5.2) Souza et al. (2011) desenvolveram um estudo de otimização termodinâmica de unidades de craqueamento catalítico em leito fluidizado (FCC). Para o cálculo da geração de entropia no interior do reator, foi necessário dispor do calor específico a pressão constante das substâncias (*lumps*) envolvidas nas reações químicas, Cp, em função da temperatura (Cp = Cp(T)). Para tanto, para cada um dos *lumps* do modelo cinético (exceto o coque) foi associado um hidrocarboneto de mesma massa molecular de acordo com a Tabela Pj5.2. Para o coque, como sua composição é na maior parte carbono puro, o seu calor específico foi aproximado com o calor específico do carbono grafite, mesmo sendo a massa molecular de ambos muito diferente, o que neste caso não é importante uma vez que o carbono grafite foi escolhido para representar o coque em virtude de sua composição química e não com base na massa molecular como foi feito para os demais *lumps*.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Tabela Pj5.2 – Associação dos *lumps* com seus respectivos hidrocarbonetos de mesma massa molecular. | | |
| **lump** | **Hidrocarboneto** | **Massa** **molecular** **(kg/kmol)**  **(*lump*/hidrocarboneto)** |
| vgo | n-octadecano (C18H38) | (422.80/254.500) |
| LCO | n-octadecano (C18H38) | (254.50/254.500) |
| Gasolina | n-octano (C8H18) | (114.20/114.231) |
| GLP | propano (C3H8) | (44.10/44.097) |
| Gás Combustível | metano (CH4) | (16.04/16.043) |
| Coque | carbono grafite | (12/-) |
|  |  |  |

O calor específico a pressão constante (Cp) dos *lumps* vgo, LCO, Gasolina, GLP e Gás Combustível foram determinados através de uma correlação algébrica conforme se segue. Esta correlação é válida para temperaturas entre e 200 a 1500 K.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

onde C1, C2, C3, C4 e C5 são constantes tabeladas retiradas da tabela 2-198 publicada por Perry e Green (1999).

A equação (1) resultaria em uma expressão algébrica final bastante complicada, necessitando de esforço computacional extra para a determinação dos calores específicos de cada um dos *lumps*. Como o comportamento das curvas geradas pela Eq. (1) é bastante suave dentro da faixa de temperaturas de interesse para o craqueamento catalítico, elas podem ser bem aproximadas por um polinômio de segundo grau. A Figura Pj5.2 mostra o gráfico obtido com a aplicação da Eq. (7.5) para cada um dos *lumps* do modelo, exceto o vgo que devido ao seu alto peso molecular não pode ser aproximado por nenhum hidrocarboneto de peso molecular semelhante disponível.

O coque, no estado sólido, foi aproximado pela curva de calores específicos do carbono grafite a qual é dada pela tabela 2-194 publicada por Perry e Green (1999), conforme se segue:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

e que também pode ser aproximada por um polinômio de segundo grau.

Observando com cuidado a Fig. Pj5.2 nota-se que quanto maior é o peso molecular do hidrocarboneto, as curvas de Cp passam aproximadamente a se superpor. Com base nesta hipótese e em virtude da falta de uma aproximação melhor para o *lump* vgo, pode-se utilizar para o vgo a mesma curva com a qual se aproxima o *lump* LCO.

Cada uma das curvas mostradas na Fig. Pj5.2 pode, portanto, ser aproximada por um polinômio de segundo grau na forma

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

Pede-se neste projeto, que se construa uma Tabela com as equações dos polinômios correspondentes a cada uma das curvas mostradas na Fig. Pj5.2. Além disso, pede-se fazer uma análise do erro cometido na avaliação dos calores específicos com essas aproximações por polinômios quadráticos na faixa de temperaturas considerada.

|  |
| --- |
|  |
| Fig. Pj5.2 – Calores específicos para cada um dos *lumps* calculados pela Eq. (1). |

Obs:

1. Apresente um relatório do seu trabalho (título, resumo, introdução, teoria, resultados e discussão, e conclusões), com todos os programas computacionais escritos no apêndice, e
2. Recomenda-se utilizar aritmética de dupla precisão em seus cálculos.