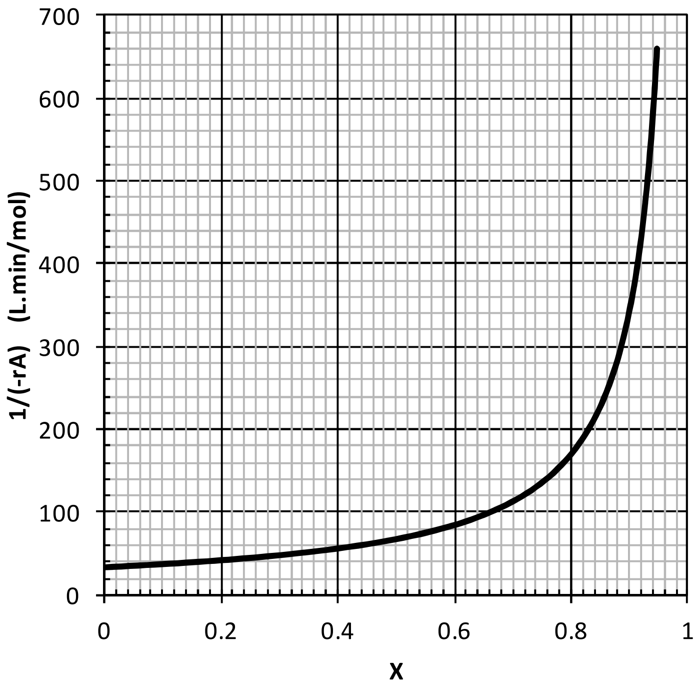
1) A figura mostra a curva do inverso da velocidade de reacção em função da conversãi, reacção elementar em fase líquida, $A+B \rightarrow C$, sendo A o reagente limitante. A reacção é conduzida num sistema de reactores contínuos, sendo A alimentado à concentação de 1 M, a um caudal volumétrico de 50 L/min. Determine, mostrando todos os cálculos e também usando o gráfico o volume total de reactor necessário a uma conversão de 92%, consistindo o sistema de reactores em::



a) Um único CSTR.

b) Um único PFR.

c) Uma associação PFR-CSTR, sendo a conversão intermédia de 40%..

d) Uma associação CSTR-PFR, sendo a conversão intermédia de 40%..

e) O número de sistemas 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.

Dados: Peso molecular de C: 120.

2) A reacção elementar $A \rightleftarrows B$, em fase líquida, é conduzida num sistema de dois reactores CSTR iguais, associados em série. O reagente A, na concentração de 1 M, é alimentado a um caudal volumétrico de 50 L/min. Sabendo-se que a constante cinética e a constante de equilíbrio, à temperatura da reacção, são respectivamente é $k = 0{,}1\ min^{-1}$ e Ke=10, e que se pretende obter uma conversão final de 99% da conversão de equilíbrio, determine mostrando todos os cálculos:

a) O valor da conversão de equilíbrio.

b) O valor da conversão intermédia.

c) O volume da cada reactor.

3) A reacção elementar $A \rightarrow 2B$ é conduzida, em fase gasosa, num reactor PFR, sendo A alimentado à temperatura de 300º C e à pressão de 1 atm, juntamente com 40% de um inerte, a um caudal volumétrico de 100 L/min ($k = 0{,}1\ min^{-1}$). Apresentando todos os cálculos efectuados, determine:

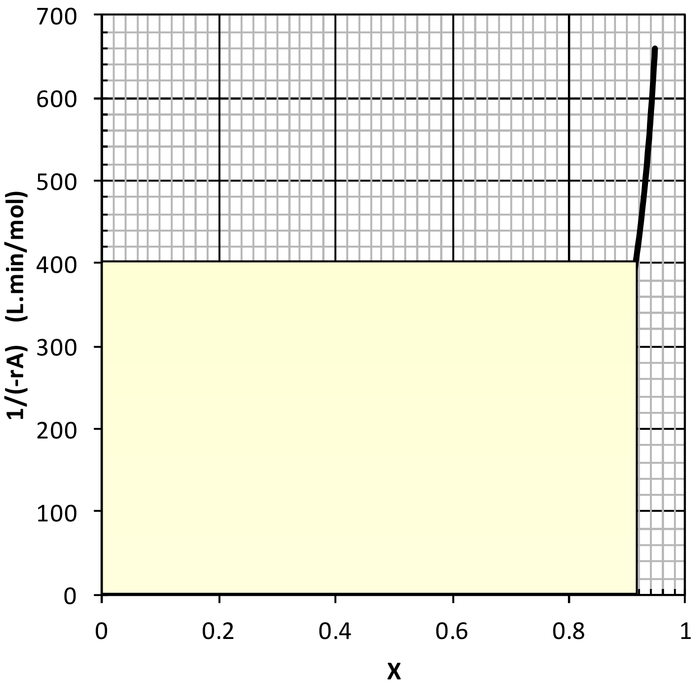
a) O volume de reactor necessário a uma conversão de 99%.

