ERQ I – Teste 2017.2 Resolução

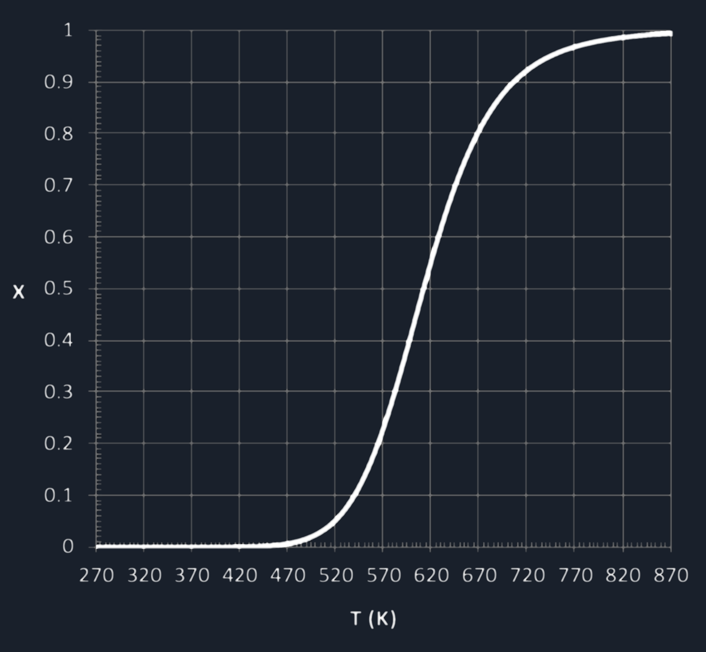
Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

9 de dezembro de 2023

Conteúdo

Questão 1

A reacção reversível A $\rightleftharpoons$ B é conduzida, na fase gasosa, num reactor tubular adiabático. O reagente A (30%) e um inerte são alimentados, à temperatura de $773\,\mathrm{K}$, a um caudal volumétrico de $100\,\mathrm{L/min}$. A figura representa a variação da conversão de equilíbrio com a temperatura.



Dados:

- $C_{pA} = C_{pB} = 10\,\mathrm{cal/mol\,K}$
- $Ea = 25\,\mathrm{kcal/mol}$
- $C_{pI} = 12\,\mathrm{cal/mol\,K}$
- $R = 1.987\,\mathrm{cal\,mol^{-1}\,K^{-1}}$
- $K_{e\,(773\,\mathrm{K})} = 30$
- $\Delta H_R = 20\,\mathrm{kcal/mol}$
- Constante cinética da reação direta $k_{(773\,\mathrm{K})} = 8.57\,\mathrm{min}^{-1}$

Q1 a.

Determine, usando o gráfico, o valor do calor de reação

Resposta

$$\Delta H : k_{e\,(T)} = k_{e\,(T_R)}\,\exp\left(-\frac{\Delta H}{R}\,(T^{-1} - T_R^{-1})\right)$$

$$k_e = \frac{\sum p_{1\,E}}{\sum p_{0\,E}} = \frac{p_{B\,E}}{p_{A\,E}} =$$
$$= \frac{C_{B\,E}\,R\,T}{C_{A\,E}\,R\,T} = \frac{C_{A\,0}\,X}{C_{A\,0}(1-X)} = \frac{1}{-1+1/X} \implies$$
$$\implies X = \frac{1}{1+1/K_e} \implies X = 0.5 \begin{cases} K_e = 1 \\ T \cong 610\,\mathrm{K} \end{cases} \implies$$

$$\implies \Delta H = -\frac{R}{(610^{-1} - 773^{-1})}\,\ln\frac{k_{e\,(610\,\mathrm{K})}}{k_{e\,(773\,\mathrm{K})}} \cong$$
$$\cong -\frac{1.987}{(610^{-1} - 773^{-1})}\,\ln\frac{1}{30} \cong 19.552\,\mathrm{kcal/mol}$$

