

## 2 – CONVERSÃO, SELETIVIDADE, RENDIMENTO E EFICIÊNCIA

### 2.1 CONVERSÃO

É a fração da alimentação ou de algum material chave na alimentação que é convertida em produtos.

$\% \text{ conversão} = 100 \times (\text{mols ou massa da alimentação que reage}) / (\text{mols ou massa da alimentação introduzidas no reator})$

A conversão relaciona-se com o grau de complementação de uma reação.

### 2.2 GRAU DE COMPLEMENTAÇÃO DE UMA REAÇÃO

Geralmente é a percentagem ou fração do reagente limitante que é convertida em produto.

### 2.3 REAGENTE LIMITANTE

É o reagente que desaparece antes dos demais. É o reagente que “acaba” primeiro.

### 2.4 REAGENTE EM EXCESSO

É o reagente que está presente em excesso relativamente ao reagente limitante.

$\% \text{ excesso} = (\text{mols em excesso}) / (\text{mols teóricos requeridos para reagir com o reagente limitante})$

Um termo comum é a % de excesso de ar, que é usado para reações de combustão, e significa a quantidade de ar disponível para a reação que

está em excesso em relação ao ar teoricamente necessário para queimar completamente o material combustível (reagente limitante, no caso).

## 2.5 SELETIVIDADE

É a razão entre os mols de certo produto produzido (geralmente desejado) e os mols de outro produto produzido (geralmente indesejado ou subproduto)

## 2.6 RENDIMENTO

Para um reagente ou produto único, é a massa ou mols de um produto final dividido pela massa ou mols do reagente inicial ou de um reagente chave.

## 2.7 OUTRAS DEFINIÇÕES E CONCEITOS

2.7.1 – Sistema é qualquer parte de matéria ou de um equipamento, escolhido arbitrariamente para que se possa analisar um problema.

2.7.2 – Sistema é considerado FECHADO quando a massa não atravessa seus limites, embora a energia possa cruzá-lo.

2.7.3 – Sistema é considerado ABERTO ou EM ESCOAMENTO quando a massa e/ou energia cruzam seus limites.

2.7.4 – As formas de energia que cruzam os limites do sistema são: Energia Térmica (Calor) e Trabalho (no sentido amplo). São apenas trocas de energia entre o sistema e a vizinhança.

2.7.5 – Calor é energia que é transferida de um corpo para outro devido à diferença na temperatura desses corpos.

2.7.6 – Trabalho é energia que é transferida de um corpo para outro devido a uma força que atua entre eles.

2.7.7 – A transformação de outras formas de energias em Calor representa DEGRADAÇÃO de energia.

## 2.8 CUIDADOS NECESSÁRIOS NO USO DE PACOTES DE SIMULAÇÃO

(Chemical Engineering jan 2006 pag 34)

“Software” de simuladores de processo tais como Hysys, Pro-II e Aspen Plus, servem como uma poderosa ferramenta que simplifica cálculos termodinâmicos de processo.

Esses simuladores eliminam a necessidade do engenheiro resolver complexas equações diferenciais e permitem a aplicação de uma variedade de pacotes de propriedades para modelagem das operações unitárias.

Num ambiente altamente competitivo onde o tempo e competência técnica são críticos, o adequado e correto uso dessas ferramentas de simulação tem um grande valor.

Contudo, uma super confiança na simulação pode embalar o usuário para negligência, em relação aos sempre válidos princípios da engenharia.

A falta de sólidos conhecimentos de engenharia pode levar o usuário a dúvidas e até a rejeitar resultados válidos da simulação.

Em outros casos as mais sérias consequências podem ser erros em balanços materiais e de energia, os quais são fundamentais para os projetos.

Então, erros no “FEED” (“Front-end engineering design”) podem levar a maiores custos de revisão.

Há vários erros ligados a cálculos termodinâmicos usados em balanços materiais e de energia que tendem a tornar-se frequentes. Alguns são devido simplesmente a falta de bom senso e atenção. Vejamos o caso das entalpias:

Na termodinâmica aplicada à engenharia os valores absolutos da entalpia ou de fluxo de calor não são geralmente importantes, em vez disso, os valores que tem interesse são as variações,  $\Delta H$ , ou o produto  $m \cdot h$ , onde  $m$  pode ser tanto molar como massa.

Por exemplo, é a variação no fluxo de calor ou entalpia que define a carga térmica de trocadores de calor, ou do mesmo modo a entalpia ou balanço de calor que define troca calor em torres de destilação, reatores ou vasos de “flash”.

Outro engano é acreditar que valores de entalpia não podem ser negativos. Não é incomum comparar um valor de entalpia em uma dada simulação com um de uma simulação diferente ou de uma tabela. Isso leva à impressão de que há grandes divergências.

Em muitos casos, contudo, a razão para essa diferença é muito simples: trata-se de escolhas de diferentes entalpias de referência.

A escolha de diferentes entalpias de referência não somente leva a aparentes fatores de discrepância entre fontes de dados, mas podem explicar também porque tais valores podem ser negativos.

As variações de entalpia em pacotes de “software” diferentes devem ser idênticas dentro da margem de precisão do simulador.

Vejamos o caso abaixo:

FONTE	ASME	HYSYS	PRO-II	ASPEN PLUS
Hs do vapor sat				
100 psig (Btu/lb)	21 222	-101 909	21 398	-102 273
Hw da água sat				

100 psig (Btu/lb)	5 566	-117 777	5 566	-118 133
-------------------	-------	----------	-------	----------

hs - hw (Btu/lb)	15 656	15 868	15 832	15 860
------------------	--------	--------	--------	--------

Observa-se que apesar das diferenças grandes dos valores das entalpias, o calor latente de vaporização/condensação para os três simuladores e o Asme, estão muito próximos.