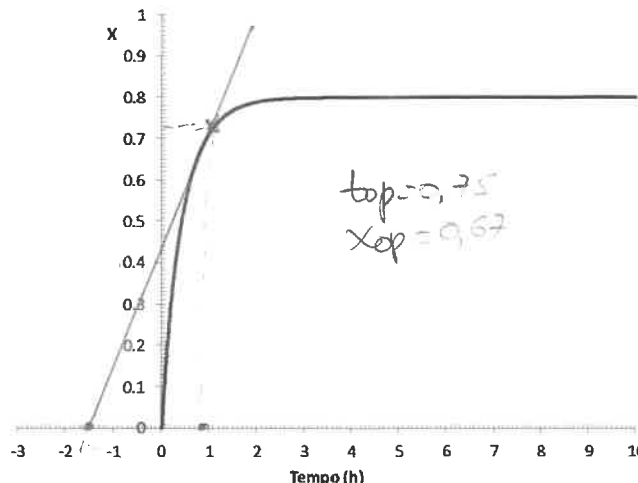


colocar no cap
TP1, TP2

teste 2012-2013
11-1L (teste resolvido)
2013-2014 P. 2 - CSTR

1º Teste de repescagem de ERQI
10 de Junho de 2021

- 1) A figura mostra a curva cinética obtida em reactor batch para a reacção elementar, em fase líquida, $A+B \rightleftharpoons C+D$. A reacção é conduzida em reactores batch com o volume de $5m^3$ cada, que são carregados com uma solução $1M$ em A. Determine, mostrando todos os cálculos e também usando o gráfico:



- A expressão da lei cinética.
- O valor da conversão de equilíbrio.
- O valor da constante de equilíbrio.
- Os valores do tempo óptimo e da conversão óptima.
- O valor da constante cinética da reacção directa.
- O número 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, supondo que se pretende uma conversão correspondente a 99% da conversão de equilíbrio.

Dados: Tempos mortos: 1,5 h; peso molecular de C: 130; $C_{A0} = 1M$; $C_{B0} = 2M$.

- 2) A reacção elementar, em fase gasosa, $2A \rightarrow 3B + C$ é conduzida à temperatura de 473 K e à pressão de 5 atm num reactor PFR ($k = 0,4L \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$). Assumindo que o reagente A é alimentado puro ao reactor, a um caudal volumétrico de 15 L/s e que se obtém uma conversão de 99%, determine:

- O volume do reactor.
- O valor do caudal volumétrico à saída do reactor.
- O valor do caudal molar do produto B, à saída do reactor.
- 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 99%.

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

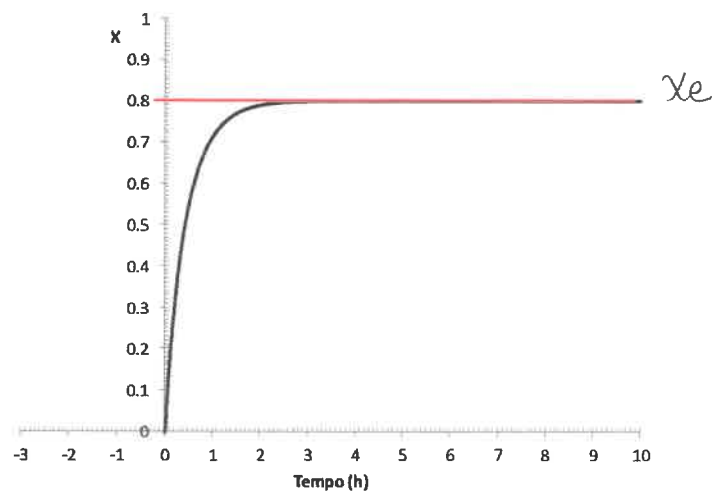
$$R = 0,082 \text{ L atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