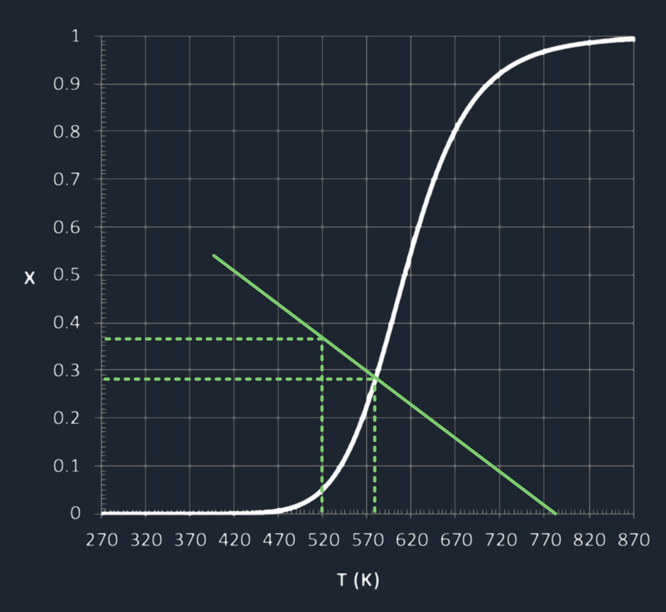
Q1 b.

Determine a conversão de equilíbrio e a correspondente temperatura de equilíbrio.

Resposta

$$X_{1\,(520\,\mathrm{K})} = \frac{C_{p\,A} + \theta_I\,C_{p\,I}(T - T_0)}{-\,\Delta H_R} = \frac{C_{p\,A} + \frac{Y_{I\,0}}{Y_{A\,0}}\,C_{p\,I}(T - T_0)}{-\,\Delta H_R} \cong$$
$$\cong \frac{(10 + \frac{0.7}{0.3}\,12)(520 - 773)}{-19.552\,\mathrm{E}^3} \cong 0.492$$

$$\begin{cases} T_0 = 773\,\mathrm{K}; \quad X_0 = 0 \\ T_1 = 520\,\mathrm{K}; \quad X_1 = 0.492 \end{cases}$$



$$\boldsymbol{X_{eq} \cong 0.29 \wedge T_{eq} \cong 580}\,\mathrm{K}$$

Q1 c.

Calcule o volume do reactor, necessário a uma conversão de 95% da conversão de equilíbrio.

Resposta

$$V : V = F_{A\,0}\int_0^X \frac{\mathrm{d}X}{-r_A} = C_{A\,0}\,v_0\int_0^X \frac{\mathrm{d}X}{-r_A};$$

$$-\,r_A = k(C_A - C_B/K_e) =$$
$$= k\left(\left(\frac{C_{A\,0}(1-X)}{1+\varepsilon\,X}\frac{T_0}{T}\right) - \left(\frac{C_{A\,0}\,X}{1+\varepsilon\,X}\frac{T_0}{T}\right)/K_e\right) =$$
$$= k\left(\frac{C_{A\,0}(1 - X(1 - 1/K_e))}{1+\varepsilon\,X}\frac{T_0}{T}\right) =$$
$$= k\left(\frac{C_{A\,0}(1 - X(1 - 1/K_e))}{1+y_{A\,0}\,\delta\,X}\frac{T_0}{T}\right) =$$
$$= k\left(\frac{C_{A\,0}(1 - X(1 - 1/K_e))}{1+y_{A\,0}\,(1-1)\,X}\frac{T_0}{T}\right) =$$
$$= k\,C_{A\,0}(1 - X(1 - K_e))\frac{T_0}{T} \implies$$

$$\implies V = \int_0^{.95*.29} \frac{v_0}{k\,\frac{T_0}{T}(1 - X\,(1 - 1/K_e))}\,\mathrm{d}X =$$
$$= \int_0^{0.2755} \frac{100}{k\,\frac{773}{T}(1 - X\,(1 - 1/K_e))}\,\mathrm{d}X;$$

