



PQI 3221:
CINÉTICA QUÍMICA E PROCESSOS AMBIENTAIS

AULA 12

1

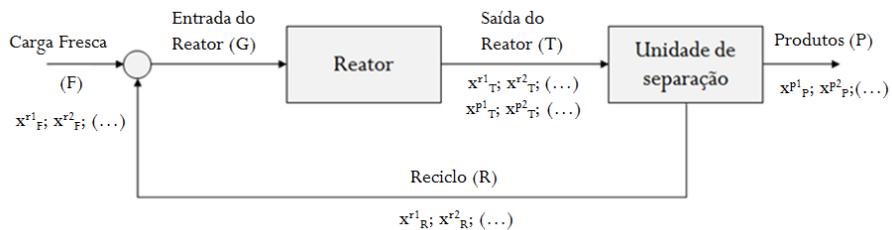
REAÇÕES QUÍMICAS EM SISTEMAS
COM RECICLO

2

CONVERSÃO GLOBAL E CONVERSÃO POR PASSE

É relativamente comum que processos químicos que envolvam reações tenham recuperação parcial (ou até total) de reagentes. Isso ocorre a partir da colocação de unidades (ou equipamentos) que se ocupam de separá-los dos produtos e subprodutos gerados nas transformações

Como vimos em aulas anteriores, também na maior parte dos casos, essas separações consistem de processos físicos simples, e desprovidos de reação. Os reagentes são reencaminhados para a alimentação do reator via reciclo fechado. Assim, o material reciclado se junta a carga fresca de reagentes a partir de um nó de entrada



3

CONVERSÃO GLOBAL E CONVERSÃO POR PASSE

O balanço material de uma instalação como essa requer que sejam definidas duas variáveis: Conversão Global, e Conversão por Passe

Conversão Global: fração (ou %) do reagente presente na carga fresca (F) que será convertida em produto(s) que deixam o processo/sistema (P)

$$\text{Conversão global} = C_g = \frac{\text{Reagente na Carga Fresca} - \text{Reagente no Produto}}{\text{Reagente na Carga Fresca}} \quad C_g = \left(\frac{F^{r1} - P^{r1}}{F^{r1}} \right)$$

Conversão por Passe: é a fração (ou %) do reagente presente na carga combinada (G) que será convertida em produtos(s) que deixam o reator (T)

$$\text{Carga Combinada} = \text{Carga Fresca} + \text{Reciclo} \rightarrow G = F + R$$

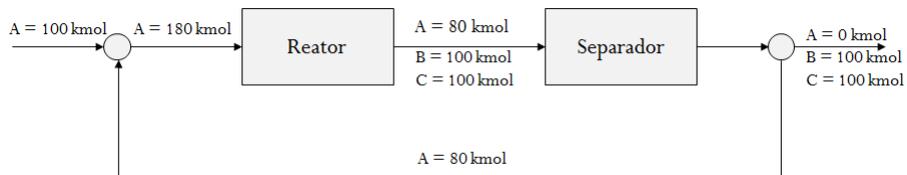
$$\text{Conversão por Passe} = C_p = \frac{\text{Reagente na Carga Combinada} - \text{Reagente na saída do Reator}}{\text{Reagente na Carga Combinada}} \quad C_p = \left(\frac{G^{r1} - T^{r1}}{G^{r1}} \right)$$

4

BALANÇO MATERIAL COM REAÇÃO QUÍMICA EM PROCESSOS COM RECICLO

Problema

Certo processo se desenvolve segundo o arranjo e nas proporções indicadas na figura abaixo. Sabe-se que no interior do reator ocorre a seguinte transformação química:

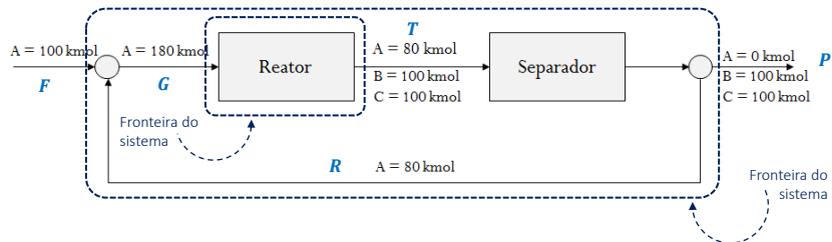


Pede-se calcular:

