Reactores Químicos I 2º Teste
Ano lectivo 2017/18

Apresente sempre todos os cálculos e construções gráficas.
Numere as folhas (xx/Total) e identifique-as com uma rubrica.

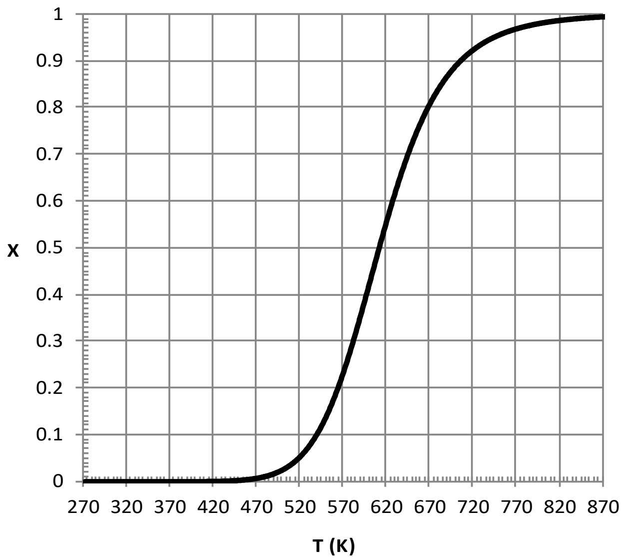
1) A reacção reversível A ⇄ B é conduzida, na fase gasosa, num reactor tubular adiabático. O reagente A (30%) e um inerte são alimentados, à temperatura de 773 K, a um caudal volumétrico de 100 L/min. A figura representa a variação da conversão de equilíbrio com a temperatura.

   a) Determine, usando o gráfico, o valor do calor de reacção.

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

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

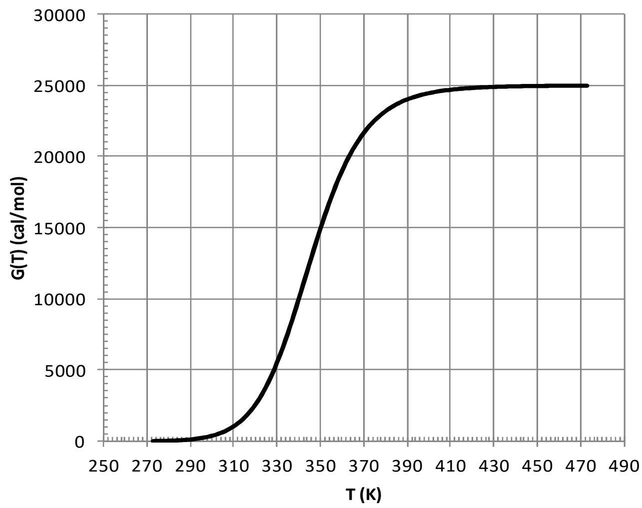
   Dados: $Cp_A = Cp_B = 10$ cal/mol K; $Cp_I = 12$ cal/mol K; Constante cinética da reacção directa: k(773 K) = 8.57 min^{-1}; K_e(773K) = 30; energia de activação: E = 25 kcal/mol; R = 1,987 cal mol^{-1} K^{-1}. ΔH_R = 20 kcal/mol.



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

   a) O valor da temperatura da corrente de saída, correspondente a uma conversão de 90%.
   b) O valor da temperatura da alimentação, nas condições da alínea a).
   c) Os valores das temperaturas de ignição e extinção.
   d) A composição da alimentação, nas condições da alínea a), para uma temperatura da alimentação de 298 K.

   Dados: ΔH_R = -25kcal/mol; $Cp_A = Cp_B$ =8 cal/mol K; Cp_I =18 cal/mol K; R = 1,987 cal mol^{-1} K^{-1}.



3) Num reactor de 1 m^3 introduz-se um traçador por impulso, a um caudal volumétrico de 5 L/min. Na tabela mostram-se os valores de concentração do traçador em função do tempo, à saída do reactor. O reactor tem um comportamento não ideal, o qual se deve apenas à existência de volumes mortos.

t (min)	0	20	40	60	80	100	120
C (mol/L)	0.02778	0.01594	0.00914	0.00525	0.00301	0.00173	0.00099

   a) Mostre que a distribuição de temços de residência é dada por: $E(t) = \frac{1}{\alpha\tau} e^{-\frac{t}{\alpha\tau}}$.

   b) Determine a fracção de volume activo.

   c) Determine a quantidade de traçador introduzida.