$$T : X = \frac{(C_{p\,A} + \theta_I\,C_{p\,I})(T - T_0)}{-\,\Delta H_R} \implies$$
$$\implies T = T_0 - \frac{X\ \Delta H_R}{C_{p\,A} + \theta_I\,C_{p\,I}} \cong 773 - \frac{X\,19.552\,\mathrm{E}^3}{10 + \frac{0.7}{0.3}\,12} \cong$$
$$\cong 773 - X\,5.145\,\mathrm{E}^2;$$

$$k_{(T)} = k_{(T_R)}\,\exp\left(-\frac{Ea}{R}(T^{-1} - T_R^{-1})\right) \cong$$
$$\cong 8.57\,\exp\left(-\frac{25\,\mathrm{E}^3}{1.987}(T^{-1} - 773^{-1})\right) \cong$$
$$\cong 8.57\,\exp\left(-12.580\,\mathrm{E}^3(T^{-1} - 773^{-1})\right);$$

$$K_{e\,(T)} = K_{e\,(T_R)}\,\exp\left(-\frac{\Delta H}{R}\,(T^{-1} - T_R^{-1})\right) \cong$$
$$\cong 30\,\exp\left(-\frac{19.552\,\mathrm{E}^3}{1.987}\,(T^{-1} - 773^{-1})\right) \cong$$
$$\cong 30\,\exp\left(-9.839\,\mathrm{E}^3\,(T^{-1} - 773^{-1})\right);$$

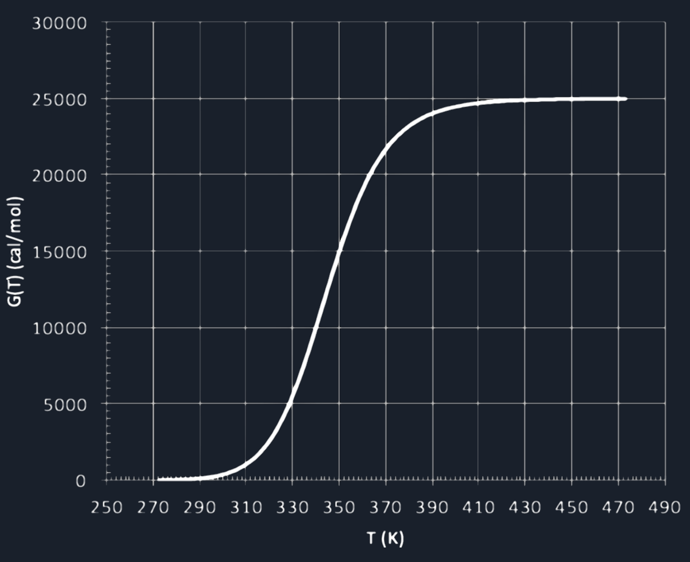
$$h = \frac{X_1 - X_0}{2} = \frac{0.2755}{2} = 0.13775; \qquad X_1 = 0.13775$$

X	T	k	K_e	$f_{(X)}$
0	773	8.57	30	11.669
0.13775	702.123	44.308	108.428	
…				

$$V = \frac{h}{3}\left(f_{(X_0)} + 4\,f_{(X_1)} + f_{(X_2)}\right) =$$
$$= \frac{0.13775}{3}\left(f_{(X_0)} + 4\,f_{(X_1)} + f_{(X_2)}\right) = \dots$$

Questão 2

A reacção elementar em fase líquida, A $\longrightarrow$ B, é conduzida num reactor CSTR adiabático, de $1\,\mathrm{m}^3$, a funcionar em estado estacionário. A alimentação ao reactor, a um caudal volumétrico de $20\,\mathrm{L/min}$ é constituída por A ($10\,\mathrm{mol\,\%}$) e um inerte I. A figura mostra a curva de geração de calor.



Dados:

- $\Delta H_R = -25\,\mathrm{kcal/mol}$
- $C_{p\,A} = C_{p\,B} = 8\,\mathrm{cal/mol\,K}$
- $C_{p\,I} = 18\,\mathrm{cal/\,mole\,K}$
- $R = 1.987\,\mathrm{cal\,mol^{-1}\,K^{-1}}$

Determine:

Q2 a.