- Conversão global de A
- Conversão por passe de A

5

SOLUÇÃO



Conversão Global: fração (ou %) do reagente presente na carga fresca (F) que será convertida em produto(s) que deixam o processo/sistema (P)

Para as condições do problema,

$$C_g = \left(\frac{F_A - P_A}{F_A} \right) = \frac{(100 - 0)}{100} = 1,0 = \mathbf{100\%}$$

Conversão por Passe: é a fração (ou %) do reagente presente na carga combinada (G) que será convertida em produtos(s) que deixam o reator (T)

Ou seja,

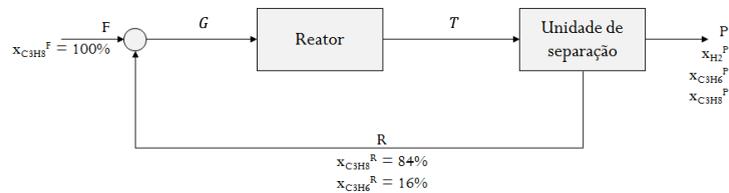
$$C_p = \left(\frac{G_A - T_A}{G_A} \right) = \frac{(180 - 80)}{180} = 0,556 = \mathbf{55,6\%}$$

6

BALANÇO MATERIAL COM REAÇÃO QUÍMICA EM PROCESSOS COM RECICLO

Problema

Propeno (C_3H_6) pode ser produzido por desidrogenação catalítica de propano (C_3H_8) de acordo com a reação química indicada a seguir:

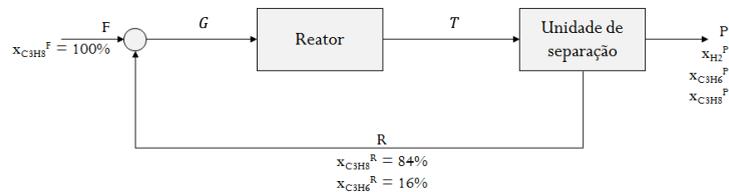


A conversão de C_3H_8 por passe no reator é de 40%. Admitindo que o produto que emana do processo contenha 4,0% de propano em quantidade de matéria, pede-se calcular:

- Conversão global de C_3H_8
- A razão de reciclo (R/F)

7

SOLUÇÃO



Informações fornecidas pelo enunciado:

- Reação: $C_3H_8 \rightarrow C_3H_6 + H_2$, que para simplificar pode ser escrita como: $A \rightarrow B + C$
- Conversão por passe: $C_P^A = 40\%$
- Composição de R : $x_R^A = 84\%$ e $x_R^B = 16\%$
- Fração de A na corrente de produto que deixa o sistema: $x_P^A = 4,0\%$

Constatações/deduções realizadas e conceitos aplicáveis a partir do enunciado:

- A reação é equimolar: o consumo de **1 mol A** irá gerar, simultaneamente, **exatos 1 mol B e 1 mol C**
- Ter $C_P^A = 40\%$ quer dizer que de toda a quantidade de A alimentada ao reator ($= G_A$), apenas 40% são convertidos
- A corrente R não apresenta a espécie química C em sua composição. Por conta disso, e pelo fato de $F = F_A$, então a corrente G também não terá a espécie química C em sua composição \rightarrow todo C gerado sai em P

8

SOLUÇÃO

Colocação de Base de Cálculo

Olhando as opções possíveis, a melhor alternativa para colocação da base de cálculo é

$$G_A = 100 \text{ kmols}$$

A partir disso, e usando o conceito de conversão por passe, será possível determinar a parcela remanescente de *A* na corrente (*T*), dado que

$$C_P^A = \left(\frac{G_A - T_A}{G_A} \right) = 40\% = \frac{40}{100} \rightarrow T_A = \left(1 - \frac{40}{100} \right) \cdot G_A$$

