

ERQ I – Teste 2023.2 Resolução

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

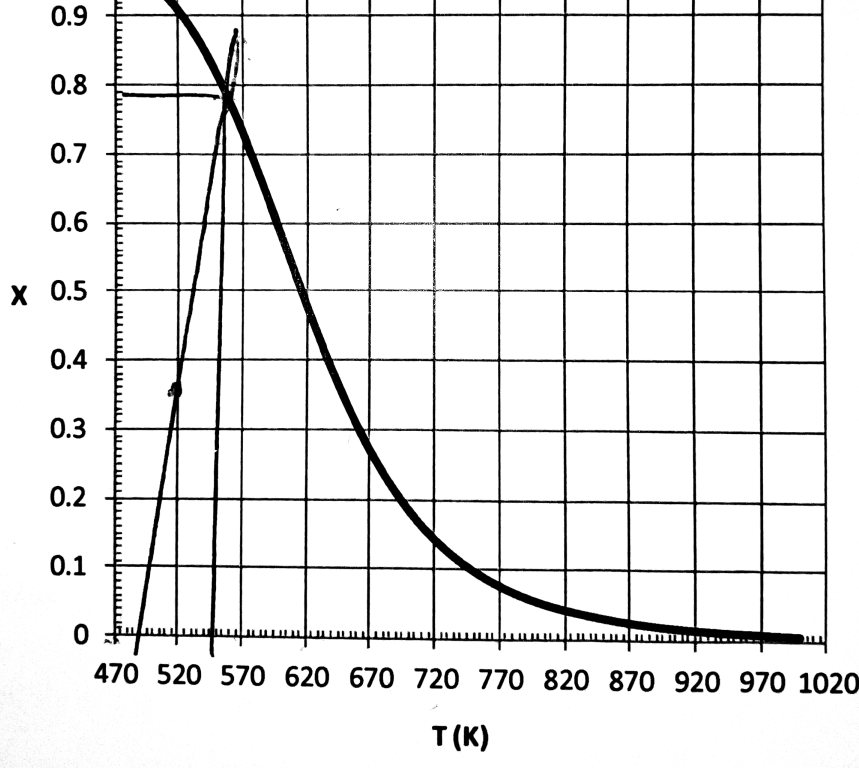
10 de dezembro de 2023

Conteúdo

Questão 1 2 Questão 2 3

Questão 1

- $A \rightleftharpoons B$
- fase gasosa
- Reator tubular adiabático
- A (10%)
- $T_0 = 200^\circ\text{C} = 473.15\text{ K}$
- $v_0 = 10\text{ dm}^3/\text{s} = 600\text{ L/min}$
- gráfico $X \times T$
- $C_{pA} = C_{pB} = 5\text{ cal/mol K}$
- $C_{pI} = 12\text{ cal/mol K}$
- $k_d(473\text{ K}) = 1.17\text{ min}^{-1}$
- $K_e(473\text{ K}) = 40$
- $Ea = 20\text{ kcal/mol}$
- $R = 1.987\text{ cal mol}^{-1}\text{ K}^{-1}$



Q1 a.

Endotermica/exotermica

Resposta

Exotérmica pois $X \propto T^{-1}$ ou seja diminui conforme a temperatura aumenta.

Q1 b.

Calor de reação

Resposta

$$\begin{aligned} \Delta H_R : K_{e(T)} &= K_{e(T_R)} \exp \left(-\frac{\Delta H_R}{R} (T^{-1} - T_R^{-1}) \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \Delta H_R &= \frac{-R}{(T^{-1} - T_R^{-1})} \ln \frac{K_{e(T)}}{K_{e(T_R)}}; \\ K_{e(T)} : K_{e(T)} &= \frac{p_{pB}}{p_{pA}} = \frac{C_{pB} R T}{C_{pA} R T} = \frac{C_{pA_0} X}{C_{pA_0} (1 - X)} = \frac{1}{1/X - 1} \Rightarrow \\ \Rightarrow X &= \frac{1}{1 + 1/K_e} \Rightarrow X = 0.5 \begin{cases} K_e = 1 \\ T \cong 619\text{ K} \end{cases} \\ \therefore \Delta H_R &= \frac{-R}{(T^{-1} - T_R^{-1})} \ln \frac{K_{e(T)}}{K_{e(T_R)}} \cong \frac{-1.987}{(619^{-1} - 473^{-1})} \ln \frac{1}{40} \cong \\ &\cong -14.701\text{ kcal/mol} \end{aligned}$$

Q1 c.

