Lista de Exercícios

1) (Classificação de modelos) Classifique o tipo de modelo que é apresentado em cada um dos seguintes casos, justificando sua resposta:

a) $\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z} = D_e \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + Q;$

b) $\frac{dC}{dt} + aC = w(t);$

c) $\frac{d^2 C}{dt^2} + a \frac{dC}{dt} + bC = w(t);$

d) $\frac{d^2 T}{dz^2} + Q = 0;$

- e) Definição termodinâmica de um equilíbrio de fases;
f) Modelo do CSTR não isotérmico.

Notação: T – temperatura; C – Concentração; t – tempo; z – comprimento; a,b – constantes; Q – fonte de calor; w – função.

2) (Equações constitutivas) Pesquise e forneça pelo menos mais três exemplos de equações constitutivas, diferentes daquelas apresentadas em sala de aula.

3) (Modelo do CSTR) Para o modelo completo do CSTR, indique quais são as variáveis de estado, de entrada, de saída e parâmetros, justificando sua resposta.

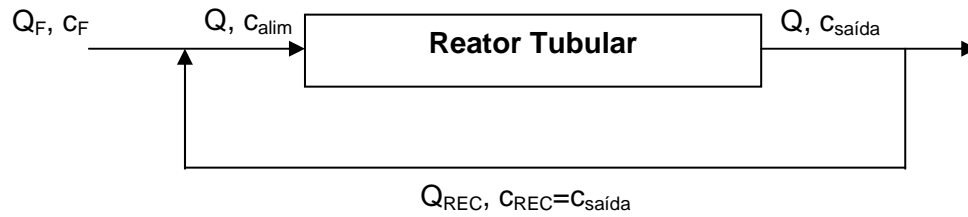
4) (Modelo do CSTR) Considere o modelo do CSTR isotérmico com cinética de primeira ordem:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{q}{V}(C_f - C) - kC.$$

Use $\tau=kt$ como tempo adimensional. Desenvolva e compare a equação adimensional para os dois casos: a) $u=C/C_f$, e b) $u=1-C/C_f$.

5) (Modelos de reator tubular) Ler o arquivo Modelagem_Reator_Tubular.pdf e fazer o exercício 1.1 (pág. 10) do mesmo.

6) (Resolução de EDPs por diferenças finitas) Considere o modelo do reator tubular com dispersão axial e reciclo abaixo:



$$\frac{\partial c(t, z)}{\partial t} + (1 + R) \frac{\partial c(t, z)}{\partial z} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 c(t, z)}{\partial z^2} - Da \cdot c(t, z),$$

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{alim} = c(t, 0) - \frac{1}{Pe} \frac{\partial c(t, z)}{\partial z} \Big|_{z=0} \\ -\frac{1}{Pe} \frac{\partial c(t, z)}{\partial z} \Big|_{z=1} = 0 \end{array} \right.$$

Observe que a concentração de alimentação do reator (c_{alim}) deve ser obtida a partir de um balanço molar no ponto de mistura. Discretize a coordenada z em diferenças finitas e resolva o sistema de EDOs resultante em seu programa computacional preferido (EMSO, Mathcad, Matlab, Scilab, Maple, C, Fortran, etc.). Faça um gráfico da concentração de saída do reator e de perfis axial de concentração para vários valores da razão de reciclo $R = Q_{REC}/Q_F$.