Reactores Químicos I 1º Teste

Ano lectivo 2016/17

Apresente sempre todos os cálculos e construções gráficas.

1) A reacção reversível $A \rightleftarrows B$ é conduzida numa bateria de dois reactores CSTR iguais. O reagente A é alimentado à bateria de reactores numa concentração de 1M, a um caudal volumétrico de 10 L/min. As reacções directa e inversa são elementares e os valores da constante cinética da reacção directa e da conversão de equilíbrio são respectivamente 0.05 min^{-1} e 96%.

   a) Deduza a expressão da lei cinética.

   b) Para cada um dos reactores deduza as expressões que relacionam o volume do reactor com a conversão.

   c) Determine o valor da constante de equilíbrio.

   d) Sabendo que a conversão à saída do 2º reactor corresponde a 90% da conversão de equilíbrio, determine a conversão à saída do 1º reactor.

   e) Determine o volume dos reactores.

2) A reacção elementar, em fase gasosa, $2A \rightarrow 3B + C$ é conduzida à temperatura de 493 K e à pressão de 7 atm num reactor PFR ($k = 0.45\ L\ mol^{-1}\ s^{-1}$). 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 90%, determine:

   a) O valor da velocidade de reacção à entrada do reactor.

   b) O volume do reactor.

   c) O valor do caudal volumétrico à saída do reactor.

   d) O valor do caudal molar do produto B, à saída do reactor.

   e) 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 90%.

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

Resolução:

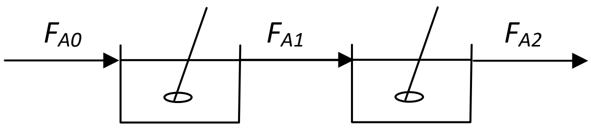
Prob 1a

$$A \rightleftarrows B$$

$$r_A = r_{Ad} + r_{Ai} = \nu_{Ad} r_d + \nu_{Ai} r_i = -r_d + r_i = -k_d C_A + k_i C_B$$

$$r_A = -k_d C_A + k_i C_B = -k_d \left(C_A - \frac{C_B}{\frac{k_d}{k_i}} \right) = -k_d \left(C_A - \frac{C_B}{K_e} \right)$$

Prob 1b



Balanço ao reactor 1:

$$F_{A0} - F_{A1} + r_{A1} V = 0$$
$$F_{A0} - F_{A0}(1 - X_1) + r_{A1} V = 0$$
$$F_{A0} X_1 + r_{A1} V = 0$$

$$F_{A0} X_1 - k_d \left(C_{A1} - \frac{C_{B1}}{K_e} \right) V = 0$$
$$F_{A0} X_1 - k_d \left(C_{A0}(1 - X_1) - \frac{C_{A0} X_1}{K_e} \right) V = 0$$
$$F_{A0} X_1 = k_d C_{A0} \left(1 - X_1 - \frac{X_1}{K_e} \right) V$$

$$V = \frac{F_{A0} X_1}{k_d C_{A0} \left(1 - X_1 - \frac{X_1}{K_e} \right)} = \frac{C_{A0} v_0 X_1}{k_d C_{A0} \left(1 - X_1 - \frac{X_1}{K_e} \right)} = \frac{v_0 X_1}{k_d \left(1 - X_1 - \frac{X_1}{K_e} \right)}$$

Balanço ao reactor 2:

$$F_{A1} - F_{A2} + r_{A2} V = 0$$

$$F_{A0}(1 - X_1) - F_{A0}(1 - X_2) + r_{A2} V = 0$$

$$F_{A0}(X_2 - X_1) + r_{A2} V = 0$$

$$F_{A0}(X_2 - X_1) - k_d C_{A0}\left(1 - X_2 - \frac{X_2}{K_e}\right)V = 0$$

$$V = \frac{v_0(X_2 - X_1)}{k_d\left(1 - X_2 - \frac{X_2}{K_e}\right)}$$

Prob 1c

$$K_e = \frac{C_{Be}}{C_{Ae}} = \frac{C_{A0}X_e}{C_{A0}(1 - X_e)} = \frac{X_e}{1 - X_e} = \frac{0.96}{1 - 0.96} = 24$$