$X_{eq} \wedge T_{eq}$

Resposta

$$\begin{aligned} X_{(520\text{ K})} &= \frac{(C_{pA} + \theta_I C_{pI})(T - T_0)}{-\Delta H_R} = \frac{(C_{pA} + \frac{Y_{I0}}{Y_{A0}} C_{pI})(T - T_0)}{-\Delta H_R} \cong \\ &\cong \frac{(5 + \frac{0.9}{0.1} 12) (520 - 473)}{14.701\text{ E}^3} \cong 0.360 \\ \begin{cases} X_0 = 0; & T_0 = 473 \\ X_1 \cong 0.360; & T_1 = 520 \end{cases} \\ \mathbf{X_{eq} \cong 0.79 \quad \wedge \quad T_{eq} \cong 546\text{ K}} \end{aligned}$$

Q1 d.

Volume do reator para $X_1 = 95\% X_e$

Resposta

$$\begin{aligned} V &= \int_0^X \frac{F_{A0} dX}{-r_A} = \int_0^X \frac{C_{A0} v_0 dX}{-r_A}; \\ -r_A &= k(C_A - C_B/K_e) = \\ &= k \left(\left(\frac{C_{A0}(1 - X) T_0}{1 + \varepsilon X} \right) - \left(\frac{C_{A0} X T_0}{1 + \varepsilon X} \right) / K_e \right) = \\ &= k \left(\frac{C_{A0}(1 - X(1 - 1/K_e)) T_0}{1 + \varepsilon X} \right) = \\ &= k \left(\frac{C_{A0}(1 - X(1 - 1/K_e)) T_0}{1 + y_{A0} \delta X} \right) = \\ &= k \left(\frac{C_{A0}(1 - X(1 - 1/K_e)) T_0}{1 + y_{A0} (1 - 1) X} \right) = \\ &= k C_{A0} (1 - X(1 - K_e)) \frac{T_0}{T} \Rightarrow \\ \Rightarrow V &= \int_0^X \frac{C_{A0} v_0 dX}{k C_{A0} (1 - X(1 - K_e)) \frac{T_0}{T}} = \\ &= \int_0^X \frac{v_0 dX}{k (1 - X(1 - K_e)) \frac{T_0}{T}} = \\ &= \int_0^{.95 \cdot .79} \frac{600 dX}{k (1 - X(1 - K_e)) \frac{473}{T}} = \\ &\cong \int_0^{0.7505} \frac{1.268 dX}{k (1 - X(1 - K_e)) / T} \end{aligned}$$

Simpson:

$$\begin{aligned} f(X) &= \frac{1.268 dX}{k (1 - X(1 - K_e)) / T}; \\ T : X &= \frac{(C_{pA} + \theta_I C_{pI})(T - T_0)}{-\Delta H_R} \Rightarrow \\ \Rightarrow T &= T_0 - \frac{X \Delta H_R}{C_{pA} + \theta_I C_{pI}} \cong 473 - \frac{-X 14.701\text{ E}^3}{5 + \frac{9}{1} 12} \cong \\ &\cong 473 + X 130.094; \\ k_{(T)} &= k_{(T_R)} \exp \left(-\frac{Ea}{R} (T^{-1} - T_R^{-1}) \right) = \\ &\cong 1.17 \exp \left(-\frac{20\text{ E}^3}{1.987} (T^{-1} - 473^{-1}) \right) \cong \\ &\cong 1.17 \exp (-10.064\text{ E}^3 (T^{-1} - 473^{-1})); \\ K_{e(T)} &= K_{e(T_R)} \exp \left(-\frac{\Delta H}{R} (T^{-1} - T_R^{-1}) \right) \cong \\ &\cong 40 \exp \left(\frac{14.701\text{ E}^3}{1.987} (T^{-1} - 473^{-1}) \right) \cong \\ &\cong 40 \exp (7.398\text{ E}^3 (T^{-1} - 473^{-1})) \\ h &= \frac{0.7505}{2} = 0.37525 \begin{cases} X_0 = 0 \\ X_1 = 0.37525 \\ X_2 = 0.7505 \end{cases} \end{aligned}$$

