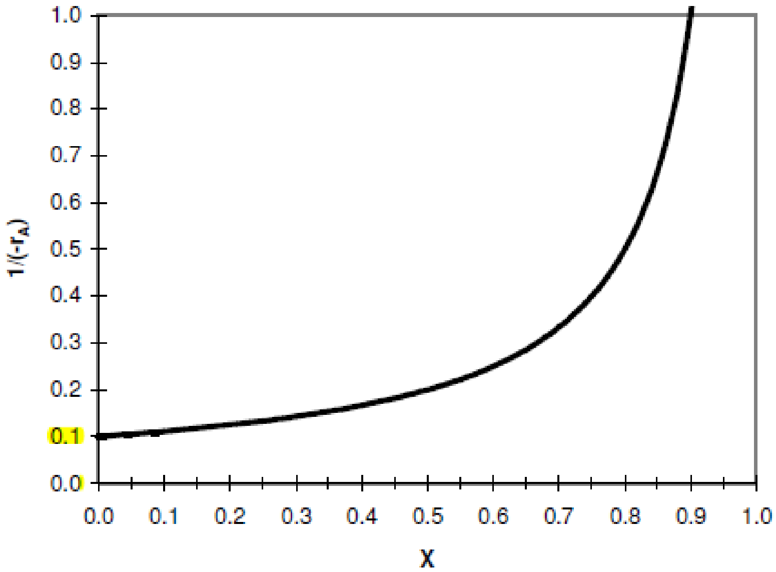
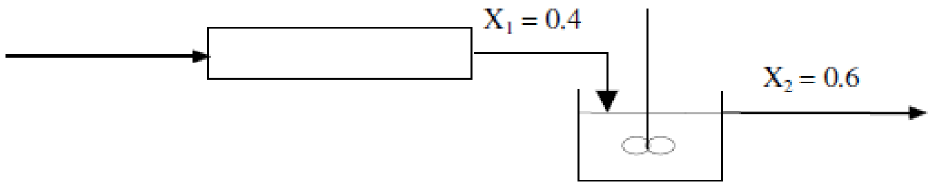
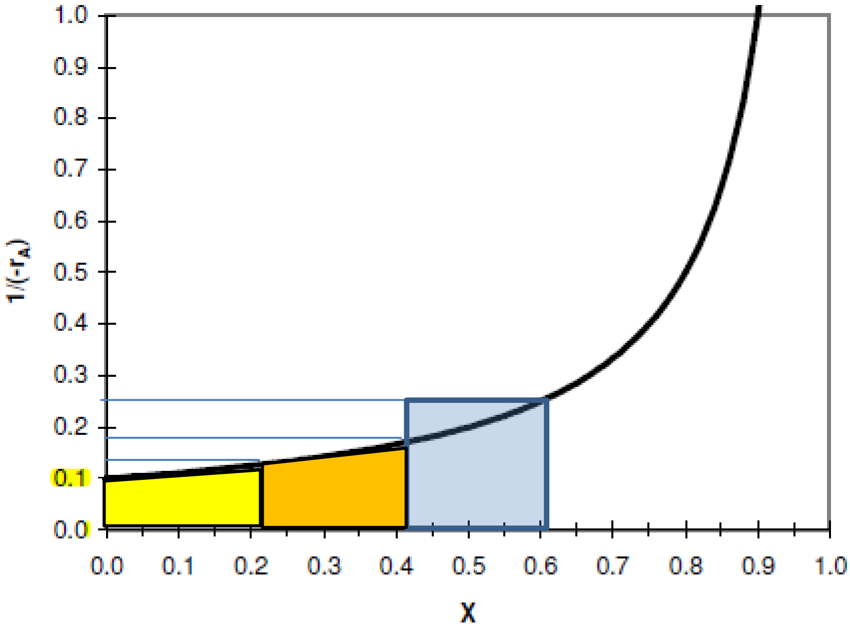
2) A figura mostra a variação de $1/(-r_A)$ com X, para uma reacção isotérmica $A \longrightarrow B$:



Considere um sistema de reactores em que um CSTR e um PFR estão associados em série:



Admitindo que o reagente A é alimentado a um caudal volumétrico de 5 m^3/h, a uma concentração de 0.001 M, determine os volumes de ambos os reactores.



A razão $\frac{V}{F_{A0}}$ no reactor PFR corresponde ao integral $\int_0^X \frac{1}{-r_A} dX$ pelo que há que integrar a curva entre 0≤X≤0.4.

Uma forma simples é considerar a soma da área de 2 trapézios inscritos na área sob a curva com h=0.2 .

área do trapézio menor	área do trapézio maior
0≤X≤0.2	0.2≤X≤0.4
(0.1+0.13)/2*0.2=0.023	(0.13+0.17)/2*0.2=0.03

Área Total= 0.053 $mol^{-1}dm^3\ h = V/F_{A0} = V/(C_{A0}.\ \nu_0)$

$V_{PFR}=F_{A0}*\int -1/r_A\ dX$

$V_{PFR} = C_{A0}.\ \nu_0$.área	$10^{-3}.5.10^3.0.053$	$mol^{-1}dm^3\ h\ mol\ dm^{-3}\ dm^3h^{-1}$
V_{PFR}=	**0.265**	dm^3

área do rectângulo para

0.4≤X≤0.6 =0.2*0.25 =0.05 $mol^{-1}dm^3\ h$

$V_{CSTR}=F_{A0}.(X_2-X_1)/(-r_{A2})$

Volume CSTR=	10^{-3}x5000x0.05	
Volume CSTR=	**0.25**	dm^3

Pergunta 3, 1º teste 2011/12

A reacção de 1ª ordem A→B, em fase líquida, é conduzida num sistema de dois reactores CSTR idênticos associados em série, sendo a alimentação constituída por uma solução de A com a concentração de 0,1 mol/dm^3. Sabendo-se que a constante cinética à temperatura da reacção é k = 0,02 min^{-1}, e que se pretende obter uma conversão final de 70%, determine:

a) A conversão intermédia.

b) O caudal volumétrico da alimentação, sabendo que cada um dos reactores tem um volume de 1 m^3.

c) O número de reactores CSTR de 1 m^3 de volume, que seria necessário associar em série para se obter uma conversão final de 95%.