Resolução

Prob 1a

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

Prob 1b



O equilíbrio é atingido quando valor da conversão fica constante:

$$X_e = 0,8 //$$

Prob 1c

$$C_{A0} = 1M \\ C_{B0} = 2M$$

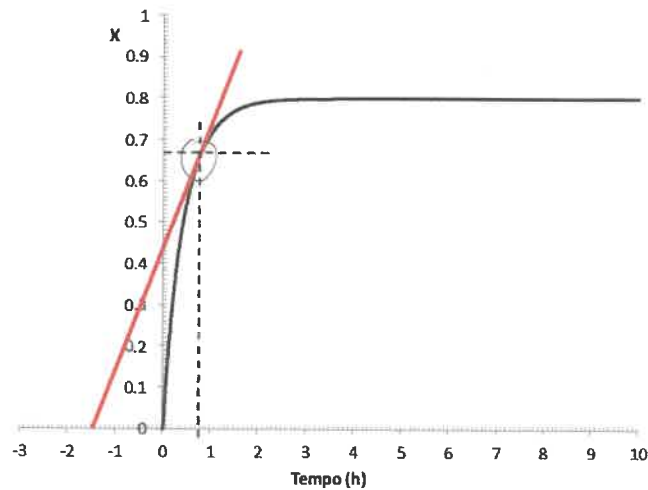
$$r_e = k \left(C_{Ae} C_{Be} - \frac{C_{Ce} C_{De}}{K_e} \right) = 0 \quad \therefore C_{Ae} C_{Be} - \frac{C_{Ce} C_{De}}{K_e} = 0$$

$$\theta_B = \frac{C_{B0}}{C_{A0}} = \frac{2}{1} \quad \therefore K_e = \frac{C_{Ce} C_{De}}{C_{Ae} C_{Be}} = \frac{C_{A0}^2 X_e^2}{C_{A0}^2 (1 - X_e) (\theta_B - X_e)} = \frac{X_e^2}{(1 - X_e) (\theta_B - X_e)}$$

$$\therefore K_e = \frac{X_e^2}{(1 - X_e) (\theta_B - X_e)} = \frac{0,8^2}{(1 - 0,8) (2 - 0,8)} = 2,667 //$$

$$K_e = \frac{C_{A0}^2 X_e^2}{C_{A0} (1 - X_e) (C_{B0} - C_{A0} X_e)} = \frac{C_{A0}^2 X_e^2}{C_{A0}^2 (1 - X_e) (\theta_B - X_e)} = \frac{X_e^2}{(1 - X_e) (\theta_B - X_e)}$$

Prob 1d



$$t_{opt} = \underline{\underline{0,75 \text{ h}}} \quad X_{opt} = 0,66 //$$

Prob 1e

Balço molar:

$$r_A V = \frac{dN_A}{dt} = -N_{A0} \frac{dX}{dt} \quad \therefore r = -r_A = C_{A0} \frac{dX}{dt}$$

$\frac{N_{A0}}{V} = C_{A0}$

$$N_A = N_{A0}(1-X)$$

$$\frac{dN_A}{dt} = -N_{A0} \frac{dX}{dt}$$

Equação condensada:

$$k_d \left(C_A C_B - \frac{C_C C_D}{K_e} \right) = C_{A0} \frac{dX}{dt} \quad (\text{B molar})$$

$$K_s = \frac{k_d}{K_i}$$

$$\therefore k_d C_{A0}^2 \left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{X^2}{K_e} \right) = C_{A0} \frac{dX}{dt}$$

$$\therefore \frac{dX}{dt} = k_d C_{A0} \left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{X^2}{K_e} \right) \quad \therefore k_d = \frac{\frac{dX}{dt}}{C_{A0} \left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{X^2}{K_e} \right)} \quad \rightarrow \text{deixa do lado}$$

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\Delta X}{\Delta t} = \frac{0,66 - 0}{0,75 - (-1,5)} = 0,2933 //$$

Usando o gráfico (alínea d):

$$\frac{dX}{dt} = \frac{0,66 - 0}{0,75 - (-1,5)} = 0,2933$$

$$k_d = \frac{0,2933}{1 \times \left((1 - \frac{0,66}{2,667}) (2 - 0,66) - \frac{0,66^2}{2,667} \right)} = 1,004 \text{ L/(mol.h)} //$$

