ERQ I – Teste 1 2016 Resolução

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

11 de novembro de 2023

Conteúdo

Questão 1

A reação reversível A $\rightleftharpoons$ B é conduzida numa bateria de dois reactores CSTR iguais. O 1º Teste reagente A é alimentado à bateria de reactores numa concentração de 1 M, 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%.

Q1 a.

Deduza a expressão da lei cinética.

Resposta

$$\begin{aligned} &-r_A = k\,(C_A - C_B/k_e) = \\ &= k\,(C_{A0}(1-X) - C_{A0}\,X/k_e) = \\ &= k\,C_{A0}\,(1 - X\,(1+1/k_e)) \end{aligned}$$

Q1 b.

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

Resposta

$$V_i(X) : 0 = F_{A\,i\,i} - F_{A\,i\,o} + r_{A\,i}\,V_i \implies$$

$$i = 1 \implies$$

$$\begin{aligned} &\implies 0 = F_{A\,1\,i} - F_{A\,1\,o} + r_{A\,1}\,V_1 = \\ &= F_{A\,1\,i} - F_{A\,1\,i}(1-X_1) + (-k\,C_{A\,1\,i}\,(1 - X_1\,(1+1/k_e)))\,V_1 = \\ &= F_{A\,1\,i}\,X_1 - k\,C_{A\,1\,i}\,(1 - X\,(1+1/k_e))\,V_1 = \\ &= v_{1\,i}\,C_{A\,1\,i}\,X_1 - k\,C_{A\,1\,i}\,(1 - X\,(1+1/k_e))\,V_1 \implies \end{aligned}$$

$$\implies V_1 = \frac{v_{A\,1\,i}\,X_1}{k\,(1 - X_1\,(1+1/k_e))} = \frac{v_{A\,1\,i}}{k\,(1/X_1 - 1 + 1/k_e)};$$

$$i = 2 \implies$$

$$\begin{aligned} &\implies 0 = F_{A\,2\,i} - F_{A\,2\,o} + r_{A\,2}\,V_2 = \\ &= F_{A\,1\,o} - F_{A\,1\,i}\,(1-X_2) + (k\,C_{A\,1\,i}\,(1 - X_2\,(1+1/k_e)))\,V_2 = \\ &= F_{A\,1\,i}\,(1-X_1) - F_{A\,1\,i}\,(1-X_2) + k\,C_{A\,1\,i}\,(1 - X_2\,(1+1/k_e))\,V_2 = \\ &= F_{A\,1\,i}\,(X_2 - X_1) + k\,C_{A\,1\,i}\,(1 - X_2\,(1+1/k_e))\,V_2 = \\ &= C_{A\,1\,i}\,v_{1\,i}\,(X_2 - X_1) + k\,C_{A\,1\,i}\,(1 - X_2\,(1+1/k_e))\,V_2 \implies \end{aligned}$$

$$\implies V_2 = \frac{v_{1\,i}\,(X_2 - X_1)}{k\,(1 - X_2(1+1/k_e))}$$

Q1 c.

Determine o valor da constante de equilíbrio.

Resposta

$$k_e = \frac{C_{B\,e}}{C_{A\,e}} = \frac{C_{A\,0}\,X_e}{C_{A0}(1-X_e)} = (1/X_e - 1)^{-1} = (1/0.96 - 1)^{-1} = 24$$

Q1 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.

Resposta

$$\begin{aligned} &X_1 : V_2 = \frac{v_{1\,i}\,(X_2 - X_1)}{k\,(1 - X_2(1+1/k_e))} = \\ &= V_1 = \frac{v_{1\,i}}{k\,(1/X_1 - 1 + 1/k_e)} \implies \end{aligned}$$

$$\implies 0 = \begin{pmatrix} X_1^2\,(1 - 1/k_e) & + \\ +X_1\,2\,(X_2/k_e - 1) & + \\ +X_2 & \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} X_1^2\,(1 - 1/24) & + \\ +X_1\,2\,(0.9 * 0.96/24 - 1) & + \\ +X_2 & \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} X_1^2\,0.958 & + \\ -X_1\,1.928 & + \\ +0.864 & \end{pmatrix} \begin{cases} 1.484 \\ 0.747 \end{cases}$$

Q1 e.

Determine o volume dos reactores.