b) O valor do caudal volumétrico à saída do reactor, para a mesma conversão de 99%

$$\int \frac{1 + a\,X}{1 - X} dX = -a\,X + (1 + a) ln \frac{1}{1 - X}$$

Resolução

Prob 1a

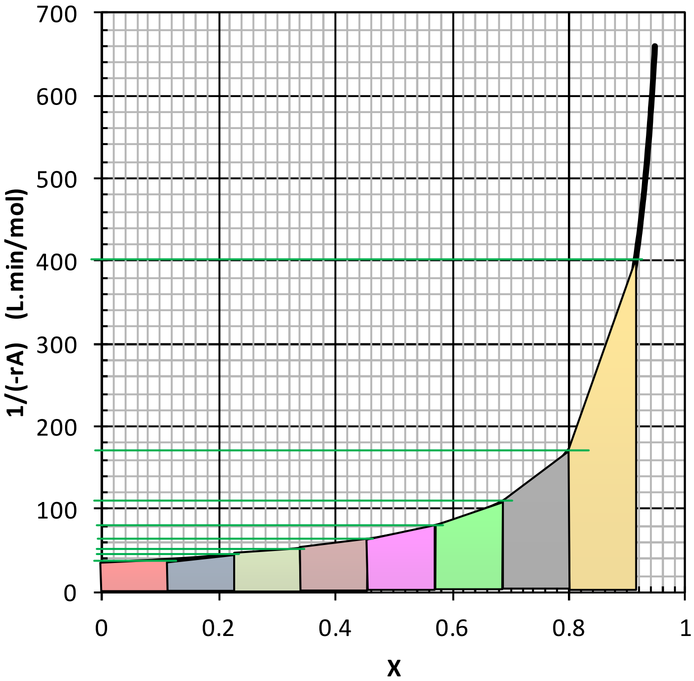


$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{1}{-r_A} \cdot X = 400 \times 0.92 = 368\ L\ min/mol$$

$$F_{A0} = C_{A0}\ v_0 = 1 \times 50 = 50\ mol/min$$

$$V = 368 \times F_{A0} = 368 \times 50 = 18400\ L \equiv 18{,}4\ m^3$$

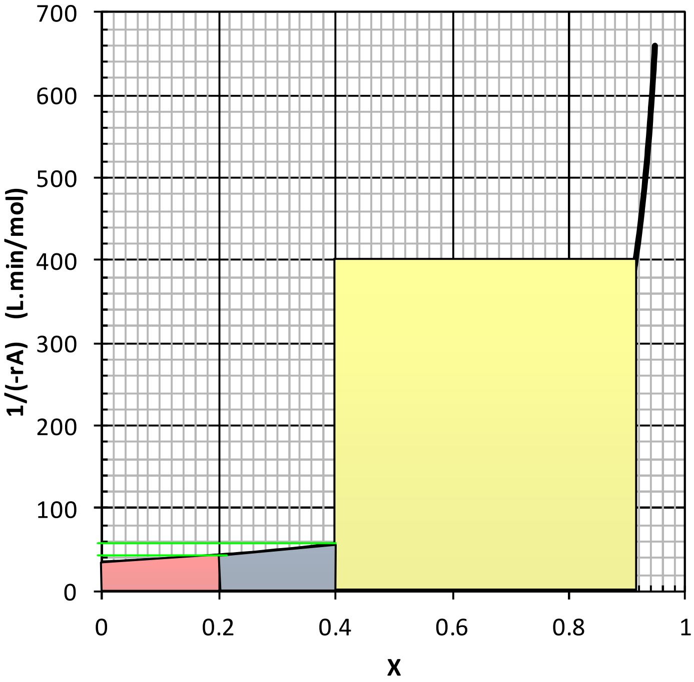
Prob 1b



$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^X \frac{1}{-r_A} \cdot dX$$
$$= \left(\frac{35+38}{2} + \frac{38+42}{2} + \frac{42+50}{2} + \frac{50+62}{2} + \frac{62+80}{2} + \frac{80+110}{2} + \frac{110+170}{2} + \frac{170+400}{2}\right) \times 0.115$$
$$= (36.5 + 40 + 46 + 56 + 71 + 95 + 140 + 285) \times 0.115$$
$$= 88.493\ L\ min/mol$$

