NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

Introdução à Engenharia Química e Bioquímica

Aula 12
MIEQB
ano lectivo de 2020/2021

Sumário da aula

Balanços materiais a processos com reacção

- Conversão global e por passe
- Purga

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

Problema 4.8

Produz-se metanol na reacção do dióxido de carbono com hidrogénio:

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

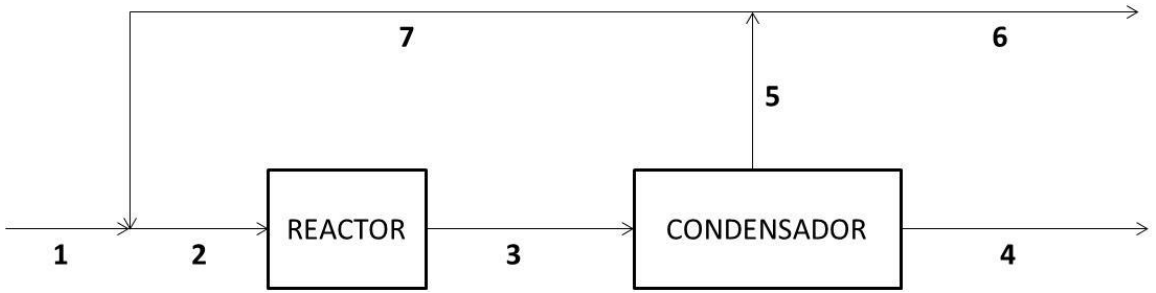
A alimentação fresca ao processo contém hidrogénio, dióxido de carbono e 0.40% molar de inertes (I). O efluente do reactor passa para um condensador onde se remove completamente todo o metanol e água formados na reacção. Os reagentes não convertidos na reacção e o inerte são reciclados de volta ao reactor (correntes 5 $\rightarrow$ 7 $\rightarrow$ 2) após purga. A alimentação ao reactor contém 28% mole CO_2, 70% mole H_2 e 2% mole de inertes. A conversão por passe do hidrogénio é de 60%.

a) Efectue o balanço material ao processo para uma base de cálculo à sua escolha;

b) Calcule a razão de purga e a razão de reciclo;

c) Calcule a conversão global do hidrogénio;

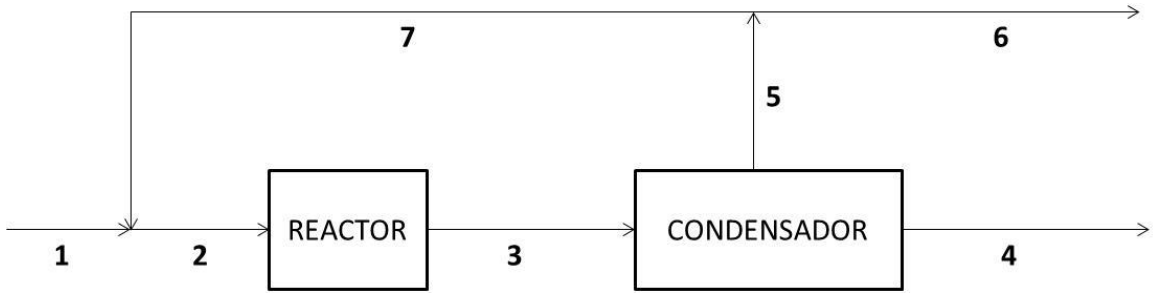
d) Para uma produção de metanol de 155 kmol.h^{-1} calcule o consumo de matéria prima requerido.



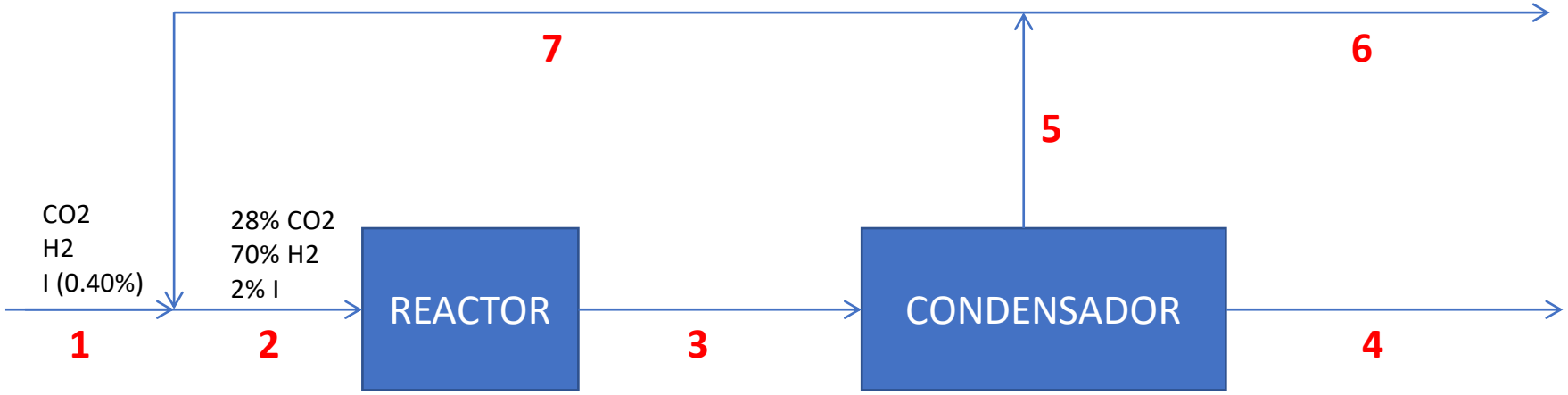
Produz-se metanol na reacção do dióxido de carbono com hidrogénio:

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

A alimentação fresca ao processo contém hidrogénio, dióxido de carbono e 0.40% molar de inertes (I). O efluente do reactor passa para um condensador onde se remove completamente todo o metanol e água formados na reacção. Os reagentes não convertidos na reacção e o inerte são reciclados de volta ao reactor (correntes 5 → 7 → 2) após purga. A alimentação ao reactor contém 28% mole CO_2, 70% mole H_2 e 2% mole de inertes. A conversão por passe do hidrogénio é de 60%.

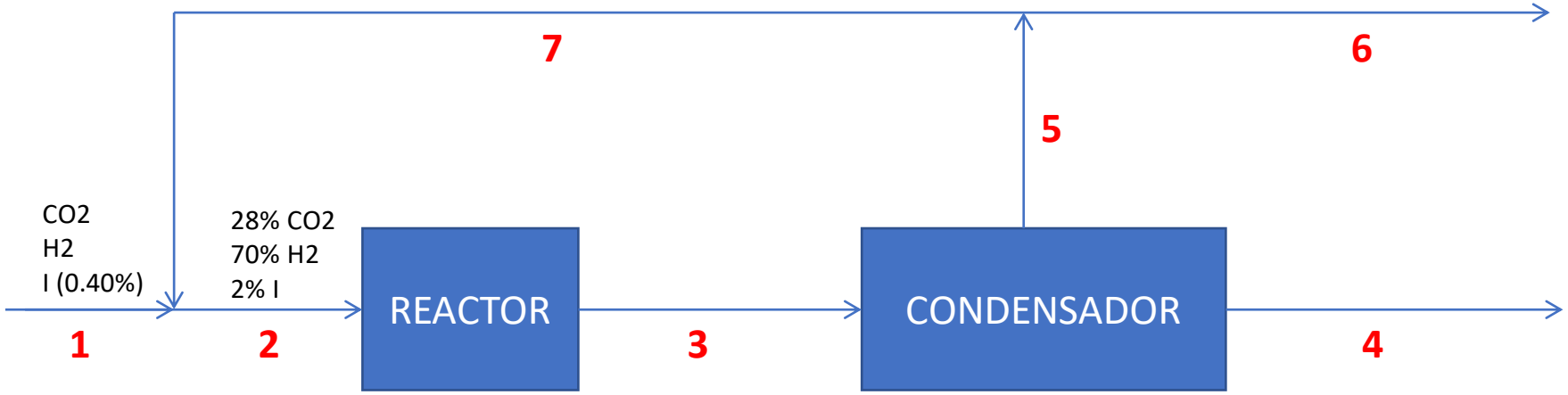


$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$



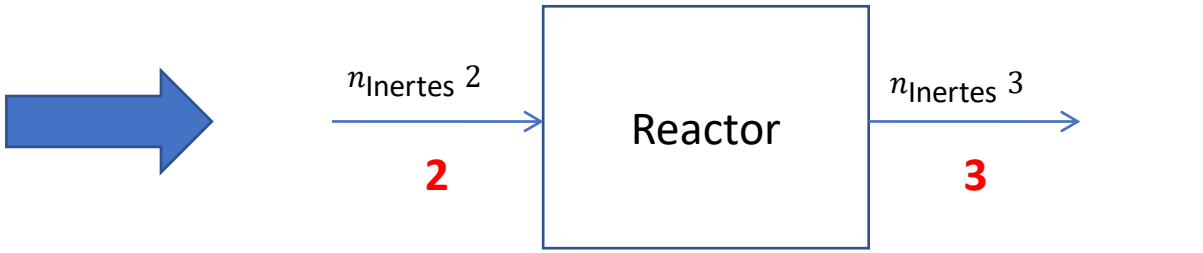
Definição de inertes

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$



Inertes: substâncias que <u>não</u> participam na reacção;

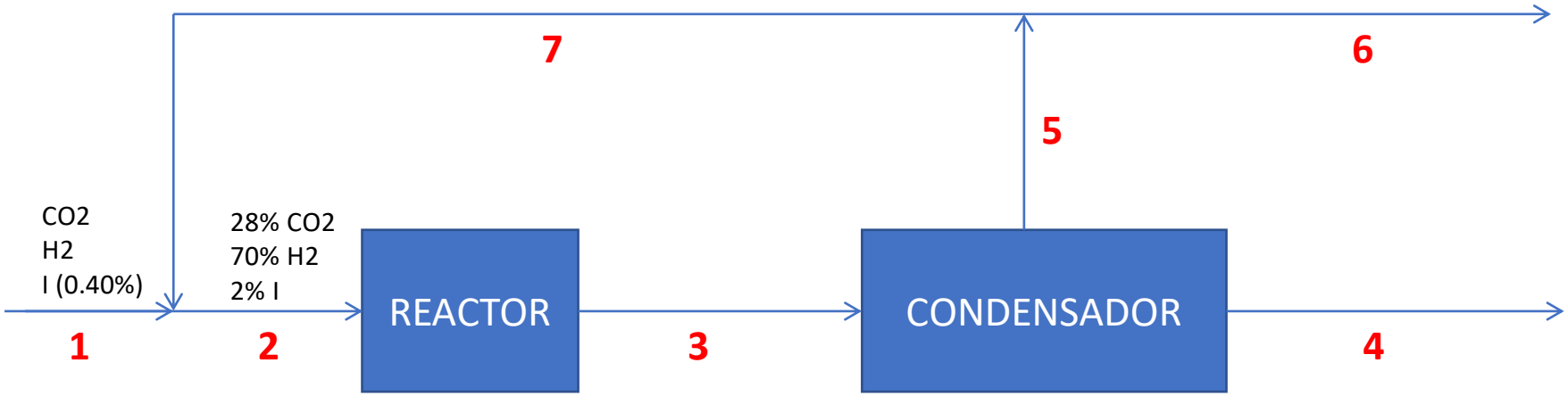
Ou seja, não são reagentes nem produtos de reacção.



o nº de moles de inertes que entra no reactor = nº de moles que sai

Atenção não são as composições!