$$\therefore V = \frac{h}{3} (f_{(X_0)} + 4 f_{(X_1)} + f_{(X_2)})$$

Encontramos com os 3 pontos de X os valores para T, $k_{(T)}$, $K_{e(T)}$ que podem ser usados para encontrar $f(X)$ que finalmente são usados para encontrar V

Q1 e.

Y_{A0} para $X_{eq} = 90\%$

Resposta

$$\begin{aligned} Y_{A0} : -X_{(T)} \Delta H_R &= (C_{pA} + \theta_I C_{pI}) (T - T_0) = \\ &= \left(C_{pA} + \frac{Y_{I0}}{Y_{A0}} C_{pI} \right) (T - T_0) = \\ &= \left(C_{pA} + \frac{1 - Y_{A0}}{Y_{A0}} C_{pI} \right) (T - T_0); \\ T_{eq} &\cong 473 + 0.9 * 130.094 \cong 590.085 \Rightarrow \\ \Rightarrow Y_{A0} &= \left(1 + \frac{\frac{-X_{(T)} \Delta H_R}{T - T_0} - C_{pA}}{C_{pI}} \right)^{-1} = \\ &= \left(1 + \frac{\frac{0.9 * 14.701\text{ E}^3}{590.085 - 473} - 8}{12} \right)^{-1} \cong 0.103 \end{aligned}$$

Questão 2

- $A \longrightarrow B$
- CSTR não adiabático
- $V = 6 \text{ m}^3$
- Em estado estacionário
- $v_0 = 6 \text{ L/min} = 360 \text{ L/h}$
- $Y_{A0} = 0.1$
- $\Delta H_R = -100.7 \text{ kJ/mol}$
- $C_{pA} = C_{pB} = 34.6 \text{ J/mol K}$
- $C_{pI} = 75.4 \text{ J/mol K}$
- $R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
- $C_{A0} = 1 \text{ M}$
- $T_0 = 298 \text{ K}$
- $k_{(298 \text{ K})} = 0.0227 \text{ h}^{-1}$
- com parede envolvida até 85% com agua a $100^\circ\text{C} = 373 \text{ K}$

Q2 a.

Equações das curvas

Resposta

$$G_{(T)} = -\Delta H_R X$$

$$X : r_{(T)} = G_{(T)} = \frac{Ua}{F_{A0}} (T - T_0) + \sum \theta_i C_{pi} (T - T_0) =$$

$$= \frac{\left(\frac{Q}{T_0 - T}\right)}{F_{A0}} (T - T_0) + \frac{1 - Y_{A0}}{Y_{A0}} C_{pB} (T - T_0) =$$

$$= \frac{-Q}{C_{A0} v_0} + (1/Y_{A0} - 1) C_{pA} X (T - T_0) \implies$$

$$\implies X = \frac{G_{(T)} + \frac{Q}{C_{A0} v_0}}{(1/Y_{A0} - 1) C_{pA} (T - T_0)} \implies$$

$$\implies G_{(T)} =$$

$$= -\Delta H_R \left(\frac{Q}{C_{A0} v_0} \right) ((1/Y_{A0} - 1) C_{pA} (T - T_0) + \Delta H_R)^{-1} =$$

$$= -100.7 \text{ E}^3 \left(\frac{Q}{1 * 360} \right) ((1/0.1 - 1) 1(T - 298) - 100.7 \text{ E}^3)^{-1} \cong$$

$$\cong \frac{-31.080 Q}{T - 11.487 \text{ E}^3}$$

Por não conseguir calcular Q deixei como variável, se mostra necessário uma vez que a equação final deve ser uma reta, $Q \propto T^2$ o que não verificou

Q2 d.

Ea usando gráfico