O valor da temperatura da corrente de saída, correspondente a uma conversão de 90%

Resposta

$$T : G_{(T)} = -\Delta H_{R\,T}\,X = 25\,\mathrm{E}^3 * .90 \cong 22.500\,\mathrm{E}^3\,\mathrm{cal/mol} \implies$$
$$\implies T_{(22.5\,\mathrm{E}^3)} \cong 370\,\mathrm{K}$$

Q2 b.

O valor da temperatura da alimentação, nas condições da alínea a).

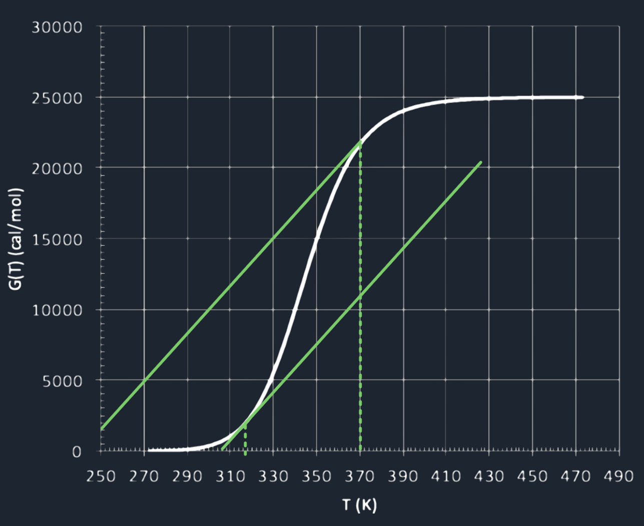
$$T_0 : R_{(T)} = (C_{p\,A} + \theta_I\,C_{p\,I})\,(T - T_0) = G_{(T)} \implies$$
$$\implies T_0 = T - \frac{G_{(T)}}{C_{p\,A} + \theta_I\,C_{p\,I}} \cong 370 - \frac{22.5\,\mathrm{E}^3}{8 + \frac{0.9}{0.1}\,18} \cong 237.647\,\mathrm{K}$$

Q2 c.

Os valores das temperaturas de ignição e extinção.

Resposta

$$\begin{cases} T_0 \cong 237.647\,\mathrm{K}; & G_{(T_0)} = 0 \\ T_1 \cong 370\,\mathrm{K}; & G_{(T_1)} = 22.5\,\mathrm{E}^3 \end{cases}$$
$$G_{(T)} = m\,T + b = m\,T + (-m\,T_0) = m\,(T - T_0) =$$
$$= \frac{\Delta 22.5\,\mathrm{E}^3}{\Delta 370 - 237.647}\,(T - 237.647) = 170\,T - 40400 \implies$$
$$\implies \begin{cases} T_2 = 250; \quad G_{(T_2)} = 2100 \end{cases}$$



$$\boldsymbol{T}_{\text{ignição}} \cong \mathbf{319}\,\mathrm{K} \quad \wedge \quad \boldsymbol{T}_{\text{extinção}} \cong \mathbf{370}\,\mathrm{K}$$

Q2 d.

A composição da alimentação, nas condições da alínea a), para uma temperatura da alimentação de $298\,\mathrm{K}$.

$$Y_{A\,0} : R_{(T)} = G_{(T)} = (C_{p\,A} + \theta_I\,C_{p\,I})\,(T - T_0) =$$
$$= \left(C_{p\,A} + \frac{1 - Y_{A\,0}}{Y_{A\,0}}\,C_{p\,I}\right)(T - T_0) \implies$$
$$\implies Y_{A\,0} = \left(1 + \frac{\frac{G_{(T)}}{T - T_0} - C_{p\,A}}{C_{p\,I}}\right)^{-1} = \left(1 + \frac{\frac{22.5\,\mathrm{E}^3}{370 - 298} - 8}{18}\right)^{-1} \cong$$
$$\cong 0.056$$