Conversão por passe e conversão global



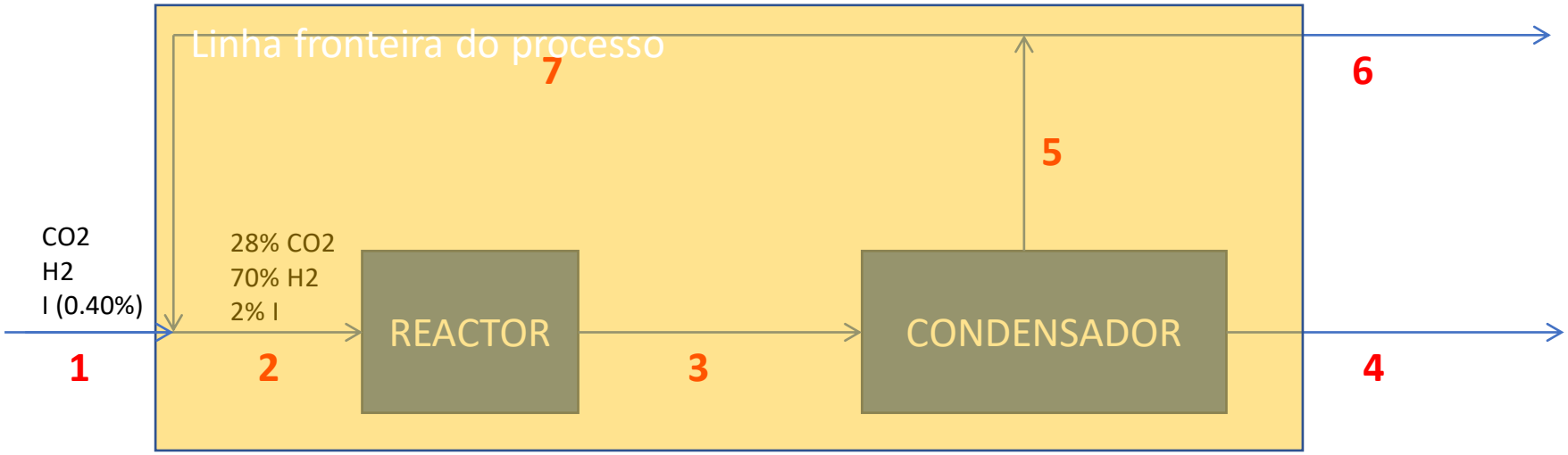
$$\%Conversão = \left(\frac{N_0 - N_f}{N_0}\right) \text{X } 100$$

N_o- designa o número de moles do reagente limitante inicialmente presentes

N_f - designa o número de moles final do reagente limitante

Na análise de reactores químicos envolvendo a separação dos produtos de reacção e o reciclo dos reagente não consumidos, usam-se **duas** definições de conversão da reacção

Conversão por passe e conversão global

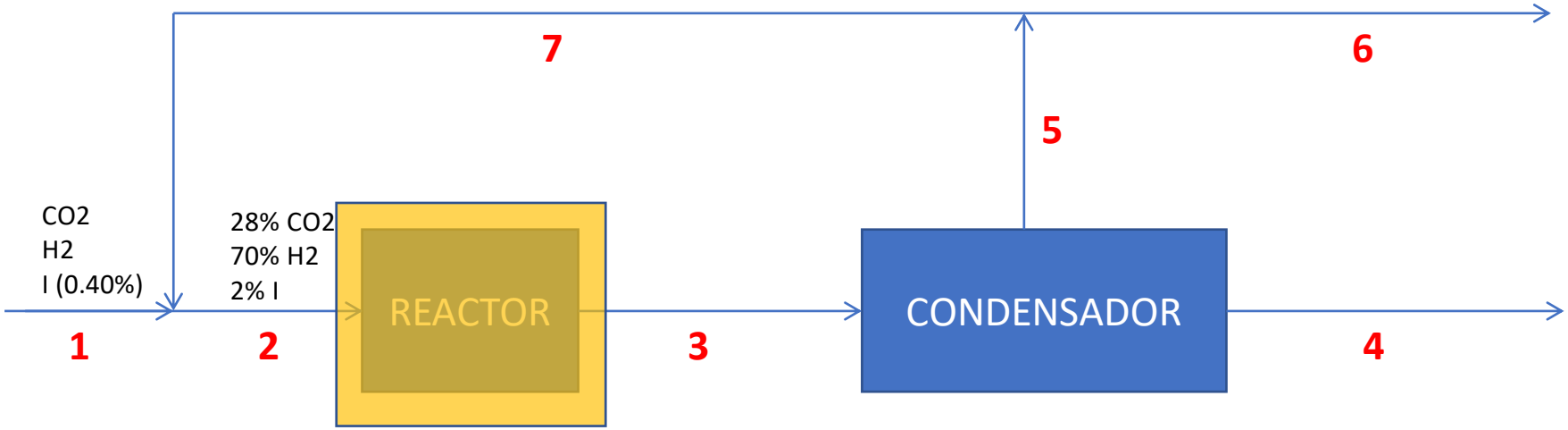


$$Conversão\ global = \frac{entrada\ de\ r.l.\ no\ processo - saída\ de\ r.l.\ do\ processo}{entrada\ de\ r.l.\ no\ processo} \times 100$$

$$Conversão\ global = \frac{n_{r.l.}\ em\ 1 - (n_{r.l.}\ em\ 4\ e\ 6)}{n_{r.l.}\ em\ 1} \times 100$$

r.l. = reagente limitante

Conversão por passe e conversão global



$$Conversão\ por\ passe = \frac{entrada\ de\ r.l.\ no\ reactor - saída\ de\ r.l.\ do\ reactor}{entrada\ de\ r.l.\ no\ reactor} \times 100$$

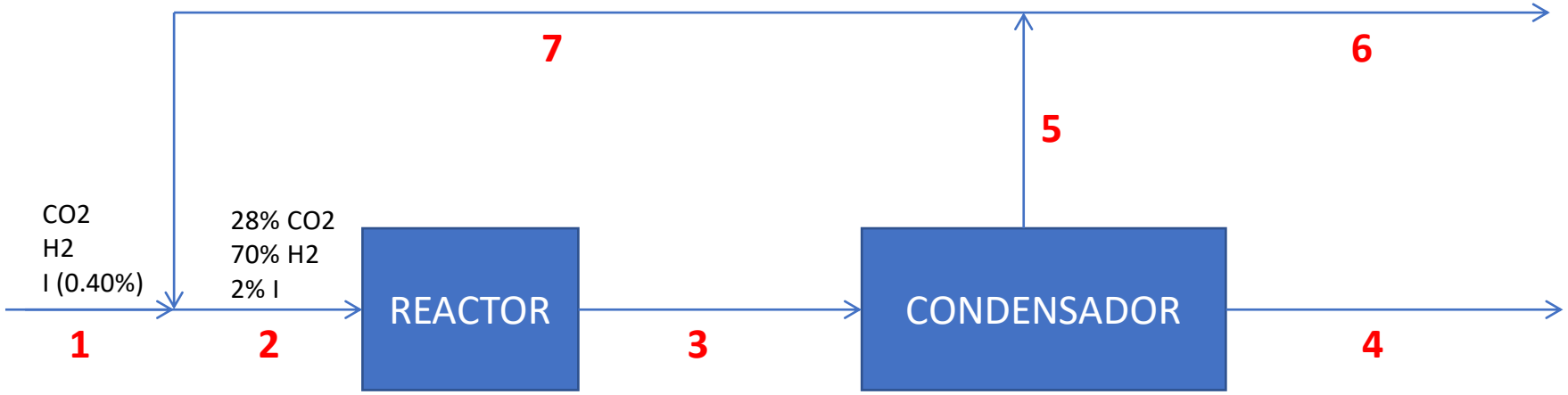
$$Conversão\ por\ passe = \frac{n_{r.l.}\ em\ 2 - n_{r.l.}\ em\ 3}{n_{r.l.}\ em\ 2} \times 100$$

r.l. = reagente limitante

Balanço material ao processo

4.8 $CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$

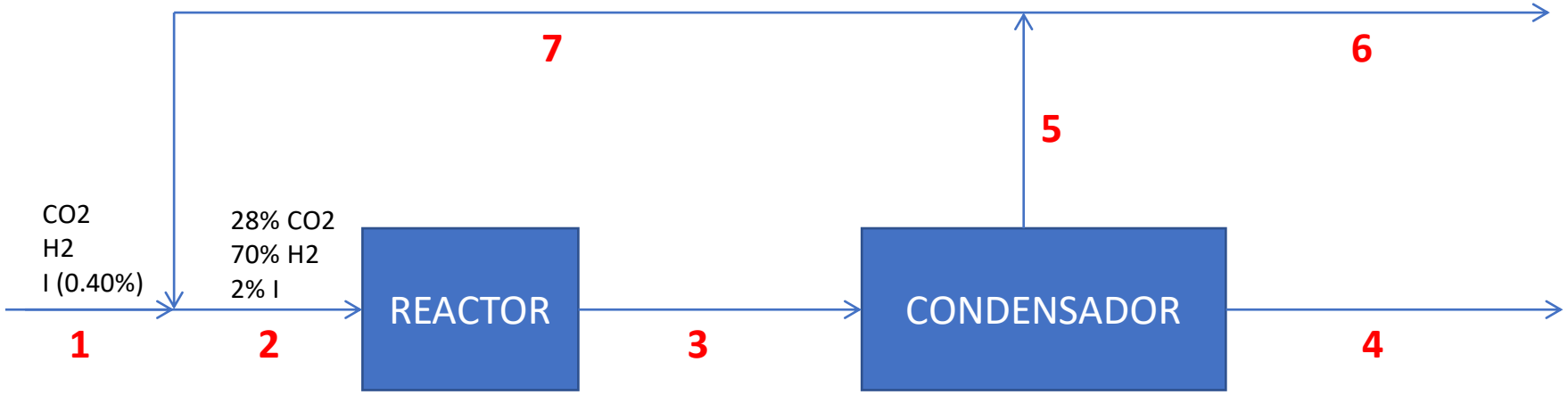
%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%



NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%

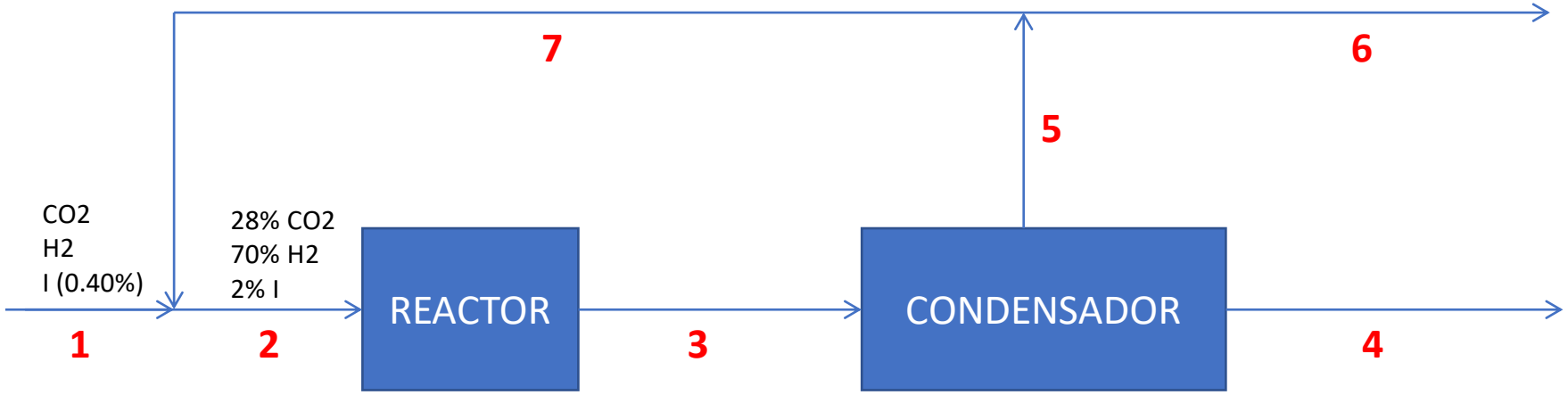


	1	2	3	4	5	6	7
CO2							
H2							
inertes							
CH3OH							
H2O							
total							

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%

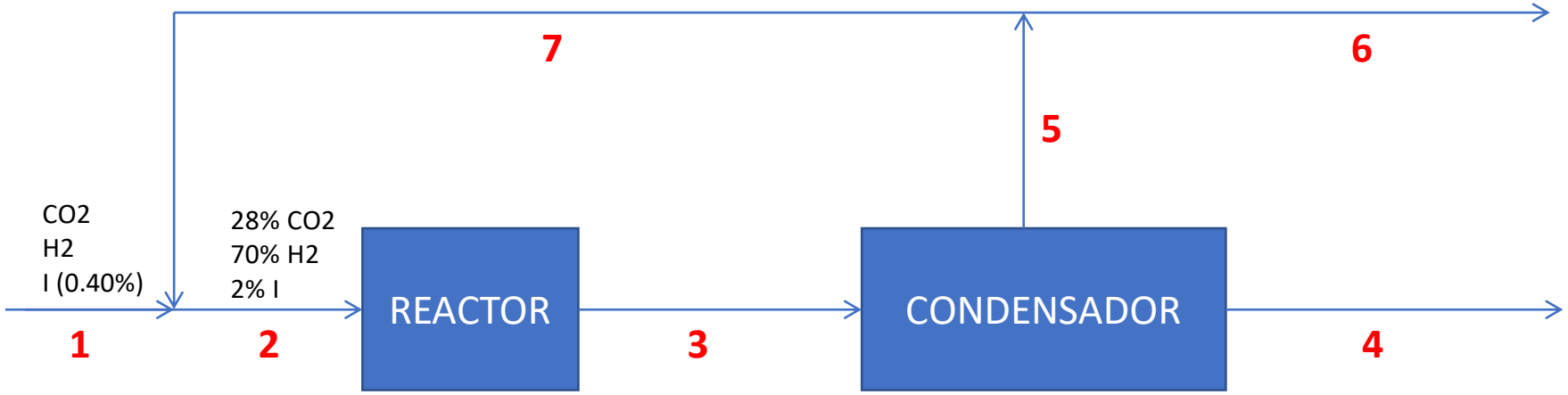


	1	2	3	4	5	6	7
CO2	✓						
H2	✓						
inertes	✓						
CH3OH	0						
H2O	0						
total							

