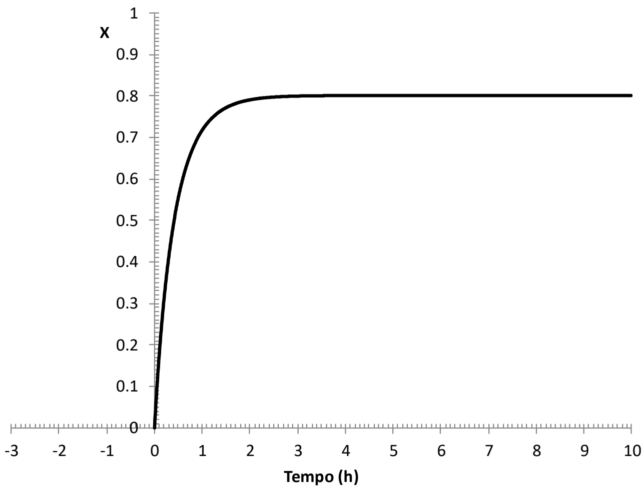
Reactores Químicos I 1º Teste
Ano lectivo 2017/18

Apresente sempre todos os cálculos e construções gráficas.

1) A figura mostra a curva cinética obtida em reactor batch para a reacção elementar, em fase líquida, A+B ⇄ C+D. A reacção é conduzida em reactores batch com o volume de 5 m^3 cada, que são carregados com uma solução 1 M em A. Determine, mostrando todos os cálculos e também usando o gráfico:



a) A expressão da lei cinética.
b) O valor da conversão de equilíbrio.
c) O valor da constante de equilíbrio.
d) Os valores do tempo óptimo e da conversão óptima.
e) O valor da constante cinética da reacção directa.
f) O número de reactores necessário a uma produção anual de C de 1000 TON, supondo que a fábrica funciona 24 h por dia e 330 dias por ano, supondo que se pretende uma conversão correspondente a 99% da conversão de equilíbrio.

Dados: Tempos mortos: 1,5 h; peso molecular de C: 130; C_{A0} = 1M; C_{B0} = 2M.

2) A reacção elementar, em fase gasosa, 2A → 3B + C é conduzida à temperatura de 473 K e à pressão de 5 atm num reactor PFR (k = 0,4 L mol^{-1} s^{-1}). Assumindo que o reagente A é alimentado puro ao reactor, a um caudal volumétrico de 15 L/s e que se obtém uma conversão de 99%, determine:

a) O volume do reactor.
b) O valor do caudal volumétrico à saída do reactor.
c) O valor do caudal molar do produto B, à saída do reactor.
d) Caso a reacção seja conduzida num reactor batch, a volume constante, nas mesmas condições de temperatura e pressão inicial, determine o valor da pressão à conversão de 99%.

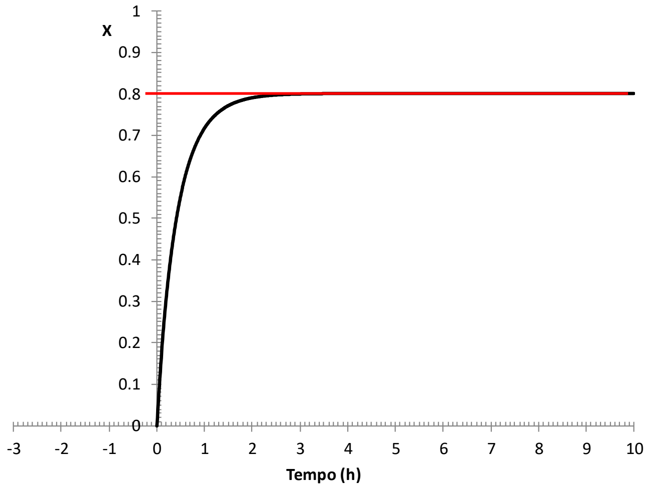
$$P\left(\frac{1+\varepsilon X}{1-X}\right)^2 = \frac{(1+\varepsilon)^2}{1-X} - 2\varepsilon(1+\varepsilon)ln\frac{1}{1-X} + \varepsilon^2 X$$