$$V = 88.493 \times F_{A0} = 88.493 \times 50 = 4425\ L \equiv 4{,}425\ m^3$$

Prob 1c



$$\frac{V_{PFR}}{F_{A0}} = \int_0^{X_1} \frac{1}{-r_A} \cdot dX = \int_0^{0,4} \frac{1}{-r_A} \cdot dX = \left(\frac{35+40}{2} + \frac{40+59}{2}\right) \times 0.2$$

$$= (37.5 + 49.5) \times 0.2 = 17,4\ L\ min/mol$$

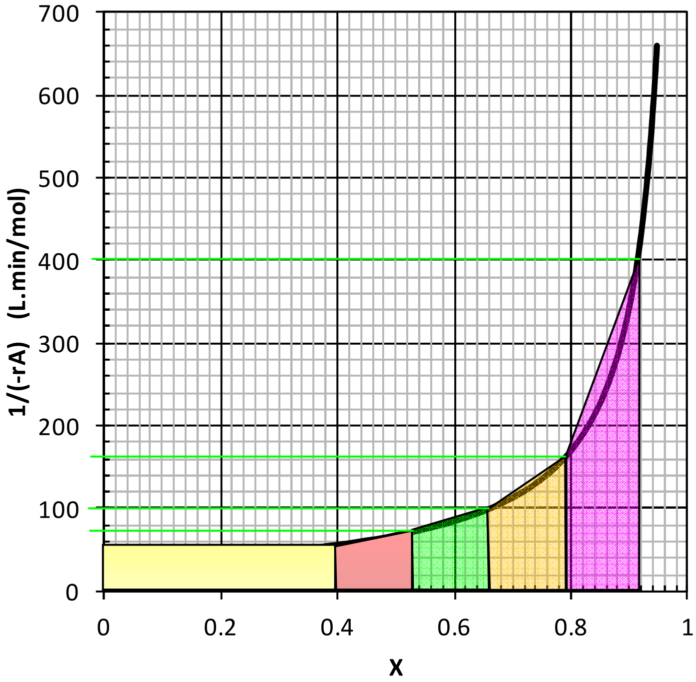
$$V_{PFR} = 17,4\ F_{A0} = 17,4 \times 50 = 870\ L$$

$$\frac{V_{CSTR}}{F_{A0}} = (X_2 - X_1)\frac{1}{-r_{A2}} = (0,92 - 0,4) \times 400 = 208\ L\ min/mol$$

$$V_{CSTR} = 208\ F_{A0} = 208 \times 50 = 10400\ L \equiv 10,4\ m^3$$

$$V_{Total} = V_{PFR} + V_{CSTR} = 870 + 10400 = 11270\ L \equiv 11,27\ m^3$$

Prob 1d



$$\frac{V_{CSTR}}{F_{A0}} = X_1 \frac{1}{-r_{A1}} = 0.4 \times 55 = 22\ L\ min/mol$$

$$V_{CSTR} = 22\ F_{A0} = 22 \times 50 = 1100\ L \equiv 1{,}1\ m^3$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_{X_1}^{X_2} \frac{1}{-r_A} \cdot dX = \int_{0{,}4}^{0{,}92} \frac{1}{-r_A} \cdot dX$$

$$= \left(\frac{55+73}{2} + \frac{73+100}{2} + \frac{100+160}{2} + \frac{160+400}{2}\right) \times 0{,}13$$

$$= (64 + 86.5 + 130 + 280) \times 0{,}13 = 72{,}865\ L\ min/mol$$

$$V_{PFR} = 72{,}865\ F_{A0} = 72{,}865 \times 50 = 3643\ L \equiv 3{,}643\ m^3$$

$$V_{Total} = V_{CSTR} + V_{PFR} = 1{,}1 + 3{,}643 = 4{,}7\ m^3$$

Prob 1e

Produção total:

$$F_{Ct} = \frac{1 \times 10^9}{120 \times 330 \times 24 \times 60} = 17{,}536\, mol/min$$

Produção por sistema de reactores:

$$F_{Csist} = F_{A0}\, X = 50 \times 0.92 = 46\, mol/min$$

Um único sistema de reactores é suficiente para garantir e ultrapassar a produção pretendida. Na realidade a produção anual será de:

$$46 \times 60 \times 24 \times 330 \times 120 = 2623104000\, g \equiv 2623\, TON$$