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%

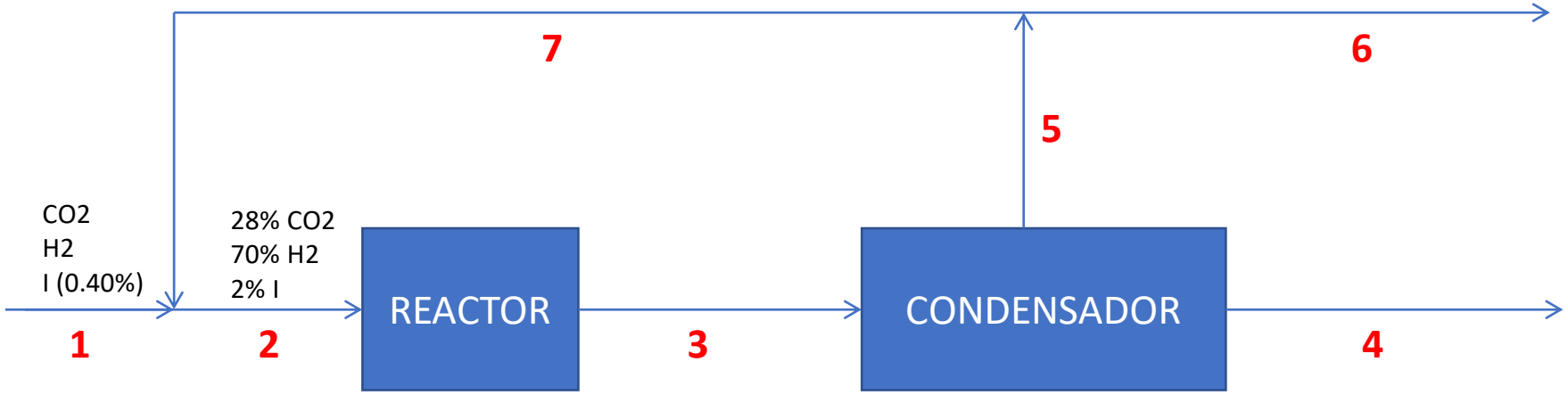


	1	2	3	4	5	6	7
CO2	✓	✓					
H2	✓	✓					
inertes	✓	✓					
CH3OH	0	0					
H2O	0	0					
total							

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%

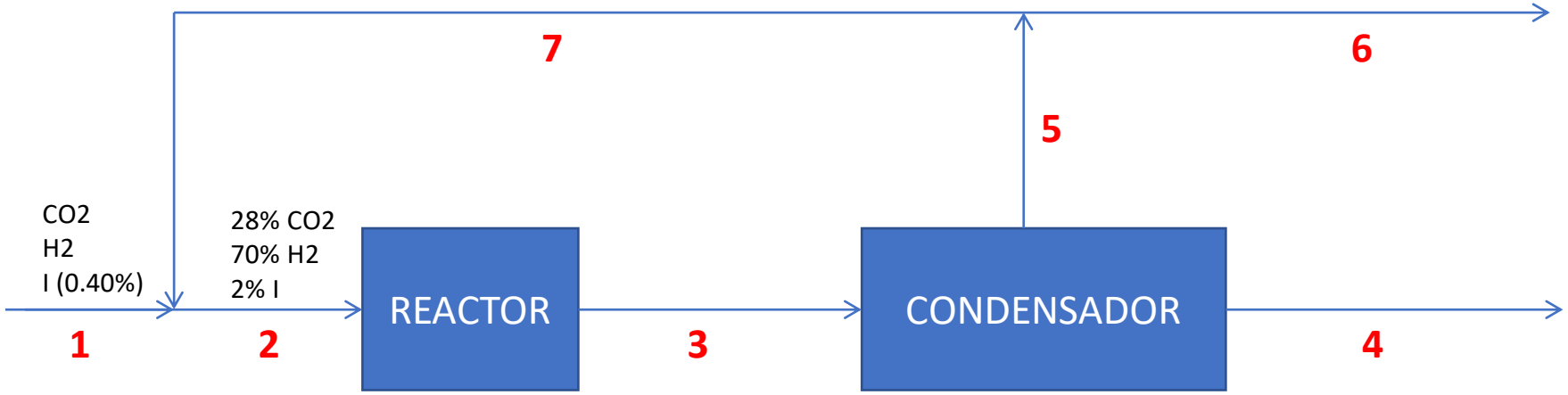


	1	2	3	4	5	6	7
CO2	✓	✓	✓				
H2	✓	✓	✓				
inertes	✓	✓	✓				
CH3OH	0	0	✓				
H2O	0	0	✓				
total							

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%

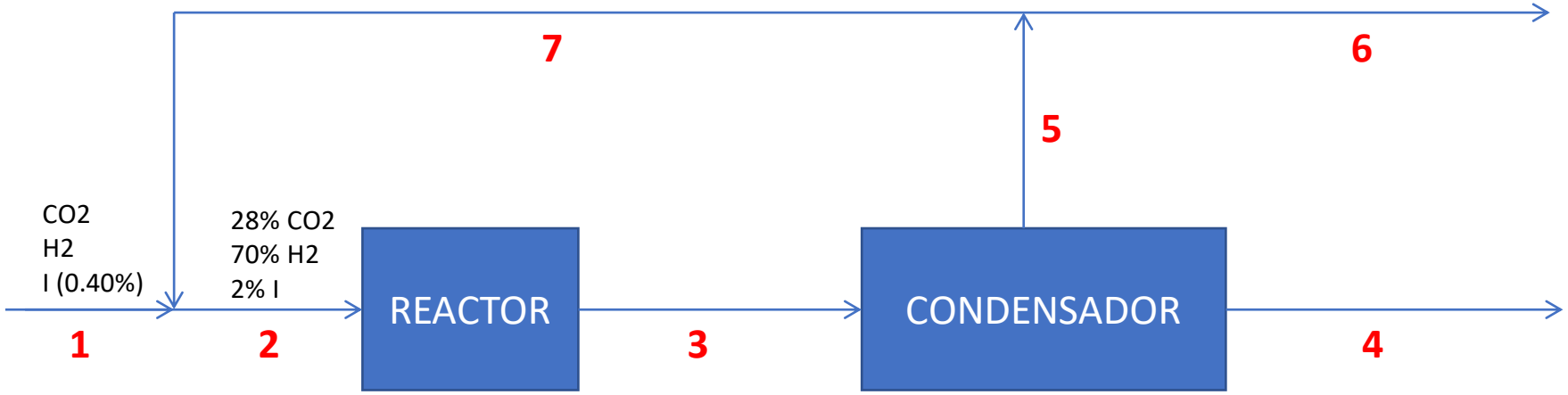


	1	2	3	4	5	6	7
CO2	✓	✓	✓	0			
H2	✓	✓	✓	0			
inertes	✓	✓	✓	0			
CH3OH	0	0	✓	✓			
H2O	0	0	✓	✓			
total							

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%

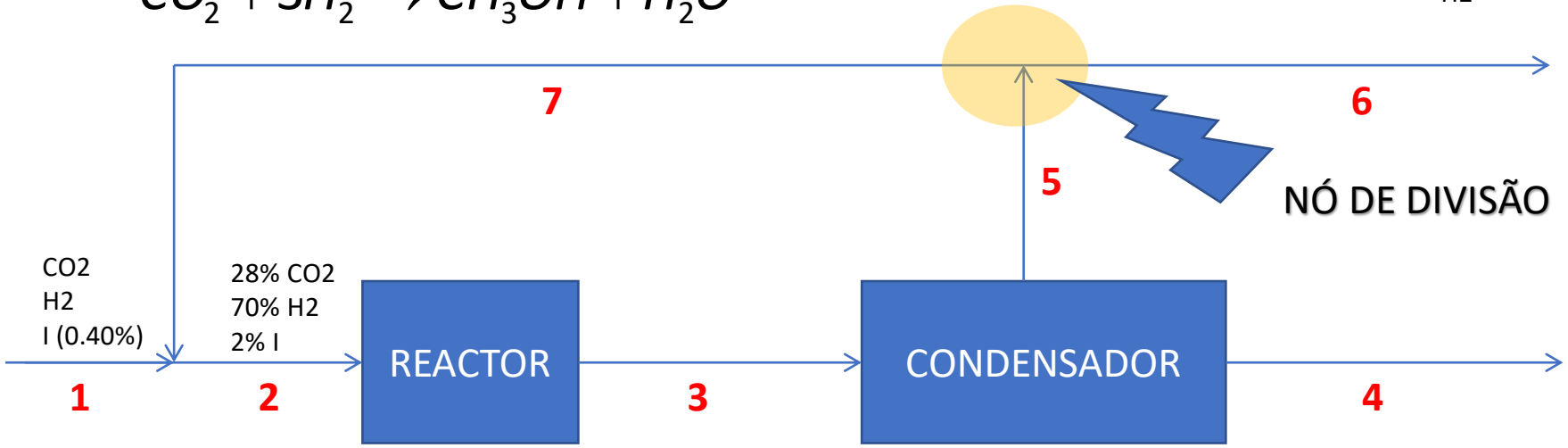


	1	2	3	4	5	6	7
CO2	✓	✓	✓	0	✓		
H2	✓	✓	✓	0	✓		
inertes	✓	✓	✓	0	✓		
CH3OH	0	0	✓	✓	0		
H2O	0	0	✓	✓	0		
total							

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%



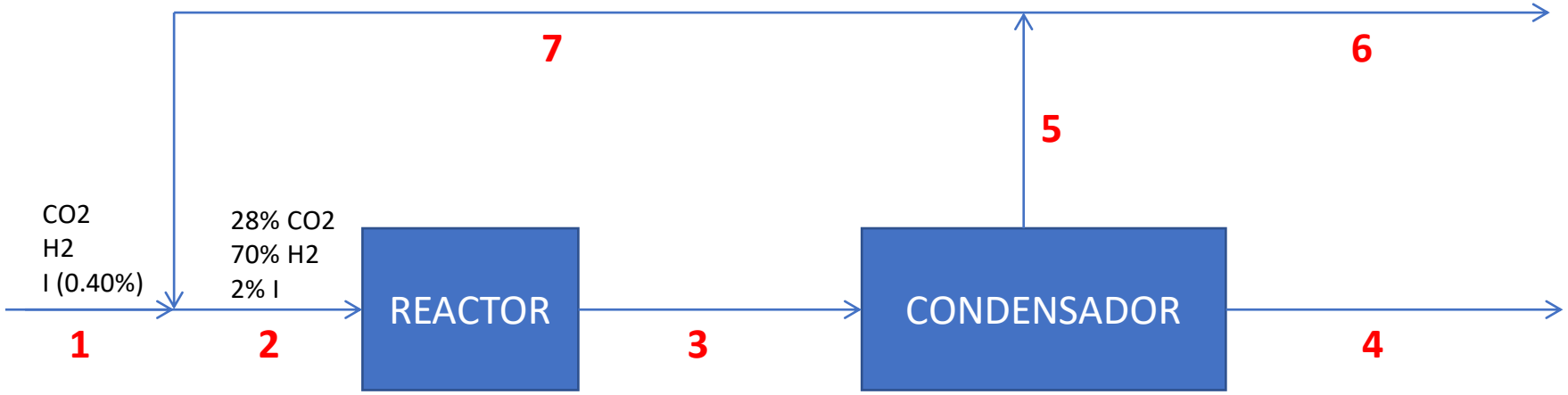
	1	2	3	4	5	6	7
CO2	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
H2	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
inertes	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
CH3OH	0	0	✓	✓			
H2O	0	0	✓	✓			
total							

$$(x_{CO_2})_5 = (x_{CO_2})_7 = (x_{CO_2})_6$$
$$(x_{H_2})_5 = (x_{H_2})_7 = (x_{H_2})_6$$
$$(x_{inertes})_5 = (x_{inertes})_7 = (x_{inertes})_6$$