Reactor 1

Balanço molar:

$F_{A0} - F_{A1} + r_{A1}\int dV_1 = 0$ $\quad$ $F_{A0} - F_{A0}(1- X_1) + r_{A1}V_1 = 0$ $\quad$ $F_{A0}\, X_1 = - r_{A1}V_1$

$$\frac{F_{A0}\, X_1}{-r_{A1}} = V_1$$

Cinética $\quad$ $-r_{A\,1} = k\, C_{A1}$

Condensando balanço molar e lei cinética para reactor 1

$$: V_1 = \frac{F_{A0}\, X_1}{kC_{A1}} = \frac{C_{A0}\, v_0 X_1}{kC_{A0}(1-X_1)} = \frac{v_0 X_1}{k(1-X_1)}$$

Reactor 2

Balanço molar:

$F_{A1} - F_{A2} + r_{A2}\int dV_2 = 0$ $\quad$ $F_{A0}\,(1- X_1) - F_{A0}(1- X_2) + r_{A2}V_2 = 0$

$F_{A0}\,(X_2 - X_1) = - r_{A2}V_2$

$$\frac{F_{A0}\,(X_2-X_1)}{-r_{A2}} = V_2$$

Cinética $\quad$ $-r_{A\,2} = k\, C_{A2}$

Condensando balanço molar e lei cinética para reactor 2

$$: V_2 = \frac{F_{A0}\,(X_2-X_1)}{kC_{A2}} = \frac{C_{A0}\, v_0 (X_2-X_1)}{kC_{A0}(1-X_2)} = \frac{v_0 (X_2-X_1)}{k(1-X_2)}$$

Como os reactores são idênticos, $V_1 = V_2$ e

$$\frac{v_0 X_1}{k(1-X_1)} = \frac{v_0(X_2 - X_1)}{k(1-X_2)}$$

$$\frac{X_1}{(1-X_1)} = \frac{(0,7 - X_1)}{(1-0,7)}$$

$0.3X_1 = 0.7- 0.7\, X_1 - X_1 + X_1^2$ $\quad 0= X_1^2 - 2\, X_1 + 0.7$

$$X_1 = \frac{2 \pm \sqrt{4-4\times 0.7}}{2}$$

$X_1 = 1.54$

$X_1 = 0.45$

b) Caudal volumétrico v_0

$$X_1 = \frac{\tau_1 k}{1+\tau_1 k} \Rightarrow \quad 0.45 = \frac{\tau_1 0.02}{1+\tau_1 0.02} \Rightarrow 0.45 = \tau_1 0.02 - \tau_1 0.009$$

$$0.45 = 0.011\, \tau_1 \Rightarrow \quad \tau_1 = 40.9\, min$$

$$\tau = \frac{V}{v_0} \Rightarrow 40.9 min = \frac{1000\, dm^3}{v_0} \Rightarrow \; v_0 = 24.4 dm^3 min^{-1}$$

c) n reactores

$$X_n = 1 - \frac{1}{(1+\tau k)^n}$$

$$0.95 = 1 - \frac{1}{(1+40.9\times 0.02)^n} = 1 - \frac{1}{1.82^n}$$

$$0.05 = \frac{1}{1.82^n} \Rightarrow n \ln(1.82) = \ln(\frac{1}{0.05}) \Rightarrow \; n = 5$$

1) A reacção elementar em fase líquida A→B tem uma constante cinética de 0.5 h^{-1}. Pretendendo-se uma velocidade de produção de 454 kg/h de B, calcule o número de reactores CSTR com a capacidade de 1 m^3 que é preciso associar em série para se obter uma conversão não inferior a 89%. O reagente A é alimentado com uma concentração de 5 M. A e B têm, cada um deles, um peso molecular de 58

Conversão de produção de B à saída (454 kg/h) para caudal molar:

F_B = 454 000 $g.h^{-1}$ / 58 $mol.g^{-1}$ = 7827.586 $mol.h^{-1}$

Cálculo de caudal molar de A na corrente de alimentação:

$F_{B\ (reactor\ n)} = F_{A0}\ (\theta_B + b/a\ X_n) = F_{A0}\ X_n$ pois $\theta_B = 0$ e $b/a = 1$

F_{A0} = 7827.586/ 0.89 = 8795.041 $mol.h^{-1}$

Cálculo do caudal volumétrico:

$$F_{A0} = C_{A0} \times v_o => 8795.041 = 5 \times v_o => v_o = 1759\ dm^3h^{-1}$$

Cálculo do tempo de permanência:

$$\tau = \frac{V}{v_o} = \frac{1000\ dm^3}{1759\ dm^3h^{-1}} = 0.5685\ h$$

Cálculo do número de reactores:

$$X_n = 1 - \frac{1}{(1+\tau k)^n}$$

$$0.89 = 1 - \frac{1}{(1+0.5685 \times 0.5)^n} = 1 - \frac{1}{1.2842^n}$$

$$0.11 = \frac{1}{1.2842^n} => n \ln(1.2842) = \ln(\frac{1}{0.11}) => \quad n \geq 9\ reactores$$