Prob 2a

$$Ke = \frac{C_{Be}}{C_{Ae}} = \frac{C_{A0} X_e}{C_{A0}(1 - X_e)} = \frac{X_e}{1 - X_e}$$

$$X_e = \frac{Ke}{1 + Ke} = \frac{10}{11} = 0{,}9091$$

Prob 2b

Balanço molar ao 1º reactor:

$$\tau = \frac{C_{A0} X_1}{-r_{A1}}$$

Balanço molar ao 2º reactor:

$$\tau = \frac{C_{A0}(X_2 - X_1)}{-r_{A2}}$$

Como os reactores são iguais:

$$\frac{C_{A0} X_1}{-r_{A1}} = \frac{C_{A0}(X_2 - X_1)}{-r_{A2}}$$

Lei cinética:

$$-r_A = k\left(C_A - \frac{C_B}{Ke}\right) = k\left(C_{A0}(1-X) - \frac{C_{A0}\,X}{Ke}\right) = k\,C_{A0}\,\left(1 - X - \frac{X}{Ke}\right)$$

Condensando a lei cinética com a equação de balanço:

$$\frac{C_{A0}X_1}{k\,C_{A0}\,\left(1 - X_1 - \frac{X_1}{Ke}\right)} = \frac{C_{A0}(X_2 - X_1)}{k\,C_{A0}\,\left(1 - X_2 - \frac{X_2}{Ke}\right)}$$

$$\frac{X_1}{\left(1 - X_1 - \frac{X_1}{Ke}\right)} = \frac{X_2 - X_1}{\left(1 - X_2 - \frac{X_2}{Ke}\right)}$$

$$X_2 = 0{,}99\,X_e = 0{,}99 \times 0{,}9091 = 0{,}9$$

$$\frac{X_1}{\left(1 - X_1 - \frac{X_1}{10}\right)} = \frac{0{,}9 - X_1}{\left(1 - 0{,}9 - \frac{0{,}9}{10}\right)}$$

$$\frac{X_1}{(1 - 1{,}1X_1)} = \frac{0{,}9 - X_1}{0{,}01}$$

$$0{,}01X_1 = (1 - 1{,}1X_1)(0{,}9 - X_1)$$
$$1{,}1{X_1}^2 - 2X_1 + 0{,}9 = 0$$

$$X_1 = \frac{2 \pm \sqrt{4 - 4 \times 1{,}1 \times 0{,}9}}{2 \times 1{,}1} = \frac{2 \pm 0.2}{2{,}2} = \begin{cases} \cancel{1} \\ 0{,}818 \end{cases}$$

Prob 2c

$$\tau = \frac{C_{A0}X_1}{-r_{A1}} = \frac{X_1}{k\,\left(1 - X_1 - \frac{X_1}{Ke}\right)} = \frac{0{,}818}{0{,}1 \times \left(1 - 0{,}818 - \frac{0{,}818}{10}\right)} = 81{,}637\,min$$
$$V = v_0\,\tau = 50 \times 81.637 = 4082\,L \equiv 4{,}08\,m^3$$

Prob 3a

Lei cinética:

$$-r_A = k\, C_A = k\, \frac{F_A}{v} = k\, \frac{F_{A0}\,(1-X)}{v_0\,(1+\varepsilon X)} = k\, \frac{C_{A0}\,(1-X)}{1+\varepsilon X}$$

$$\varepsilon = y_{A0}\,\delta = 0{,}6 \times (-1+2) = 0{,}6$$

Balanço molar:

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

Equação condensada:

$$dV = F_{A0}\frac{dX}{k\,\frac{C_{A0}\,(1-X)}{1+\varepsilon X}} = C_{A0}v_0\frac{1+\varepsilon X}{k\,C_{A0}\,(1-X)}dX$$

$$dV = \frac{v_0}{k}\frac{1+\varepsilon X}{1-X}dX$$

$$V = \int_0^V dV = \frac{v_0}{k}\int_0^X \frac{1+\varepsilon X}{1-X}dX$$

$$V = \frac{v_0}{k}\left(-\varepsilon X + (1+\varepsilon)\ln\frac{1}{1-X}\right)$$

$$V = \frac{100}{0{,}1}\left(-0{,}6\times 0{,}99 + (1+0{,}6)\ln\frac{1}{1-0{,}99}\right) = 6774\, L \equiv 6{,}8\, m^3$$

Prob 3b

$$v = v_0\,(1+\varepsilon X) = 100 \times\ (1+0{,}6\times 0{,}99) = 159{,}4\, L/min$$