ERQ I – Teste 2021.1 Repescagem Resolução

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

11 de novembro de 2023

Conteúdo

Questão 1

A fugura mostra a curva cinética obtida em reator bath para a reação elementar, em fase líquida A + B $\rightleftharpoons$ C + D. A reação é conduzida em reatores batch com volume de $5\,\mathrm{m}^3$ cada, que são carregados com uma solução $1\,\mathrm{M}$ em A. Determine, mostrando todos os calculos e tambem usando os gráfico:

Dados:

Tempos mortos $1.5\,\mathrm{h}$

Peso molecular

- C : 130;
- $C_{A\,0}$: $1\,\mathrm{M}$;
- $C_{B\,0}$: $2\,\mathrm{M}$

Q1 a.

A experssão da lei cinética

Resposta

$$r = k\left(C_A\,C_B - \frac{C_C\,C_D}{k_e}\right)$$

Q1 b.

O valor da converão de equilíbrio.

Resposta

O valor de X quando a curva está horizontal: 0.8

Q1 c.

O valor da constante de equilíbrio.

Resposta

$$r = 0 = k\left(C_A\,C_B - \frac{C_C\,C_D}{k_e}\right) =$$
$$= k\left(C_{A\,0}(1-X_e)\,C_{A\,0}(\theta_B - X_e) - \frac{C_{A\,0}\,X_e\,C_{A\,0}\,X_e}{k_e}\right) =$$
$$= k\,C_{A\,0}^2\left((1-X_e)\,(\theta_B - X_e) - \frac{X_e^2}{k_e}\right) \Longrightarrow$$
$$\Longrightarrow\ (1-X_e)\,(\theta_B - X_e) - \frac{X_e^2}{k_e} = \theta_B - X_e - X_e\,\theta_B + X_e^2 - \frac{X_e^2}{k_e} = 0$$

Q1 d.

Os valores do tempo ótimo e da converção ótima.

Resposta

$\cong 1$. No grafico conecta do ponto (-1.5,0) até tangenciar a reta, o valor T do ponto tangente é o tempo ótimo.

Q1 e.

O valor da constante cinética da reação direta

Resposta

Q1 f.

O numero de reatores necessário a uma produção anual de C de $1000\,\mathrm{t}$, supondo que a fabrica funciona $24\,\mathrm{h}$ por dia e $330\,\mathrm{d/year}$, supondo que se pretende uma conversão correspondente a $99\,\%$ da converão de equilíbrio.

Resposta

$$V_R = 1.15 * V = 1.15 * \frac{N_{A\,0}}{C_{A\,0}} = 1.15 * \frac{N_C/X}{1} = 1.15 * \frac{N_C}{X} =$$
$$= 1.15 * \frac{\frac{1\ \mathrm{e}\,9}{130 * \mathrm{batch}_{\mathrm{ano}}}}{0.99\,X_e} = 1.15 * \frac{\frac{1\ \mathrm{e}\,9}{130 * \frac{24*330}{t_{\mathrm{batch}}}}}{0.792} = 1.15 * \frac{\frac{1\ \mathrm{e}\,9}{130 * \frac{24*330}{t+t_d}}}{0.792} =$$
$$= 1.15 * \frac{\frac{1\ \mathrm{e}\,9}{130 * \frac{24*330}{2+1.5}}}{0.792} \cong 402.936$$

Questão 2

A reaçõa elelemtar, em fase gasosa, $2\,\mathrm{A} \longrightarrow 3\,\mathrm{B} + \mathrm{C}$ é conduzida à temperatura de $473\,\mathrm{K}$ e à pressão de $5\,\mathrm{atm}$ num reator PFR ($k = 0.4\,\mathrm{L\,mol^{-1}\,s^{-1}}$). Assumindo que o reagente A é alimentado puro ao reator, a um caudal volumétrico de $15\,\mathrm{L/s}$ e que se obtém uma conversão de $99\,\%$, Determine:

$$\boldsymbol{P\left(\frac{1+\varepsilon X}{1-X}\right) = \frac{(1+\varepsilon)^2}{1-X} - 2\,\varepsilon(1+\varepsilon)\,\ln\frac{1}{1-X} + \varepsilon^2 X}$$
$$\boldsymbol{R = 0.082}\,\mathrm{L\,atm\,K^{-1}\,mol^{-1}}$$

Q2 a.

O volume do reator

Resposta

$$\int_0^V \mathrm{d}V = V = \int_0^X \frac{F_{A0}}{-r_A}\,\mathrm{d}X = F_{A0}\int_0^X \frac{\mathrm{d}X}{-r_A};$$

$$r_A = -k\,C_A^2 = -k\left(\frac{F_A}{v}\right)^2 = -k\left(\frac{F_{A0}\,(1-X)}{v}\right)^2 =$$
$$= -k\left(\frac{F_{A0}\,(1-X)}{v_0(1+\varepsilon\,X)}\right)^2 = -k\,C_{A0}^2\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon\,X}\right)^2;$$

$$C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT} = \frac{P\,Y_{A0}}{RT}$$

$$\varepsilon = Y_{A0}\,\delta = Y_{A0}\,(-1+3/2+1/2) = Y_{A0} \implies$$

$$\implies V = F_{A0}\int_0^X \frac{\mathrm{d}X}{k\,C_{A0}^2\left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X}\right)^2} =$$
$$= \frac{(v_0\,C_{A0})}{C_{A0}^2\,k}\int_0^X \left(\frac{1+\varepsilon\,X}{1-X}\right)^2\mathrm{d}X = \frac{v_0}{C_{A0}\,k}\int_0^X \left(\frac{1+\varepsilon\,X}{1-X}\right)^2\mathrm{d}X =$$
$$= \frac{v_0}{C_{A0}\,k}\,\Delta\left(\frac{(1+\varepsilon)^2}{1-X} - 2\,\varepsilon(1+\varepsilon)\,\ln\frac{1}{1-X} + \varepsilon^2\,X\right)\Bigg|_0^X$$

Q2 b.

O valor do caudal volumétrico à saída do reator.

Resposta

$$v = v_0\,(1+\varepsilon\,X) = 15\,(1+1*0.99) \cong 29.850\,\mathrm{L/s}$$

Q2 c.

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

Resposta

$$F_B = \frac{3}{2}\,F_{A0}\,X = \frac{3}{2}\,C_{A0}\,v_0\,X = \frac{3}{2}*0.129*15*0.99$$

Q2 d.

Caso a reação seja conduzida num reator batch, a volume constante, nas mesmas condições de temperatura e pressão inicial, determine o valor da pressão à conversão de $99\,\%$

Resposta

$$\frac{P}{P_0}\,\frac{V}{V_0} = \frac{P}{P_0} = 1+\varepsilon\,X\,\frac{T}{T_0} = 1+\varepsilon\,X \implies$$
$$\implies P = P_0\,(1+\varepsilon\,X) = 5\,(1+1*.99) = 9.95$$