Resolução

Prob 1a

$$r = k\left(C_A\, C_B - \frac{C_C\, C_D}{K_e}\right)$$

Prob 1b



O equilíbrio é atingido quando valor da conversão fica constante:

$$X_e = 0{,}8$$

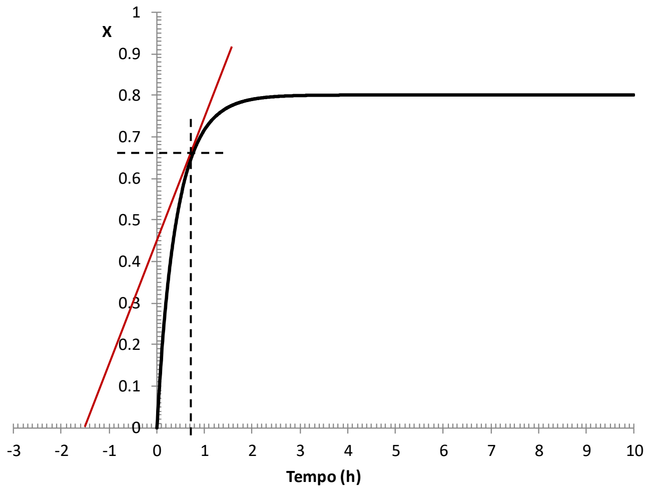
Prob 1c

$$r_e = k\left(C_{Ae}\, C_{Be} - \frac{C_{Ce}\, C_{De}}{K_e}\right) = 0 \qquad \therefore\ C_{Ae}\, C_{Be} - \frac{C_{Ce}\, C_{De}}{K_e} = 0$$

$$\therefore K_e = \frac{C_{Ce}\, C_{De}}{C_{Ae}\, C_{Be}} = \frac{{C_{A0}}^2\ {X_e}^2}{{C_{A0}}^2\,(1 - X_e)\,(\theta_B - X_e)} = \frac{{X_e}^2}{(1 - X_e)\,(\theta_B - X_e)}$$

$$\therefore K_e = \frac{{X_e}^2}{(1 - X_e)\,(\theta_B - X_e)} = \frac{0{,}8^2}{(1 - 0{,}8)\,(2 - 0{,}8)} = 2{,}667$$

Prob 1d



$$t_{opt} = 0{,}75\ h \qquad X_{opt} = 0{,}66$$

Prob 1e

Balanço molar:

$$r_A\, V = \frac{dN_A}{dt} = -N_{A0}\, \frac{dX}{dt} \qquad \therefore r = -r_A = C_{A0}\, \frac{dX}{dt}$$

Equação condensada:

$$k\left(C_A\, C_B - \frac{C_C\, C_D}{K_e}\right) = C_{A0}\, \frac{dX}{dt}$$

$$\therefore\ k\, {C_{A0}}^2 \left((1-X)\,(\theta_B - X) - \frac{X^2}{K_e}\right) = C_{A0}\, \frac{dX}{dt}$$

$$\therefore\ \frac{dX}{dt} = k\, C_{A0}\left((1-X)\,(\theta_B - X) - \frac{X^2}{K_e}\right) \qquad \therefore\ k = \frac{\frac{dX}{dt}}{C_{A0}\left((1-X)\,(\theta_B - X) - \frac{X^2}{K_e}\right)}$$

Usando o gráfico (alínea d):

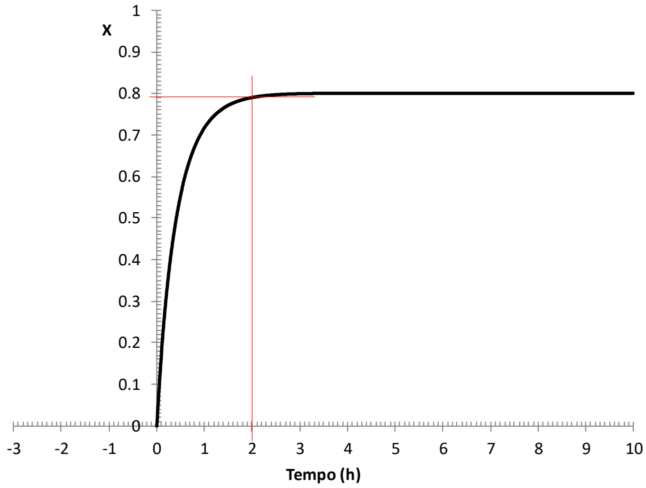
$$\frac{dX}{dt} = \frac{0{,}66 - 0}{0{,}75 - (-1{,}5)} = 0{,}2933$$