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%

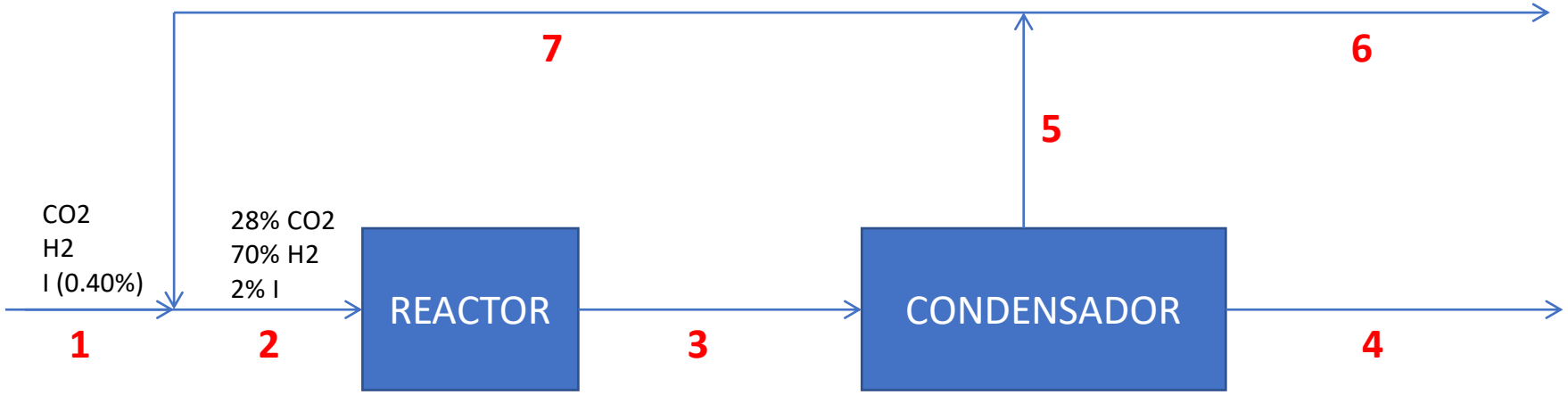


	1	2	3	4	5	6	7
CO2	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
H2	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
inertes	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
CH3OH	0	0	✓	✓	0	0	0
H2O	0	0	✓	✓	0	0	0
total							

NOVA SCHOOL OF SCIENCE & TECHNOLOGY

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

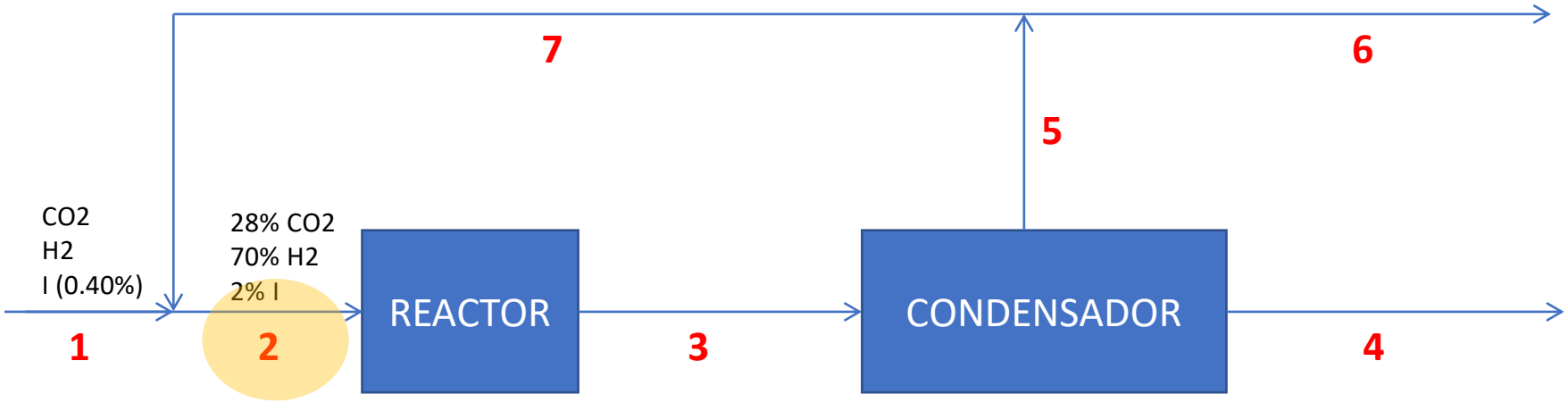
%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%



	1	2	3	4	5	6	7
CO2						✓	✓
H2	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
inertes	✓						
CH3OH	0						
H2O	0	0	✓	✓	0	0	0
total							

Por onde começamos???

Onde colocamos a base de cálculo?



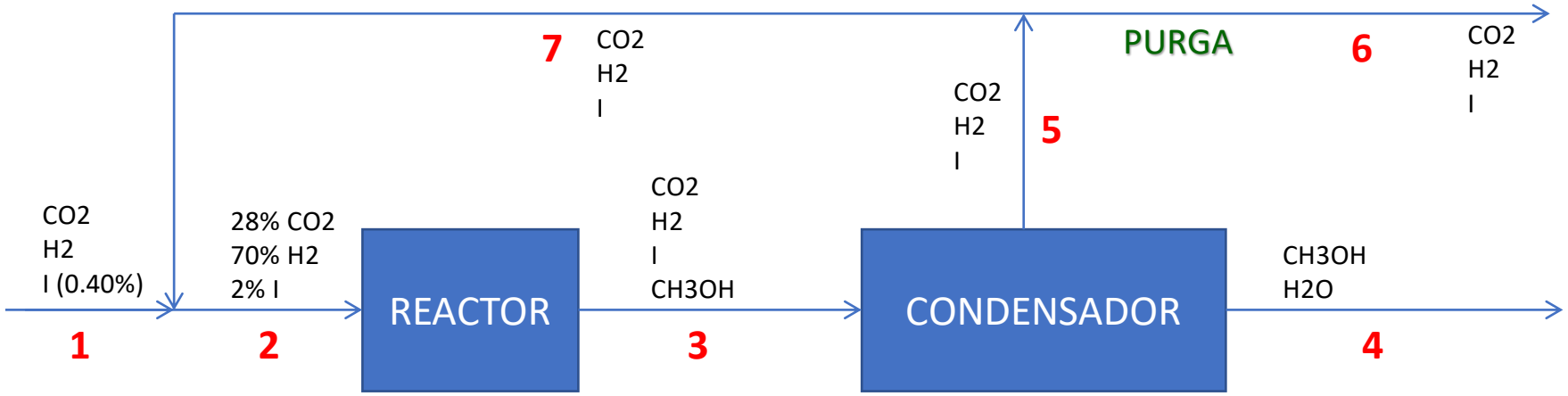
$$Conversão\ global = \frac{n_{H_2}\ em\ 1 - n_{H_2}\ em\ 6}{n_{H_2}\ em\ 1} \times 100$$

%Conversão por passe $_{H2}$ = 60%

$$Conversão\ por\ passe = \frac{n_{H_2}\ em\ 2 - n_{H_2}\ em\ 3}{n_{H_2}\ em\ 2} \times 100$$

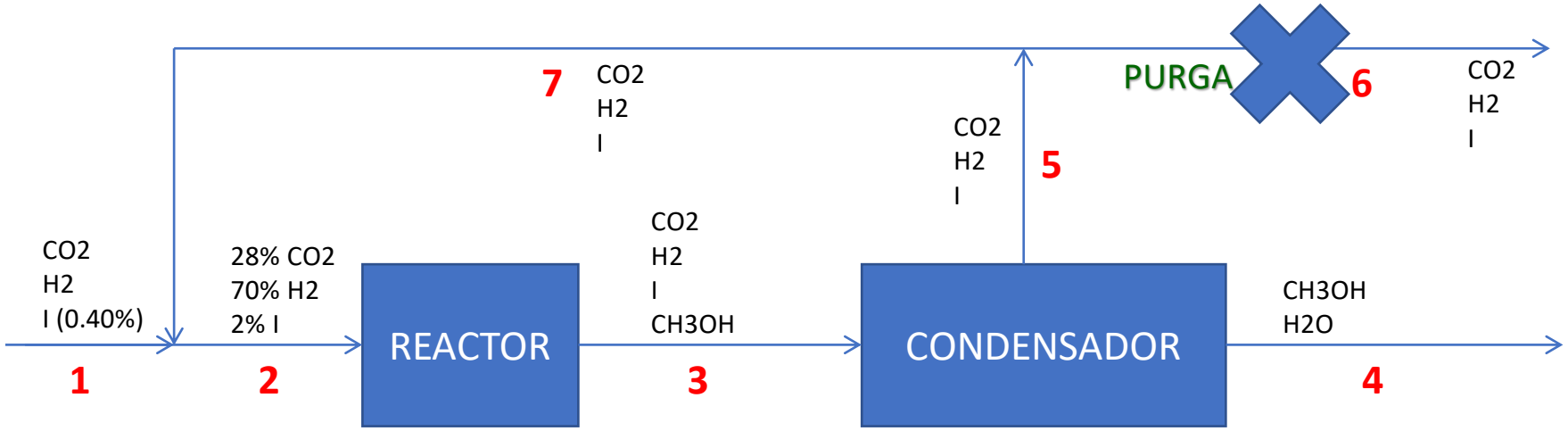
=> Na corrente 2 !

Definição de purga



	1	2	3	4	5	6	7
CO2	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
H2	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
inertes	✓	✓	✓	0	✓	✓	✓
CH3OH	0	0	✓	✓	0	0	0
H2O	0	0	✓	✓	0	0	0

Definição de purga



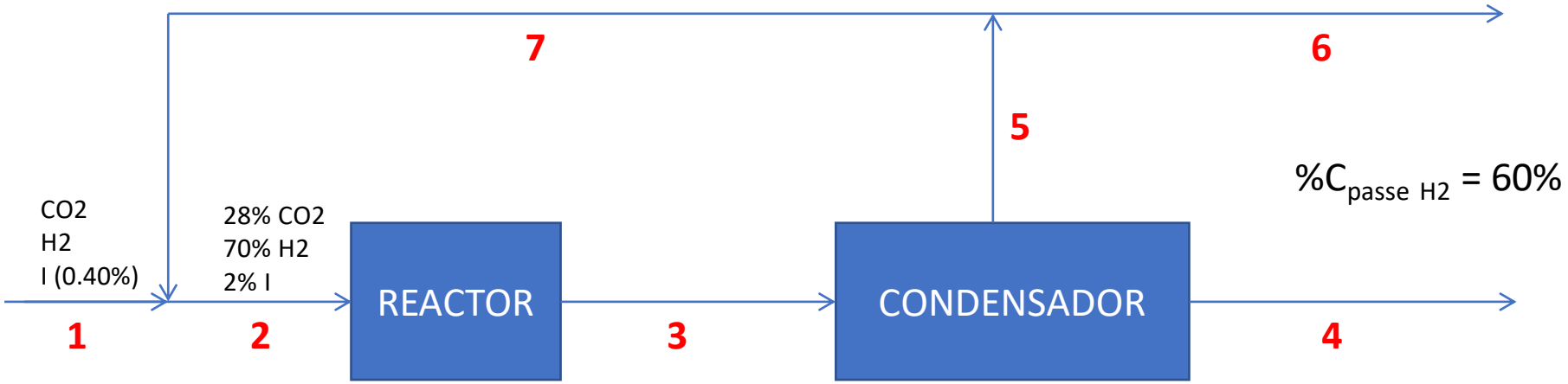
E se não existisse a corrente 6?