Prob 1d

$$X_2 = 0.9X_e = 0.9 \times 0.96 = 21.6$$

$$V = \frac{v_0 X_1}{k_d\left(1 - X_1 - \frac{X_1}{K_e}\right)} = \frac{v_0(X_2 - X_1)}{k_d\left(1 - X_2 - \frac{X_2}{K_e}\right)}$$

$$\frac{X_1}{1 - X_1 - \frac{X_1}{K_e}} = \frac{X_2 - X_1}{1 - X_2 - \frac{X_2}{K_e}}$$

$$\frac{X_1}{1 - X_1 - \frac{X_1}{24}} = \frac{0.864 - X_1}{1 - 0.864 - \frac{0.864}{24}}$$

$$2.4X_1 = (24 - 25X_1)(0.864 - X_1)$$

$$2.4X_1 = 24 \times 0.864 - 24X_1 - 25 \times 0.864X_1 + 25{X_1}^2$$

$$25{X_1}^2 - 48X_1 + 20.736 = 0$$

$$X_1 = 0.656$$

Prob 1e

$$V = \frac{v_0 X_1}{k_d\left(1 - X_1 - \frac{X_1}{K_e}\right)} = \frac{10 \times 0.656}{0.05 \times \left(1 - 0.656 - \frac{0.656}{24}\right)} = 414\ L$$

Prob 2a

Equação química:

$$2A \rightarrow 3B + C$$

Equação estequiométrica:

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

$$-r_A = kC_A{}^2 = k\frac{F_A{}^2}{v^2} = \frac{kC_{A0}{}^2(1-X)^2}{(1+\varepsilon X)^2\left(\frac{T}{T_0}\right)^2\left(\frac{P_0}{P}\right)^2} = \frac{kC_{A0}{}^2(1-X)^2}{(1+\varepsilon X)^2}$$

À entrada do reactor X=0.

$$-r_{A0} = kC_{A0}{}^2 = k\left(\frac{P_{A0}}{RT}\right)^2 = k\left(\frac{y_{A0}P_0}{RT}\right)^2 = 0.45 \times \left(\frac{7}{0.082 \times 493}\right)^2 = 0.0135\ \frac{mol}{Ls}$$

$$C_{A0} = \frac{7}{0.082 \times 493} = 0.173\ \frac{mol}{L}$$

Prob 2b

Balanço molar:

$$dV = F_{A0}\frac{dX}{-r_A} = C_{A0}v_0\frac{dX}{-r_A}$$

Equação condensada:

$$dV = F_{A0}\frac{dX}{-r_A} = v_0\frac{dX}{\frac{kC_{A0}(1-X)^2}{(1+\varepsilon X)^2}} = \frac{v_0}{kC_{A0}}\frac{(1+\varepsilon X)^2}{(1-X)^2}dX$$

$$V = \int_0^V dV = \frac{v_0}{kC_{A0}}\int_0^X \frac{(1+\varepsilon X)^2}{(1-X)^2}dX$$

$$V = \frac{v_0}{kC_{A0}}\left[\frac{(1+\varepsilon)^2}{1-X} - 2\varepsilon(1+\varepsilon)ln\frac{1}{1-X} + \varepsilon^2 X\right]_0^X$$

$$V = \frac{v_0}{kC_{A0}}\left[\left(\frac{(1+\varepsilon)^2}{1-X} - 2\varepsilon(1+\varepsilon)ln\frac{1}{1-X} + \varepsilon^2 X\right) - (1+\varepsilon)^2\right]$$

$$\varepsilon = y_{A0}\delta = -\frac{2}{2} + \frac{3}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

$$V = \frac{15}{0.45 \times 0.173}\left[\left(\frac{(1+1)^2}{1-0.9} - 2 \times 1 \times (1+1)ln\frac{1}{1-0.9} + 1^2 \times 0.9\right) - (1+1)^2\right]$$

$$V = 5335\ L \equiv 5.3\ m^3$$

Prob 2c

$$v = v_0(1+\varepsilon X) = 15 \times (1 + 1 \times 0.9) = 28.5\ \frac{L}{s}$$

Prob 2d

$$F_B = \frac{3}{2}F_{A0}X = \frac{3}{2}C_{A0}v_0X = \frac{3}{2} \times 0.173 \times 15 \times 0.9 = 3.5\ \frac{mol}{s}$$

Prob 2e

$$\frac{V}{V_0} = (1+\varepsilon X)\frac{T}{T_0}\frac{P_0}{P}$$

$$V = V_0, \quad T = T_0$$

$$1 = (1+\varepsilon X)\frac{P_0}{P} \quad \therefore\ P = P_0(1+\varepsilon X) = 7 \times (1 + 1 \times 0.9) = 13.3\ atm$$