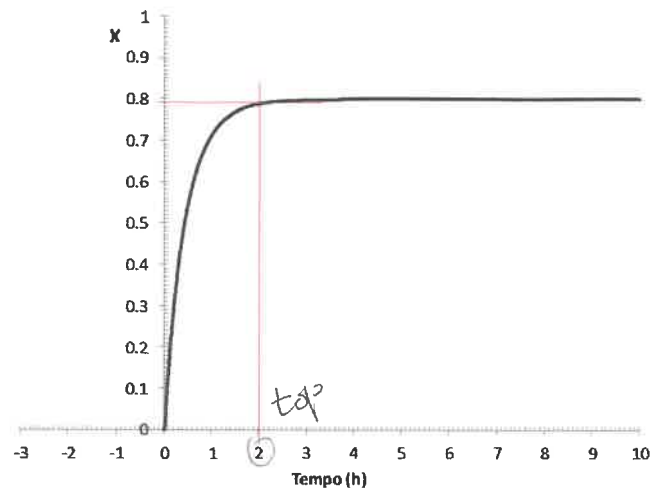
$k_0 = 2,667$

Prob 1f

Tempo de reacção:

$$X = 0,99 X_{eq}$$

$$X = 0,99 \times 0,8 = 0,792$$



Do gráfico:

$$t = 2 \text{ h}$$

Tempo de 1 operação:

$$t_{batch} = t + t_d = 2 + 1,5 = 3,5 \text{ h} //$$

Número de operações por ano:

$$batch_{ano} = \frac{24 \times 330}{3,5} = 2262 //$$

Produção por operação:

$$N_c = \frac{1 \times 10^9}{130 \times 2262} = 3400,7 \text{ mol}$$

Número de moles de A necessários:

$$N_c = N_{A0} X \quad \therefore N_{A0} = \frac{N_c}{0,99 X_e} = \frac{3400,7}{0,792} = 4293,8$$

Volume da mistura reaccional:

$$C_{A0} = \frac{N_{A0}}{V} \quad \therefore V = \frac{N_{A0}}{C_{A0}} = \frac{4293,8}{1} = 4293,8 \text{ L}$$

Volume de reactor necessário:

$$V_R = 1,15 \times V = 1,15 \times 4293,8 = 4937,8 \text{ L}$$

Portanto, basta 1 reactor de 5 m³.

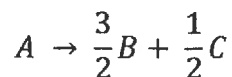
Prob 2a



Lei cinética:

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

Equação estequiométrica:



$$\varepsilon = y_{A0} \delta = 1 \times \left(-1 + \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right) = 1$$

P = 5 atm

$$C_{A0} = \frac{P_{A0}}{R T} = \frac{y_{A0} P}{R T} = \frac{1 \times 5}{0,082 \times 473} = 0,129 \text{ M}$$

Balanço molar:

$$dV = F_{A0} \frac{dX}{(-r_A)} \quad \therefore V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}$$

Equação condensada:

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{k C_{A0}^2 \left(\frac{1-X}{1+\varepsilon X} \right)^2} = \frac{v_0}{C_{A0} k} \int_0^X \left(\frac{1+\varepsilon X}{1-X} \right)^2 dX$$

$$V = \frac{15}{0,129 \times 0,4} \int_0^X \left(\frac{1+X}{1-X} \right)^2 dX = \frac{15}{0,129 \times 0,4} \left[\frac{4}{1-X} - 4 \ln \frac{1}{1-X} + X \right]_0^X$$

$$= \frac{15}{0,129 \times 0,4} \left(\frac{4}{1-X} - 4 \ln \frac{1}{1-X} + X - 4 \right)$$

$$V = \frac{15}{0,129 \times 0,4} \left(\frac{4}{1-0,99} - 4 \ln \frac{1}{1-0,99} + 0,99 - 4 \right) = 110049 \text{ L} //$$

Prob 2b

$$v = v_0 (1 + \varepsilon X) = 15 \times (1 + 0,99) = 29,85 \text{ L/s} \quad (2 \times 6 + 6)$$

Prob 2c

$$X = 0,99 \quad \begin{matrix} F_{A0} = 0,129 \times 15 \\ v_0 = 15 \text{ L/s} \end{matrix}$$

$$F_B = \frac{3}{2} F_{A0} X = \frac{3}{2} C_{A0} v_0 X = \frac{3}{2} \times 0,129 \times 15 \times 0,99 = 2,873 \text{ mol/s}$$

Prob 2d

$$P = P_0 (1 + \varepsilon X) = 5 \times (1 + 0,99) = 9,95 \text{ atm}$$