=> O inerte ia acumular no sistema não sendo possível atingir o estado estacionário

=> Eventualmente, ou o inerte, em concentrações mais elevadas, passaria a participar na reacção; ou, aumentando desproporcionadamente a pressão, ocorreria risco de explosão!

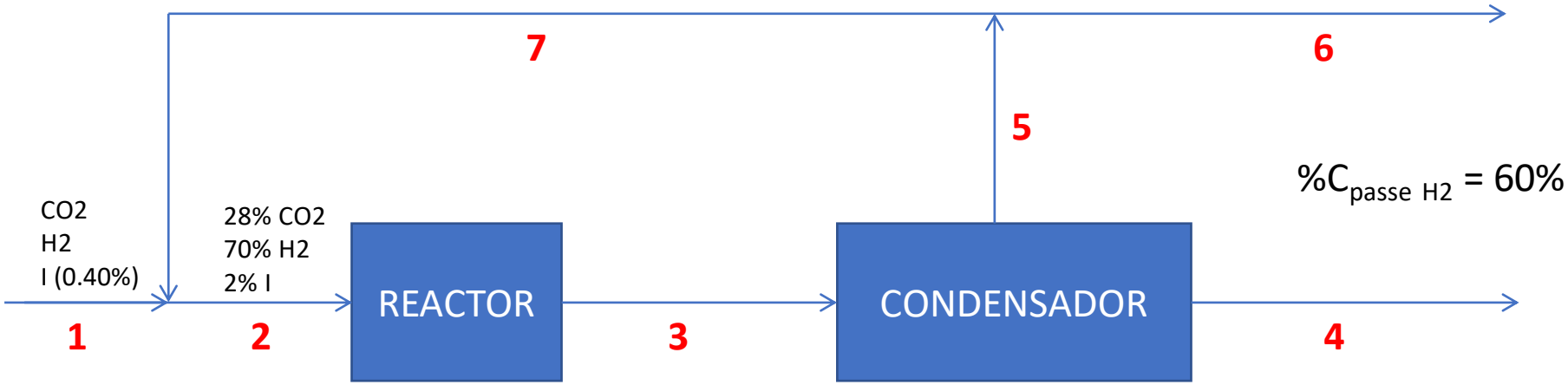
Solução?

=> Efectuar a purga da corrente de reciclo!



Consideremos como base de cálculo a entrada de 100 kmol/h de moles totais na corrente 2.

	1	2	3	4	5	6	7
CO2				0			
H2				0			
inertes				0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					



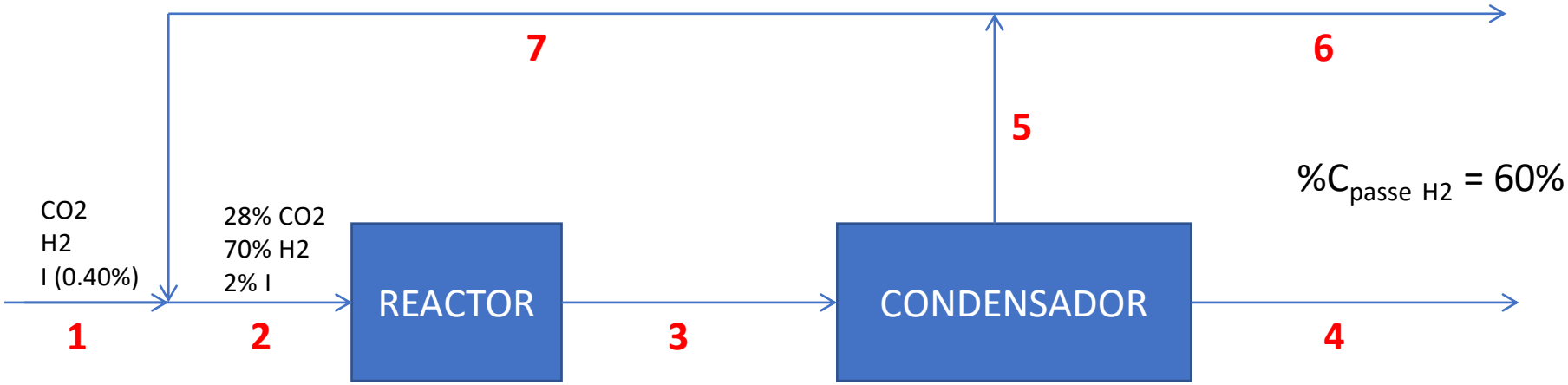
Consideremos como base de cálculo a entrada de 100 kmol/h de moles totais na corrente 2.

$28\_kmol/h\_CO_2$

$70\_kmol/h\_H_2$

$2\_kmol/h\_inertes$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2				0			
H2				0			
inertes				0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					



Consideremos como base de cálculo a entrada de 100 kmol/h de moles totais na corrente 2.

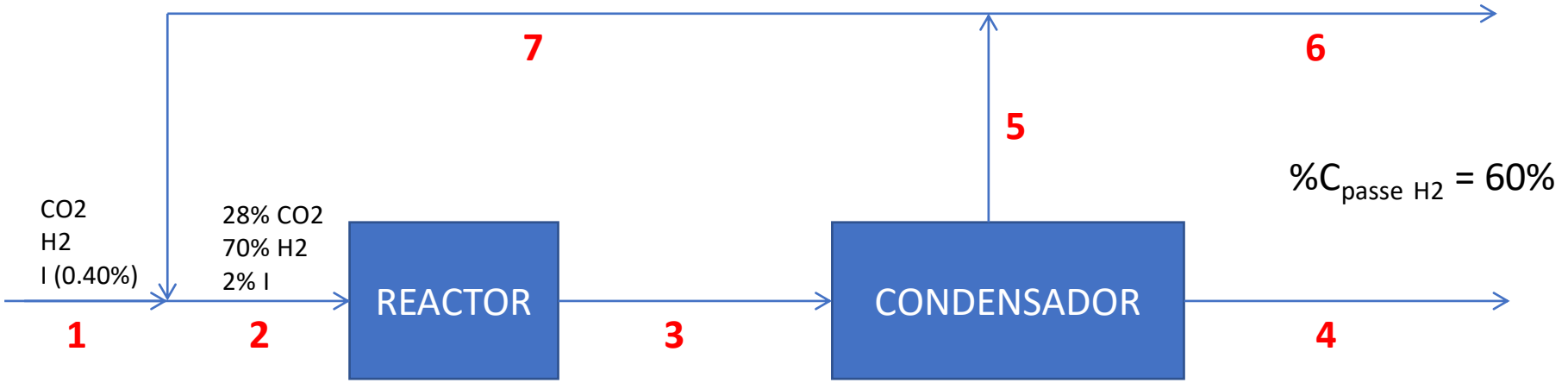
$28\_kmol/h\_CO_2$

$70\_kmol/h\_H_2$

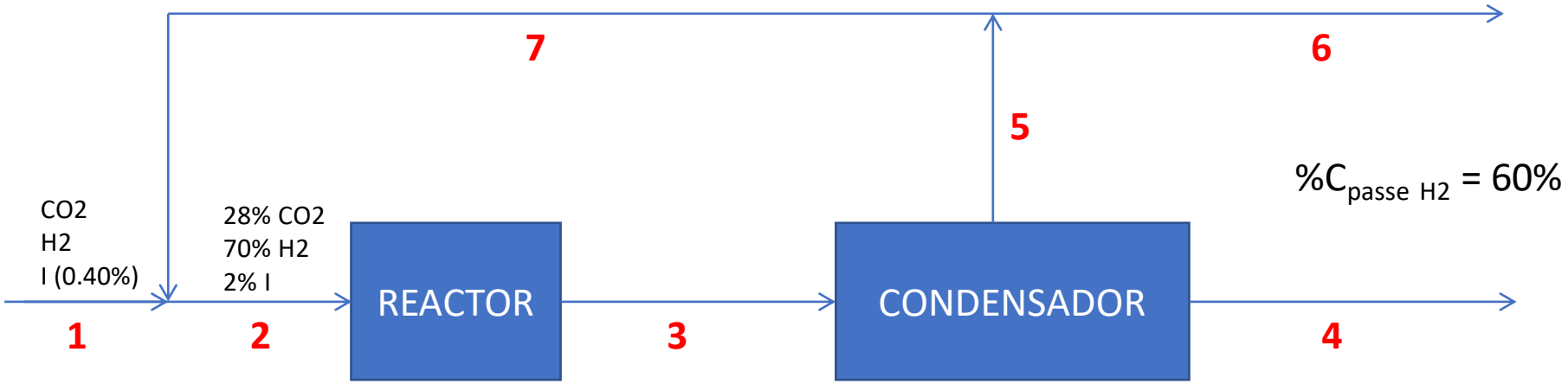
$2\_kmol/h\_inertes$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28		0			
H2		70		0			
inertes		2		0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$

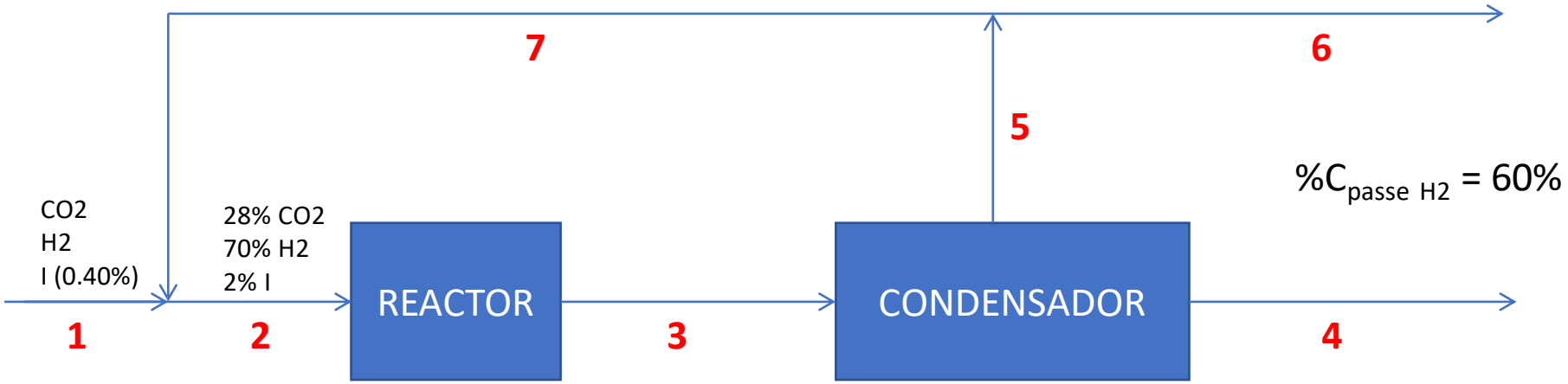


	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28		0			
H2		70		0			
inertes		2	2	0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					



%Conversão por passe do hidrogénio = 60%

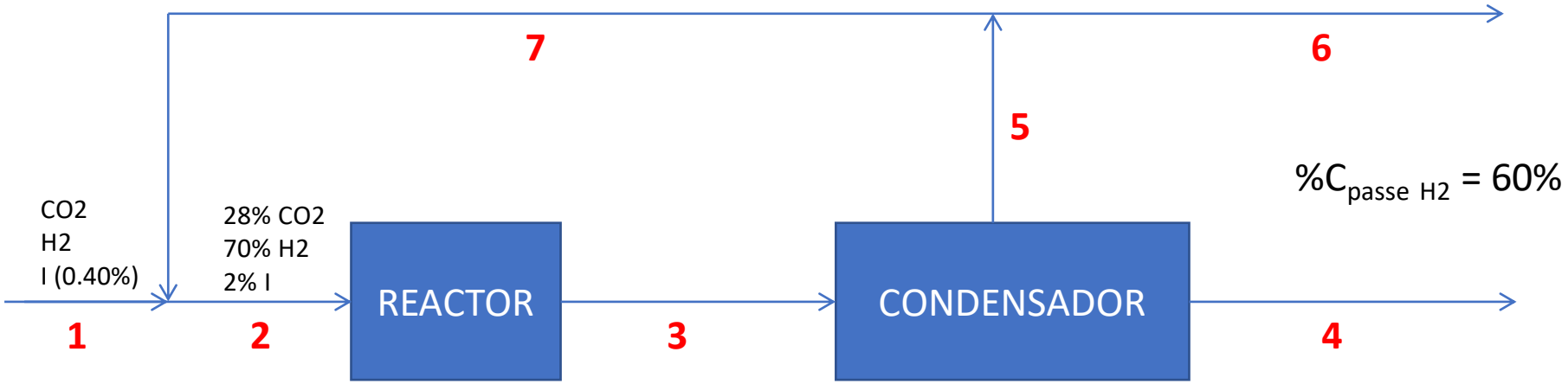
	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28		0			
H2		70		0			
inertes		2	2	0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					