Assim,

$$T_A = 60 \text{ kmol}$$

Olhando a equação,



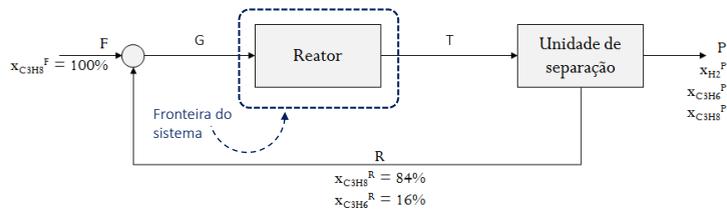
$$40 \text{ kmols } A \rightarrow 40 \text{ kmols } B + 40 \text{ kmols } C$$

Portanto,

$$T_B = T_C = 40 \text{ kmols}$$

9

SOLUÇÃO



Balances componente no reator:

Premissa: sistema opera em estado estacionário e está em regime

A: $G_A = k \cdot C_P^A \cdot G_A + T_A$

Premissa: depois de formado, o produto B não reage mais com qualquer espécie química presente no sistema

B: $G_B + m \cdot C_P^A \cdot G_A = T_B$

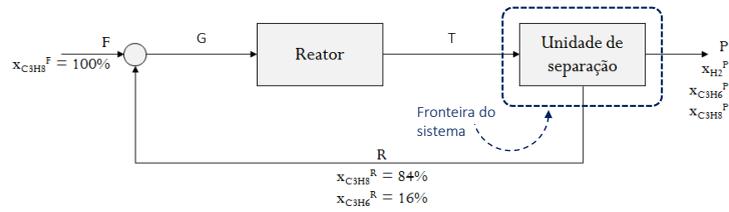
C: $n \cdot C_P^A \cdot G_A = T_C$

Sendo *k*, *m* e *n* os coeficientes estequiométricos associados, respectivamente, às espécies químicas *A*, *B* e *C* na reação. No caso presente,

$$k = m = n = 1$$

10

SOLUÇÃO



Balço global no separador:

$$T = R + P$$

$$140 = R + P$$

Balço componente no separador:

A: $T_A = R_A + P_A$

$$60 = \left(\frac{84}{100}\right) \cdot R + \left(\frac{4}{100}\right) \cdot P$$

11

SOLUÇÃO

Resolvendo o sistema, teremos

$$60 = \left(\frac{84}{100}\right) \cdot R + \left(\frac{4}{100}\right) \cdot (140 - R)$$

E a partir disso, concluímos que

$$R = 68 \text{ kmols e } P = 72 \text{ kmols}$$

Observando em mais detalhes a corrente P será possível perceber que

$$P = P_A + P_B + P_C$$

Se

$$P_A = \left(\frac{4}{100}\right) \cdot P \rightarrow P_A = \left(\frac{4,0}{100}\right) \cdot 72$$

Assim,

$$P_A = 2,88 \text{ kmols}$$

12

SOLUÇÃO

Por fim, fazendo um balanço global no nó de entrada, teremos

$$R + F = G$$

Ou seja,

$$[R_A + R_B] + F = [G_A + G_B] \rightarrow \left[\left(\frac{84}{100} \right) \cdot 68 + \left(\frac{16}{100} \right) \cdot 68 \right] + F = \left[100 + \left(\frac{16}{100} \right) \cdot 68 \right]$$

Logo,

$$F = F_A = 42,88 \text{ kmols}$$

Dessa forma,

$$C_g = \left(\frac{F_A - P_A}{F_A} \right) \cdot 100\%$$
$$C_g = \left[\frac{42,88 - \left(\frac{4}{100} \cdot 72 \right)}{42,88} \right] \cdot 100\% \rightarrow C_g = 93,3\%$$

Da mesma maneira, a Taxa de Refluxo (TR) será

$$TR = \left(\frac{R}{F} \right) = \frac{68}{42,88} \cong 1,60$$