Resposta

$$V = \frac{v_{1\,i}}{k\,(1/X_1 - 1 + 1/k_e)} \cong \frac{10}{0.05\,(1/0.747 - 1 + 1/24)} \cong 526.748\,\mathrm{L}$$

Questão 2

A reacção elementar, em fase gasosa, $2\,\mathrm{A} \longrightarrow 3\,\mathrm{B} + \mathrm{C}$ é conduzida à temperatura de $493\,\mathrm{K}$ e à pressão de $7\,\mathrm{atm}$ num reactor PFR ($k = 0.45\,\mathrm{L\,mol^{-1}\,s^{-1}}$). Assumindo que o reagente A é alimentado puro ao reactor, a um caudal volumétrico de $15\,\mathrm{L/s}$ e que se obtém uma conversão de 90%, determine:

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

Q2 a.

O valor da velocidade de reacção à entrada do reactor.

Resposta

$$\mathrm{A} \longrightarrow \tfrac{3}{2}\,\mathrm{B} + \tfrac{1}{2}\,\mathrm{C}$$

$$\begin{aligned} -r_{A0} : -r_A &= k\,C_A^2 = k\left(\frac{F_A}{v}\right)^2 = \\ &= k\left(\frac{C_{A0}(1-X)}{(1+\varepsilon X)\,(T/T_0)\,(P_0/P)}\right)^2 = \\ &= k\left(\frac{(P_{A0}/RT)(1-X)}{(1+\varepsilon X)\,(1)\,(1)}\right)^2 = \\ &= k\,\frac{(P_{A0}/RT)^2\,(1-X)^2}{(1+\varepsilon X)^2} \implies \end{aligned}$$

$$\implies -r_{A0} = k\left(\frac{P_{A0}}{RT}\right)^2 \cong 0.45\left(\frac{7}{0.082*493}\right)^2 \cong$$
$$\cong 1.347\,\mathrm{E{-}2}\,\mathrm{mol\,L^{-1}\,s^{-1}}$$

Q2 b.

O volume do reactor.

Resposta

$$V : \mathrm{d}V = F_{A0}\,\frac{\mathrm{d}X}{-r_A} = C_{A0}\,v_0\,\frac{\mathrm{d}X}{k\,\frac{C_{A0}^2\,(1-X)^2}{(1+\varepsilon X)^2}};$$
$$\varepsilon = y_{A0}\,\delta = -1 + 3/2 + 1/2 = 1 \implies$$

$$\begin{aligned} \implies \int_0^V \mathrm{d}V &= V = \\ &= \int_0^X \frac{v_0}{k\,C_{A0}}\,\frac{(1+\varepsilon X)^2}{(1-X)^2}\,\mathrm{d}X = \\ &= \frac{v_0}{k\,C_{A0}}\,\Delta\left(\frac{(1+\varepsilon)^2}{1-X} - 2\,\varepsilon(1+\varepsilon)\,\ln(1-X)^{-1} + \varepsilon^2 X\right)\Bigg|_0^X = \\ &= \frac{v_0}{k\,C_{A0}}\left(\frac{(1+\varepsilon)^2}{1-X} - 2\,\varepsilon(1+\varepsilon)\,\ln(1-X)^{-1} + \varepsilon^2 X - (1+\varepsilon)^2\right) = \\ &= \frac{v_0}{k\,C_{A0}}\left((1+\varepsilon)^2\frac{1}{1/X-1} - 2\,\varepsilon(1+\varepsilon)\,\ln(1-X)^{-1} + \varepsilon^2 X\right) \cong \\ &\cong \frac{15}{0.45*0.173}\left(4\frac{1}{1/0.9-1} - 4\,\ln(1-0.9)^{-1} + 0.9\right) \cong \\ &\cong 5334.120\,\mathrm{L} \end{aligned}$$

Q2 c.

O valor do caudal volumétrico à saída do reactor.

Resposta

$$v = v_0\,(1+\varepsilon X) = 15\,(1+0.9) = 2.85\,\mathrm{L/s}$$

Q2 d.

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

Resposta

$$\begin{aligned} F_B &= F_{A0}\,X\,3/2 = \\ &= C_{A0}\,v_0\,X\,3/2 \cong \\ &\cong 0.173*15*0.9*3/2 \cong \\ &\cong 3.504\,\mathrm{mol/s} \end{aligned}$$

Q2 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%

Resposta

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

$$\implies P = P_0(1+\varepsilon X) = 7\,(1+0.9) = 13.3\,\mathrm{atm}$$