A conversão de H2 é de 60%: $(n_{H_2})_{convertidas} = 0{,}6 * 70 = 42\_kmol/h$

$(n_{H_2})_3 = 70 - 42 = 28\_kmol/h$

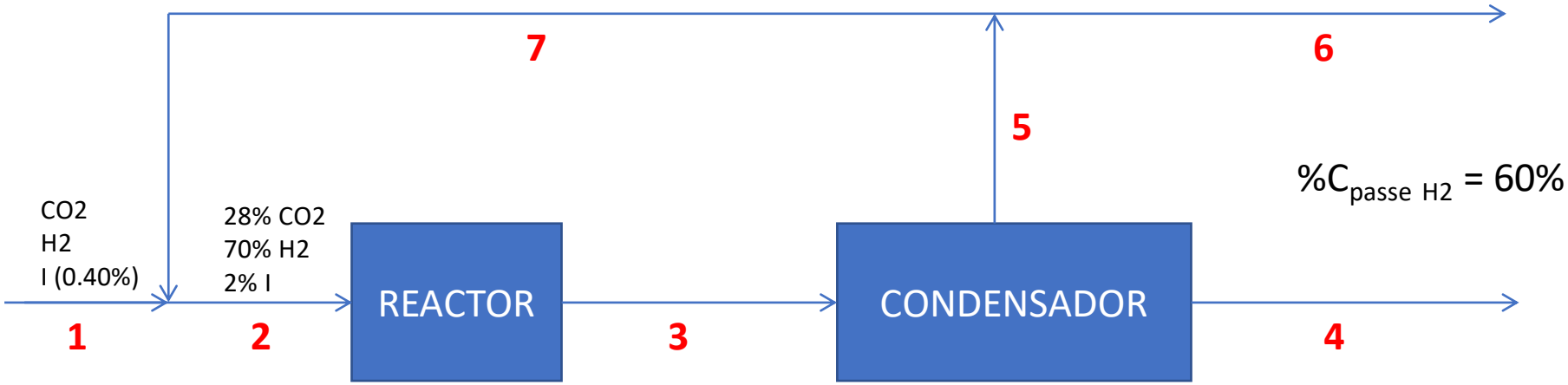
	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28		0			
H2		70		0			
inertes		2	2	0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					



A conversão de H2 é de 60%: $(n_{H_2})_{convertidas} = 0{,}6 * 70 = 42\_kmol/h$

$(n_{H_2})_3 = 70 - 42 = 28\_kmol/h$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28		0			
H2		70	28	0			
inertes		2	2	0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					



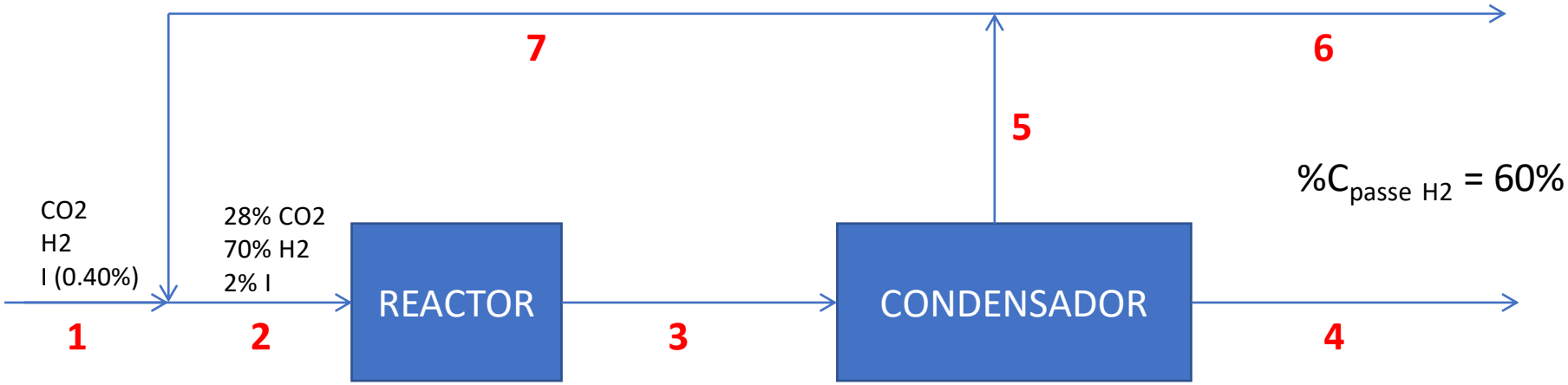
A conversão de H2 é de 60%: $(n_{H_2})_{convertidas} = 0{,}6 * 70 = 42\_kmol/h$

$(n_{H_2})_3 = 70 - 42 = 28\_kmol/h$

A conversão de CO_2 será então:

$1mol\_CO_2 \Leftrightarrow 3mol\_H_2$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28		0			
H2		70	28	0			
inertes		2	2	0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					



A conversão de H2 é de 60%: $(n_{H_2})_{convertidas} = 0{,}6 * 70 = 42\_kmol/h$

$(n_{H_2})_3 = 70 - 42 = 28\_kmol/h$

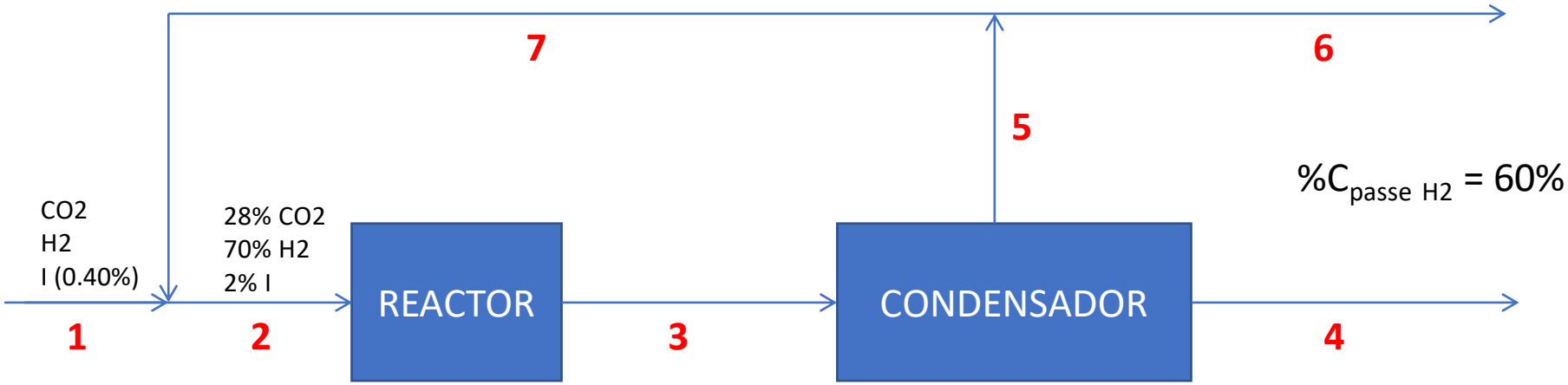
A conversão de CO_2 será então:

$1mol\_CO_2 \Leftrightarrow 3mol\_H_2$

$(n_{CO_2})_{convertidas} = \frac{42}{3} = 14\ kmol/h$

$(n_{CO_2})_3 = 28 - 14 = 14\_kmol/h$

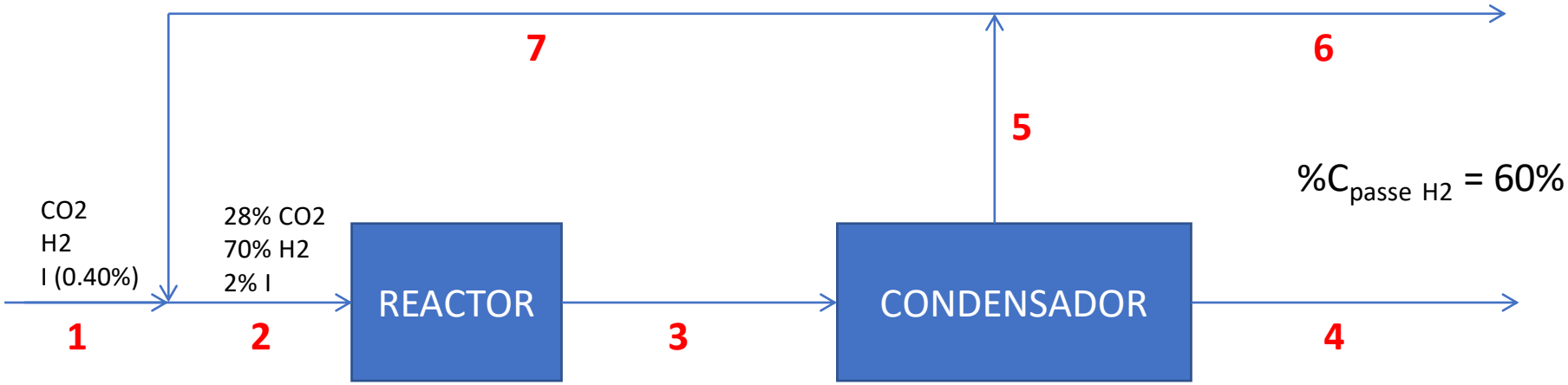
	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28	14	0			
H2		70	28	0			
inertes		2	2	0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					



Se são convertidas 14 kmol/h de dióxido de carbono, então são gerados:

$$(n_{CH_3OH})_{geradas} = 14\_kmol/h = (n_{CH_3OH})_3 \qquad (n_{H_2O})_{geradas} = 14\_kmol/h = (n_{H_2O})_3$$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28	14	0			
H2		70	28	0			
inertes		2	2	0			
CH3OH	0	0			0	0	0
H2O	0	0			0	0	0
total		100					

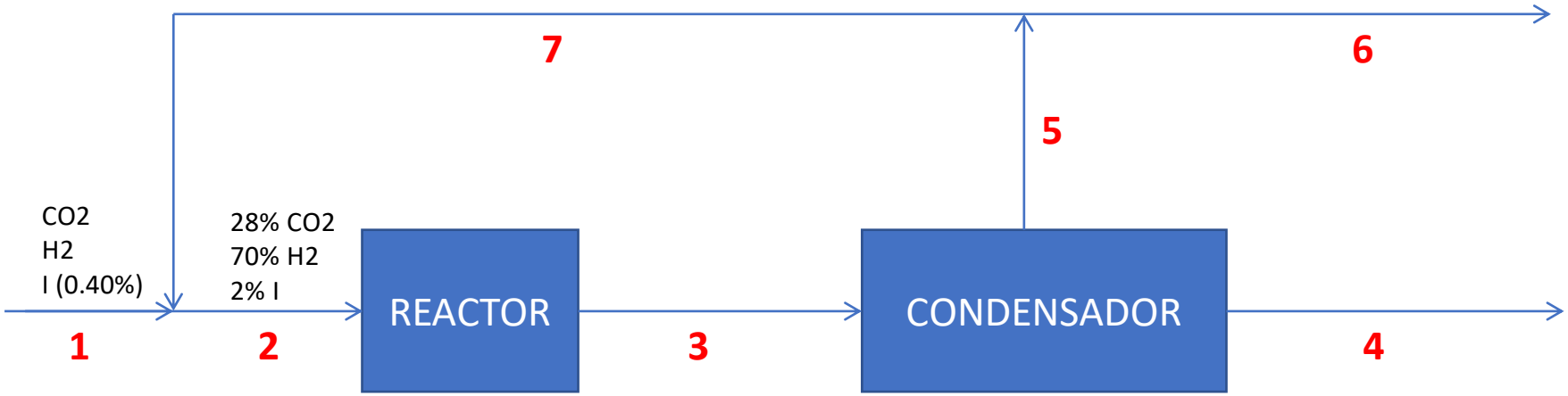


Se são convertidas 14 kmol/h de dióxido de carbono, então são gerados:

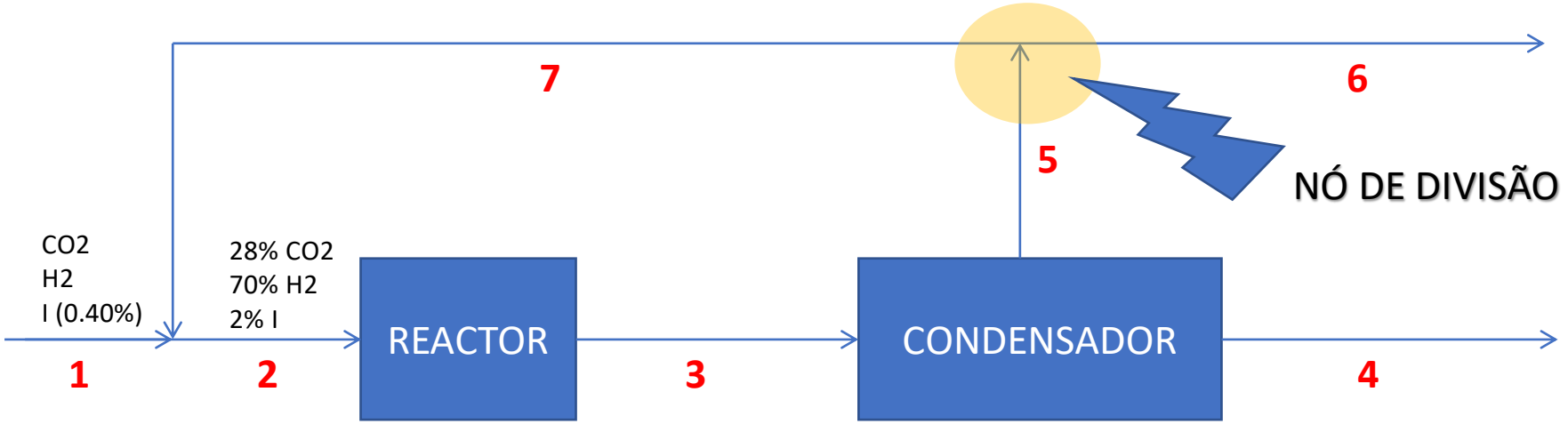
$$(n_{CH_3OH})_{geradas} = 14\_kmol/h = (n_{CH_3OH})_3 \qquad (n_{H_2O})_{geradas} = 14\_kmol/h = (n_{H_2O})_3$$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28	14	0			
H2		70	28	0			
inertes		2	2	0			
CH3OH	0	0	14		0	0	0
H2O	0	0	14		0	0	0
total		100					

$$CO_2 + 3H_2 \rightarrow CH_3OH + H_2O$$



	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28	14	0	14		
H2		70	28	0	28		
inertes		2	2	0	2		
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total		100	72	28	44		



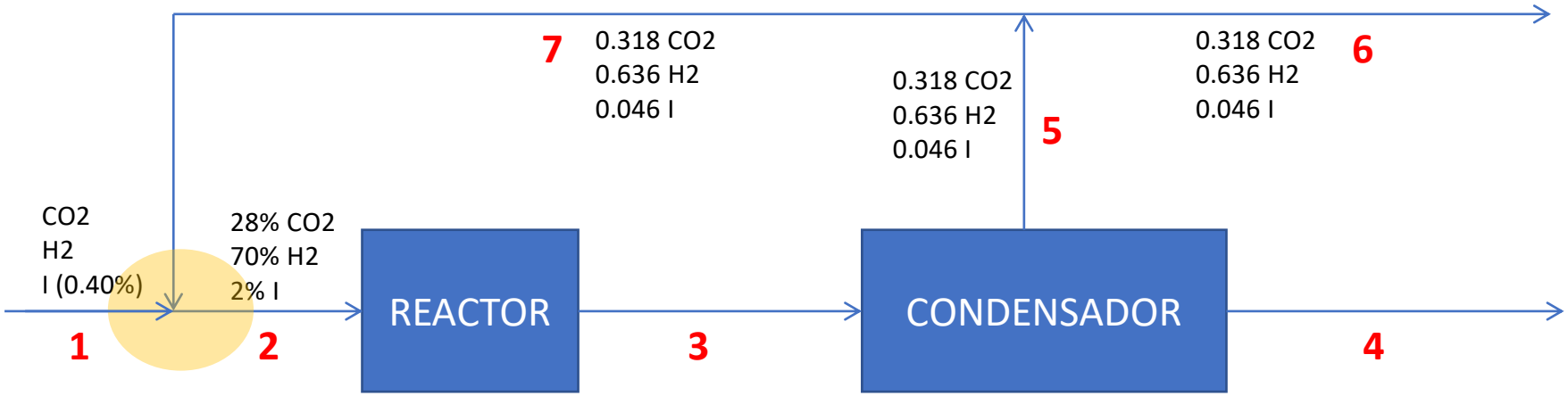
Caracterização das correntes 5, 6 e 7:

$$(x_{CO_2})_5 = (x_{CO_2})_7 = (x_{CO_2})_6 = 14/44 = 0{,}318$$

$$(x_{H_2})_5 = (x_{H_2})_7 = (x_{H_2})_6 = 28/44 = 0{,}636$$

$$(x_{inertes})_5 = (x_{inertes})_7 = (x_{inertes})_6 = 2/44 = 0{,}046$$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28	14	0	14		
H2		70	28	0	28		
inertes		2	2	0	2		
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total		100	72	28	44		



Balanço material ao NÓ DE ADIÇÃO (1+7=2)

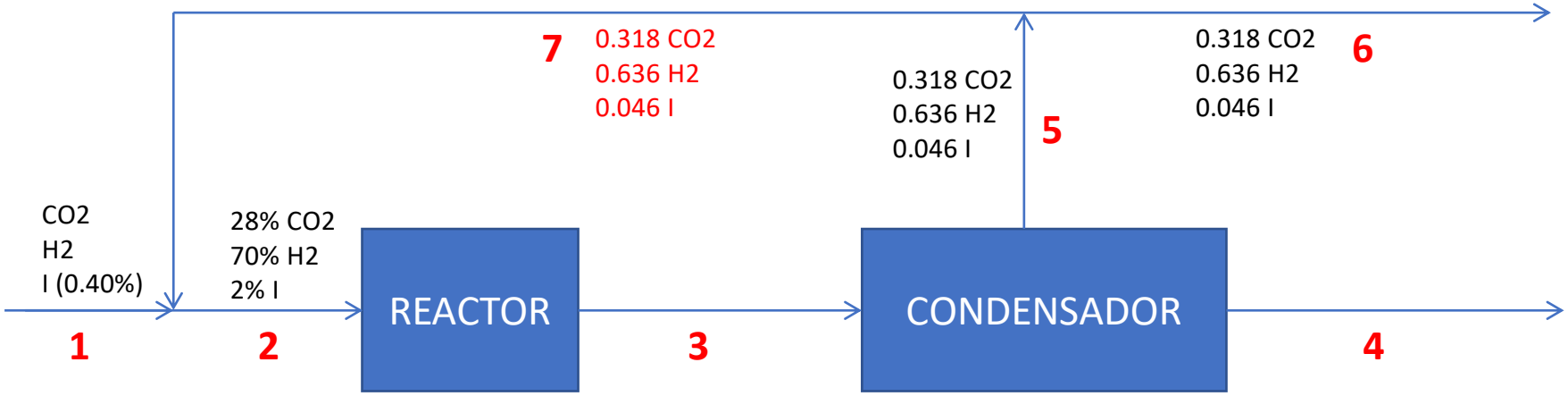
$$\begin{cases} n_1 + n_7 = n_2 = 100 \\ (x_{inertes})_1 \times n_1 + (x_{inertes})_7 \times n_7 = 0.02 \times 100 \end{cases}$$

$$\begin{cases} n_1 + n_7 = 100 \\ 0.004 \times n_1 + 0.046 \times n_7 = 2 \end{cases}$$

$n_1 = 61{,}9\_kmol/h$

$n_7 = 38{,}1\_kmol/h$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28	14	0	14		
H2		70	28	0	28		
inertes		2	2	0	2		
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total	61.9	100	72	28	44		38.1

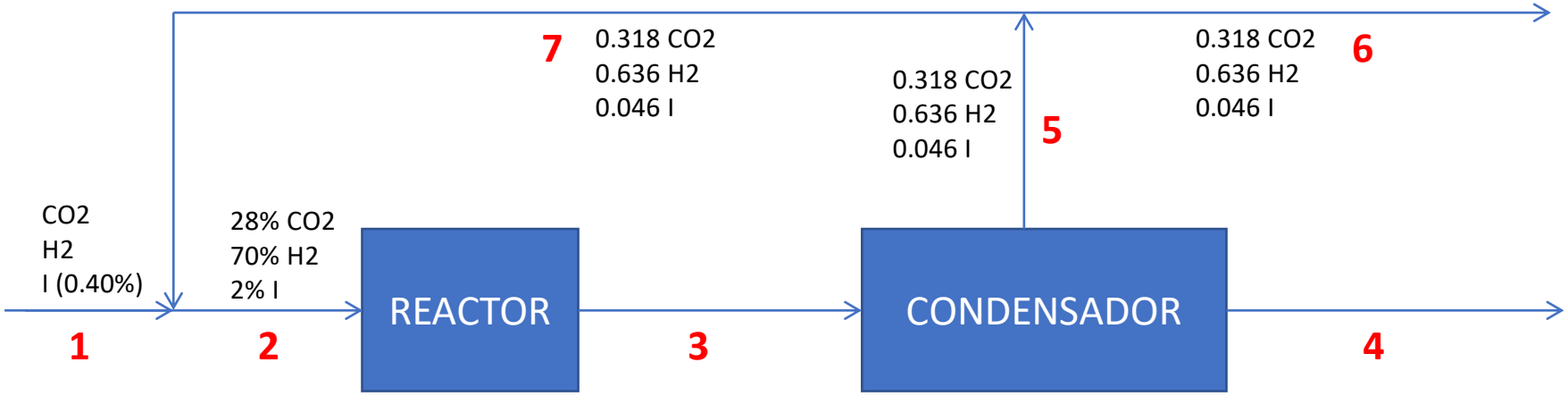


- Sabendo a composição da corrente 7 e as moles totais calculam-se as parciais.