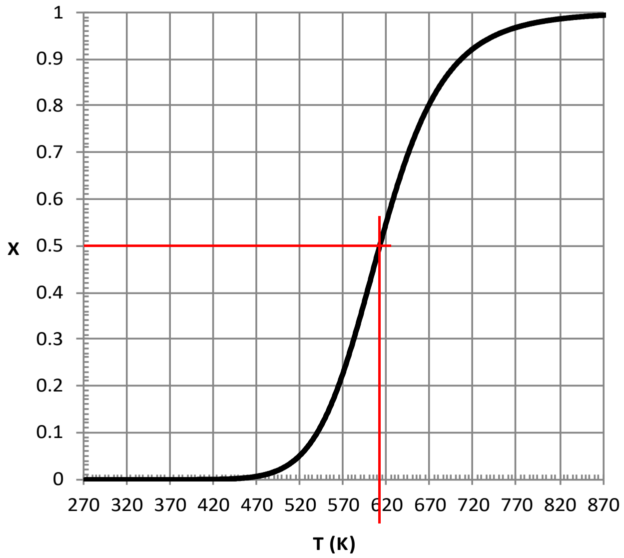
Transformadas de Laplace:

f(s)	*F(t)*
$\frac{1}{s-a}$	$e^{a \cdot t}$

Resolução

Prob 1a

Escolhendo um ponto do gráfico:



$$T = 613\,K \qquad X_e = 0.5$$

$$K_e(T) = \frac{C_{Be}}{C_{Ae}} = \frac{\frac{F_{Be}}{v}}{\frac{F_{Ae}}{v}} = \frac{F_{A0}X_e(T)}{F_{A0}\big(1 - X_e(T)\big)} = \frac{X_e(T)}{1 - X_e(T)} = \frac{0.5}{1 - 0.5} = 1$$

$$K_e(T) = K_e(T_R)e^{-\frac{\Delta H_R}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)}$$

$$\Delta H_R = \frac{Rln\frac{K_e(T_R)}{K_e(T)}}{\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R}\right)} = \frac{1.987 \times ln30}{\left(\frac{1}{613} - \frac{1}{773}\right)} = 20015\ cal/mol$$

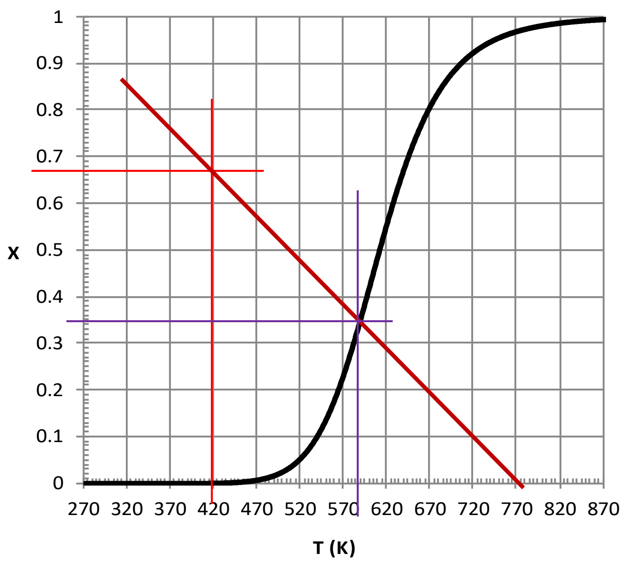
Prob 1b

Balanço de energia:

$$X = \frac{\left(C_{pA} + \theta_I C_{pI}\right)(T - T_0)}{-\Delta H_R} = \frac{\left(10 + \frac{0.7}{0.3} \times 12\right)(T - 773)}{-20015}$$

A conversão e a temperatura de equilíbrio obtêm-se resolvendo em simultâneo as equações de equilíbrio e do balanço de energia. Graficamente, traçamos os gráficos das duas funções e determinamos a intersecção.

Para o balanço de energia precisamos de mais um ponto:



$$T_e = 590\ K, X_e = 0.345$$

Prob 1c

Balanço de energia:

$$X = \frac{\left(C_{pA} + \theta_I C_{pI}\right)(T - T_0)}{-\Delta H_R}$$

$$T = \frac{-20015\ X}{\left(10 + \frac{0.7}{0.3} \times 12\right)} + 773$$

Lei cinética:

$$-r_A = k\left(C_A - \frac{C_B}{K_e}\right) = k\left(\frac{F_A}{v} - \frac{\frac{F_B}{v}}{K_e}\right) = k\left(\frac{F_{A0}(1-X)}{v_0\frac{T}{T_0}} - \frac{\frac{F_{A0}X}{v_0\frac{T}{T_0}}}{K_e}\right)$$