$$k = \frac{0,2933}{1 \times \left((1-0,66)\,(2\ -0,66) - \frac{0,66^2}{2,667}\right)} = 1,004\ L/(mol.h)$$

Prob 1f

Tempo de reacção:

$$X = 0,99\ \times 0,8 = 0,792$$



Do gráfico:

$$t = \ 2\ h$$

Tempo de 1 operação:

$$t_{batch} = \ t + \ t_d = 2 + 1,5 = 3,5\ h$$

Número de operações por ano:

$$batch_{ano} = \ \frac{24 \times 330}{3,5} = 2262$$

Produção por operação:

$$N_C = \frac{1 \times 10^9}{130 \times 2262} = 3400,7\ mol$$

Número de moles de A necessários:

$$N_C = N_{A0}\, X \qquad \therefore\ N_{A0} = \frac{3400{,}7}{0{,}792} = 4293{,}8$$

Volume da mistura reaccional:

$$C_{A0} = \frac{N_{A0}}{V} \qquad \therefore V = \frac{N_{A0}}{C_{A0}} = \frac{4293{,}8}{1} = 4293{,}8\ L$$

Volume de reactor necessário:

$$V_R = 1{,}15\ \times V = 1{,}15\ \times 4293{,}8 = 4937{,}8\ L$$

Portanto, basta 1 reactor de 5 m^3.

Prob 2a

Lei cinética:

$$r = k\, {C_A}^2 = k\left(\frac{F_A}{v}\right)^2 = k\left(\frac{F_{A0}\ (1 - X)}{v_0\ (1 + \varepsilon X)}\right)^2 = k\, {C_{A0}}^2\left(\frac{1 - X}{1 + \varepsilon X}\right)^2$$

Equação estequiométrica:

$$A \rightarrow \frac{3}{2}B + \frac{1}{2}C$$

$$\varepsilon = y_{A0}\,\delta = 1 \times \left(-1 + \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\right) = 1$$

$$C_{A0} = \frac{P_{A0}}{R\,T} = \frac{y_{A0}\,P}{R\,T} = \frac{1 \times 5}{0{,}082 \times 473} = 0{,}129\ M$$

Balanço molar:

$$dV = F_{A0}\ \frac{dX}{(-r_A)} \qquad \therefore V = F_{A0}\int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}$$

Equação condensada:

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{k\, C_{A0}{}^2 \left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)^2} = \frac{v_0}{C_{A0}\, k} \int_0^X \left(\frac{1+\varepsilon X}{1-X}\right)^2 dX$$

$$V = \frac{15}{0{,}129 \times 0{,}4} \int_0^X \left(\frac{1+X}{1-X}\right)^2 dX = \frac{15}{0{,}129 \times 0{,}4} \left(\frac{4}{1-X} - 4 \ln \frac{1}{1-X} + X - 4\right)$$

$$V = \frac{15}{0{,}129 \times 0{,}4} \left(\frac{4}{1-0{,}99} - 4 \ln \frac{1}{1-0{,}99} + 0{,}99 - 4\right) = 110049\ L$$

Prob 2b

$$v = v_0\,(1+\varepsilon X) = 15 \times (1 + 0{,}99) = 29{,}85\ L/s$$

Prob 2c

$$F_B = \frac{3}{2} F_{A0}\ X = \frac{3}{2}\ C_{A0}\ v_0\, X = \frac{3}{2} \times 0{,}129 \times 15 \times 0{,}99 = 2{,}873\ mol/s$$

Prob 2d

$$P = P_0\,(1+\varepsilon X) = 5 \times (1 + 0{,}99) = 9{,}95\ atm$$