- Corrente 7

$$n_{CO2\_7} = 0.318 \times 38.1 = 12.1\ kmol$$
$$n_{H2\_7} = 0.636 \times 38.1 = 24.2\ kmol$$
$$n_{I\_7} = 0.046 \times 38.1 = 1.8\ kmol$$

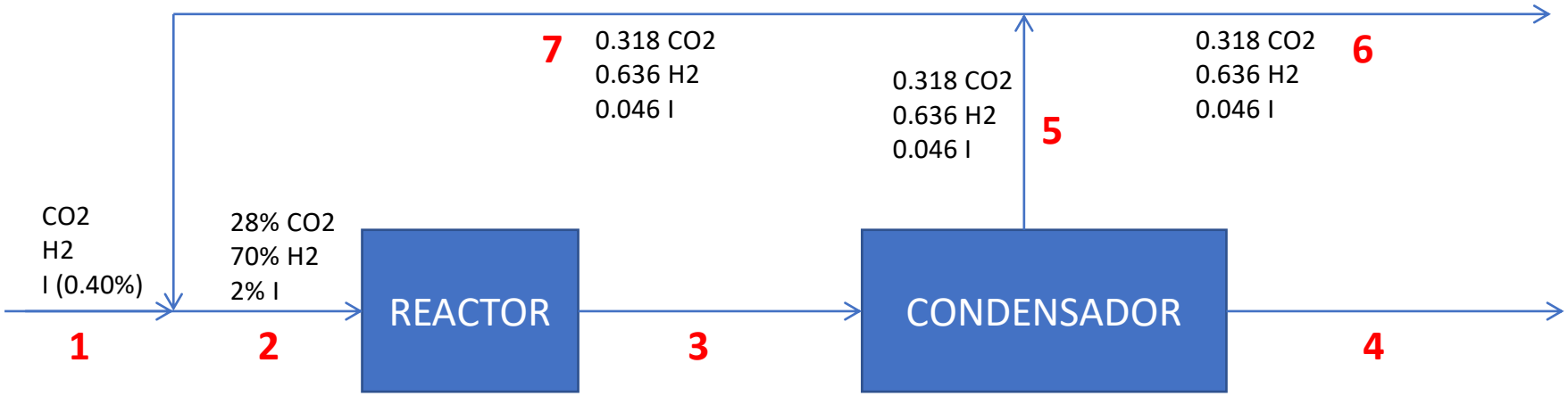
	1	2	3	4	5	6	7
CO2		28	14	0	14		12.1
H2		70	28	0	28		24.2
inertes		2	2	0	2		1.8
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total	61.9	100	72	28	44		38.1



- Corrente 1

$$n_{CO2\_1} = n_{CO2\_2} - n_{CO2\_7} = 28 - 12.1 = 15.9\ kmol$$
$$n_{H2\_1} = n_{H2\_2} - n_{H2\_7} = 70 - 24.2 = 45.8\ kmol$$
$$n_{I\_1} = n_{I\_2} - n_{I_7} = 2 - 1.8 = 0.2\ kmol$$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2	15.9	28	14	0	14		12.1
H2	45.8	70	28	0	28		24.2
inertes	0.2	2	2	0	2		1.8
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total	61.9	100	72	28	44		38.1



$$n_5 = n_6 + n_7$$

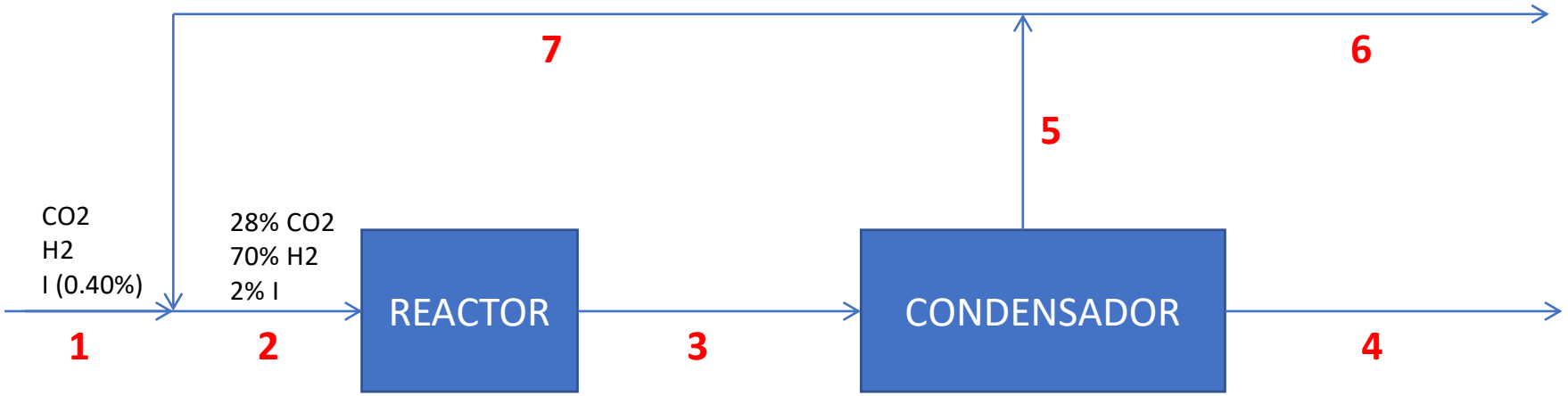
$$n_6 = n_5 - n_7 = 5.9\ kmol$$

$$n_{I\_6} = 0.046 \times 5.9 = 0.2\ kmol$$

$$n_{H2\_6} = 0.636 \times 5.9 = 3.8\ kmol$$

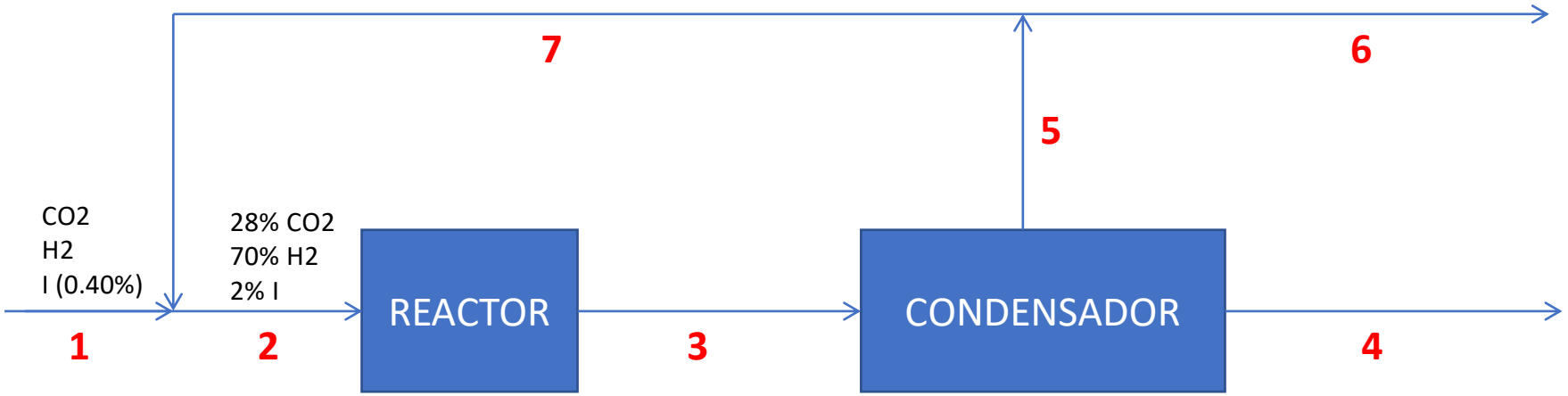
$$n_{CO2\_6} = 0.318 \times 5.9 = 1.9\ kmol$$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2	15.9	28	14	0	14		12.1
H2	45.8	70	28	0	28		24.2
inertes	0.2	2	2	0	2		1.8
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total	61.9	100	72	28	44	5.9	38.1



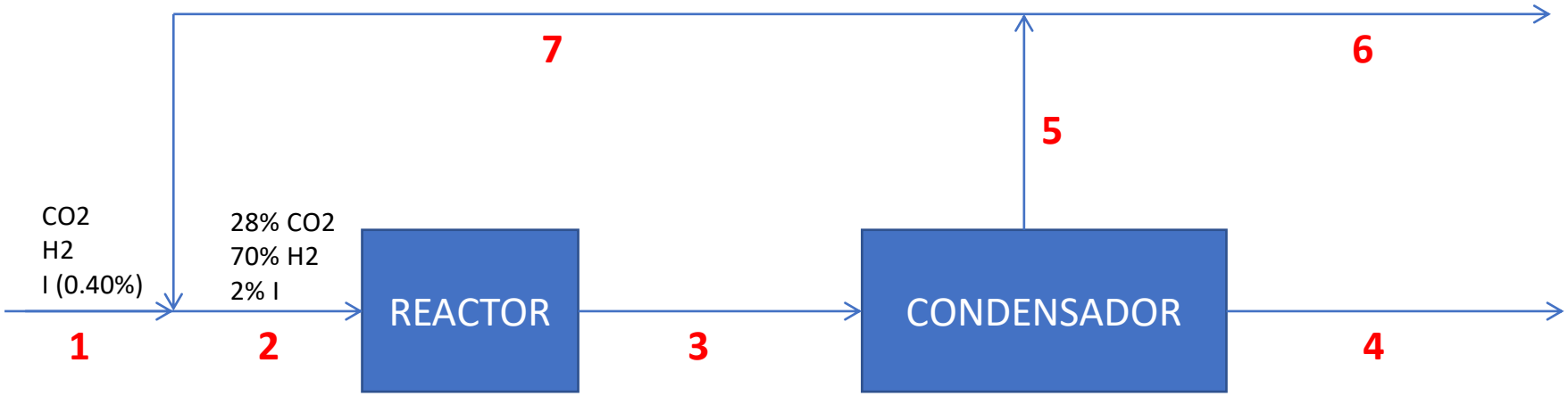
a) Balanço material

	1	2	3	4	5	6	7
CO2	15.9	28	14	0	14	1.9	12.1
H2	45.8	70	28	0	28	3.8	24.2
inertes	0.2	2	2	0	2	0.2	1.8
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total	61.9	100	72	28	44	5.9	38.1



b) $Razão\_purga = \frac{n_6}{n_5} = \frac{5.9}{44} = 0.13$ $Razão\_reciclo = \frac{n_7}{n_1} = \frac{38.1}{61.9} = 0.62$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2	15.9	28	14	0	14	1.9	12.1
H2	45.8	70	28	0	28	3.8	24.2
inertes	0.2	2	2	0	2	0.2	1.8
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total	61.9	100	72	28	44	5.9	38.1



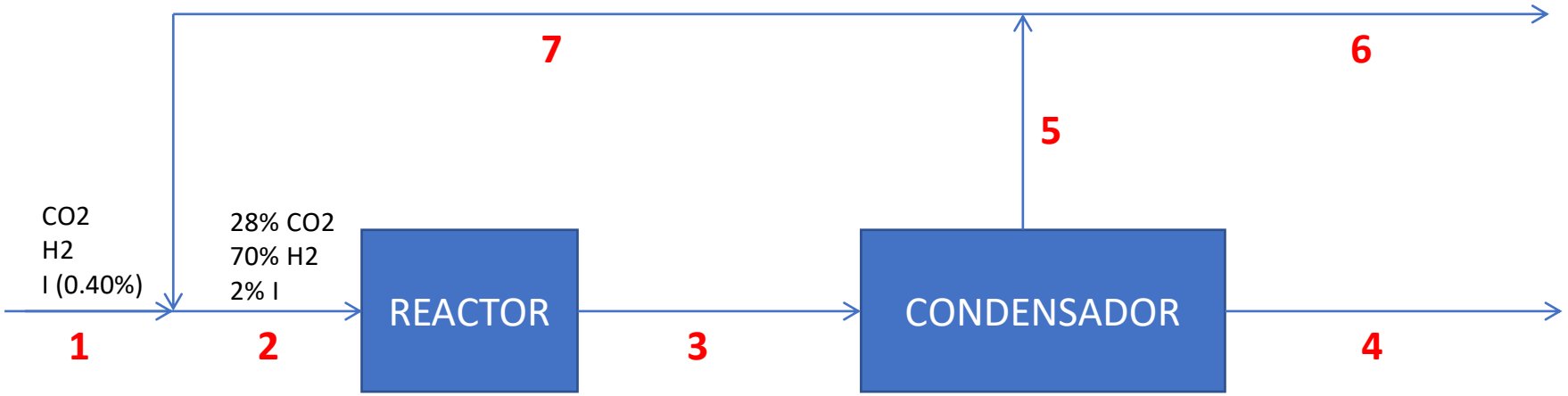
c)

$$Conversão\ global = \frac{n_{H_2}\ em\ 1 - n_{H_2}\ em\ 6}{n_{H_2}\ em\ 1} \times 100$$

	1	2	3	4	5	6	7
CO2	15.9	28	14	0	14	1.9	12.1
H2	45.8	70	28	0	28	3.8	24.2
inertes	0.2	2	2	0	2	0.2	1.8
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	14	0	0	0
total	61.9	100	72	28	44	5.9	38.1

$$X_{global} = \frac{45.8 - 3.8}{45.8} \times 100$$

$$X_{global} = 91.7\%$$



d)

Para 61.9 kmol/h em 1 ➡ Produz-se 14 kmol/h de metanol em 3 e 4

⬇

Para BC 155kmol/h de metanol em 3 e 4?

155 kmol/h metanol —— x

14 kmol metanol —— **61.9 kmol**

➡ **Consomem-se 685 kmol/h de matéria prima em 1**

	1	2	3	4	5	6	7
CO2	15.9	28	14	0	14	1.9	12.1
H2	45.8	70	28	0	28	3.8	24.2
inertes	0.2	2	2	0	2	0.2	1.8
CH3OH	0	0	14	14	0	0	0
H2O	0	0	14	**14**	0	0	0
total	**61.9**	100	72	28	44	5.9	38.1