$$-r_A = kC_{A0}\frac{T_0}{T}\left(1 - X - \frac{X}{K_e}\right)$$

Balanço molar:

$$V = F_{A0}\int_0^X \frac{dX}{-r_A}$$

Equação condensada:

$$X = 0.95\,X_e = 0.95 \times 0.345 = 0.328$$

$$V = \int_0^X \frac{v_0}{k\frac{T_0}{T}\left(1 - X - \frac{X}{K_e}\right)}dX = \int_0^{0.328} \frac{100}{k\frac{773}{T}\left(1 - X - \frac{X}{K_e}\right)}dX$$

$$f(X) = \frac{100}{k\frac{773}{T}\left(1 - X - \frac{X}{K_e}\right)}$$

Lei de Arrhenius:

$$k(T) = 8.57\,e^{-\frac{25000}{1.987}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{773}\right)}$$

Lei de van't Hoff

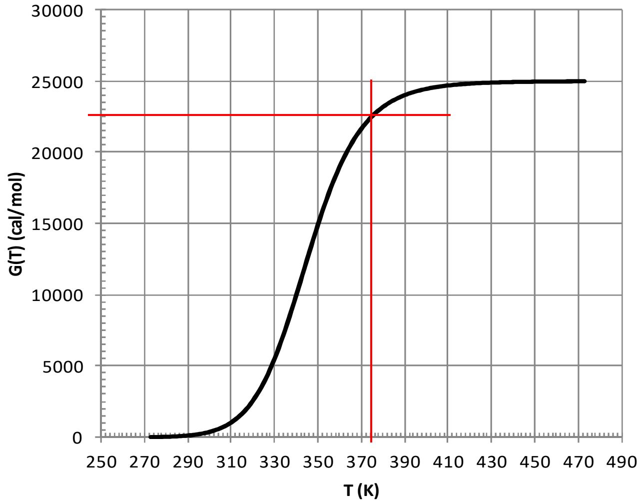
$$K_e(T) = 20\,e^{\frac{-20015}{1.987}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{773}\right)}$$

X	**T**	**k**	**Ke**	**f(X)**
0	**773**	**8.57**	**30**	**11.67**
0.164	**686.8**	**1.11**	**5.846**	**99.07**
0.328	**600.5**	**0.08**	**0.712**	**4586**

$$V = \frac{0.164}{3} \times (11.67 + 4 \times 99.07 + 4586) = 272.8\,L$$

Prob 2a

$$G(T) = -\Delta H_R \, X = 25000 \times 0.9 = 22500 \; cal/mol$$



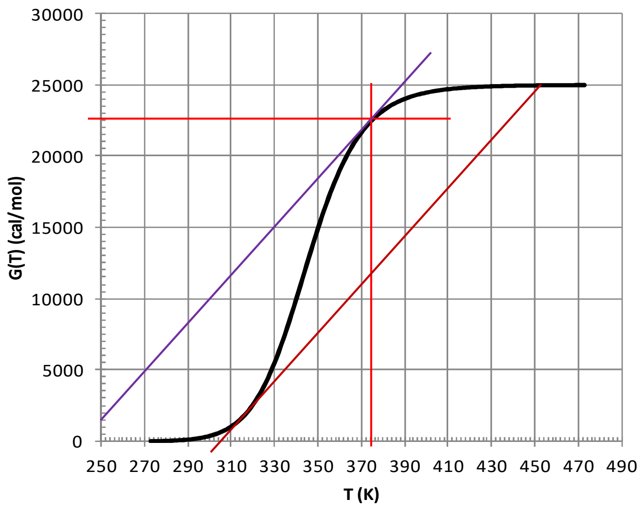
$$T = 374 \; K$$

Prob 2c

$$R(T) = \left(C_{pA} + \theta_I C_{pI}\right)T - \left(C_{pA} + \theta_I C_{pI}\right)T_0$$

$$T_0 = \frac{\left(C_{pA} + \theta_I C_{pI}\right)T - R(T)}{\left(C_{pA} + \theta_I C_{pI}\right)} = \frac{(8 + 9 \times 18) \times 374 - 22500}{(8 + 9 \times 18)} = 241.6 \; K$$

Prob 2d



$$R(T) = 170 \, T - 41072$$

$$T = 250 \; K \qquad R(T) = 1428$$

A recta R(T) é ela própria tangente ao ramo superior da curva G(T), pelo que a correspondente temperatura de alimentação é a temperatura de extinção:

$$T_{ext} = 241.6 \; K$$

A temperatura de ignição é a temperatura de alimentação correspondente a uma nova recta R(T), com o mesmo declive, mas tangente ao ramo inferior da curva G(T):

$$T_{ign} = 306\ K$$

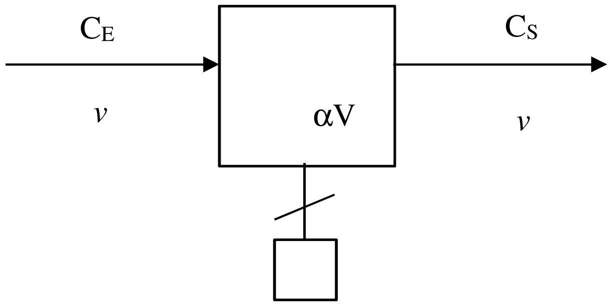
Prob 2e

$$R(T) = \left(C_{pA} + \theta_I C_{pI}\right)(T - T_0)$$

$$\theta_I = \frac{R(T) - C_{pA}(T - T_0)}{C_{pI}(T - T_0)} \qquad \therefore \frac{1 - y_{A0}}{y_{A0}} = \frac{R(T) - C_{pA}(T - T_0)}{C_{pI}(T - T_0)}$$

$$\therefore y_{A0} = \frac{C_{pI}(T - T_0)}{R(T) + \left(C_{pI} - C_{pA}\right)(T - T_0)} = \frac{18 \times (374 - 298)}{22500 + (18 - 8)(374 - 298)} = 0.059$$

Prob 3a



$$vC_E = vC_S + \alpha V \frac{dC_S}{dt} \qquad \therefore C_E = C_S + \alpha\tau \frac{dC_S}{dt}$$

$$\overline{C_E} = \overline{C_S} + \alpha\tau s \overline{C_S} \qquad \therefore \overline{C_E} = (1 + \alpha\tau s)\overline{C_S}$$

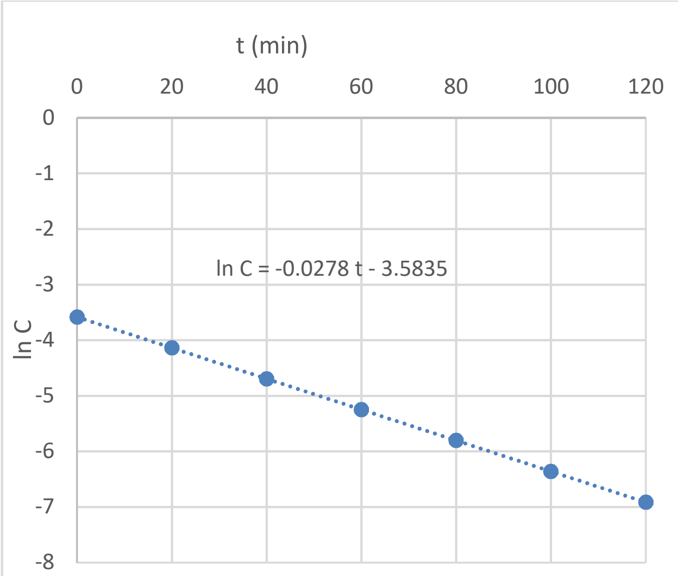
$$\therefore g(s) = \frac{\overline{C_S}}{\overline{C_E}} = \frac{1}{(1 + \alpha\tau s)} = \frac{1}{\alpha\tau} \frac{1}{\left(s + \frac{1}{\alpha\tau}\right)}$$

$$\therefore E(t) = \frac{1}{\alpha\tau} e^{-\frac{t}{\alpha\tau}}$$

Prob 3b

$$C(t) = \frac{N}{v} E(t) = \frac{N}{v} \frac{1}{\alpha\tau} e^{-\frac{t}{\alpha\tau}}$$

$$\therefore \ln C(t) = \frac{N}{v} E(t) = \ln \frac{N}{v} \frac{1}{\alpha\tau} - \frac{1}{\alpha\tau} t$$



$$\frac{1}{\alpha\tau} = 0.0278 \qquad \therefore \alpha = \frac{1}{0.0278\tau} = \frac{1}{0.0278\,\frac{V}{v}} = \frac{v}{0.0278\,V} = \frac{5}{0.0278 \times 1000} = 0.18$$

Prob 3c

$$\ln\frac{N}{v\alpha\tau} = -3.5835 \qquad \therefore \frac{N}{v\alpha\tau} = e^{-3.5835} = 0.02778$$

$$\therefore N = 0.02778 v\alpha\tau = 0.02778 \times 5 \times 0.18 \times 200 = 5\,mol$$