## PQI5783 – Análise de Processos da Indústria Química

1. Resolver seguinte sistema:

 

 A partir das seguintes condições iniciais:

  e 

 usando a rotina fsolve nas seguintes condições:

1. com jacobiano numérico
2. com jacobiano analítico
3. Seja um CSTR operado isotermicamente com variação de volume devido à reação desprezível, operando com volume de líquido constante V e em que ocorrem duas reações químicas supostas elementares:

A + B -> C rR1 = k1 CA CB

C + B -> D rR2 = k2 CC CB

 Sejam k1 = 1 L/(mol.min) e k2 = 0.5 L/(mol.min) faça um programa que calcule a concentração de todos os componentes na saída (supondo o sistema em estado estacionário). Aplique este programa para as seguintes condições:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| V (L) | q (L/min) | CAe (mol/L) | CBe (mol/L) | CCe (mol/L) | CDe (mol/L) |
| 100 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 100 | 1 | 1 | 2 | 0 | 0 |
| 100 | 0.5 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 100 | 0.5 | 1 | 2 | 0 | 0 |
| 50 | 0.5 | 1 | 1 | 0 | 0 |

1. Reator não isotérmico

Seja um reator CSTR não isotérmico em que ocorre a reação:



A constante de reação obedece à lei de Arrhenius:



Para um reator com volume constante os balanços de massa de A e B podem ser expressos por:



Assumindo que a densidade e a capacidade calorífica são constantes, podemos expressar o balanço de energia da seguinte forma:



Onde ΔH é o calor de reação (negativo se a reação for exotérmica), UA é o produto coeficiente de transferência de calor e a área de troca térmica para uma camisa de resfriamento através da qual flui um líquido com elevada vazão com temperatura com temperatura constante Tc .

Dividindo por V e igualando as derivadas a zero, temos as seguintes equações algébricas que definem os estados estacionários:



Definindo as seguintes variáveis adimensionais:



e o número de Damköhler:



E o calor de reação, a eficiência de resfriamento e energia de ativação reparametrizadas:



As equações podem ser expressas da seguinte forma:



Se não houver entrada de B, podemos expressar φB em função de φA:



E como φB não aparece em nenhuma outra equação, podemos resolver o balanço de massa de A e o balanço de energia apenas:



1. Supondo β=-1, χ=0, γ=8 e θC = 1, calcule os pontos estacionários para Da variando de 10-2 a 100 e faça um gráfico de φA e θ em função de Da.

b) Repita para β=-1, χ=0, γ=12 e θC = 1, calcule os pontos estacionários para Da variando de 10-2 a 100 e faça um gráfico de φA e θ em função de Da.

1. Modelo da Flash

A seguir apresentamos uma correlação para as constantes de equilíbrio de seis hidrocarbonetos a uma pressão de 300 psia.

 com T em oR

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Componente | a1 x 102 | a2 x 105 | a3 x 108 | a4 x 1012 |
| C2H4 | -5.177995 | 62.124576 | -37.562082 | 8.0145501 |
| C2H6 | -9.8400210 | 67.545943 | -37.459290 | -9.0732459 |
| C3H6 | -25.098770 | 102.39287 | -75.221710 | 153.84709 |
| C3H8 | -14.512474 | 53.638924 | -5.3051604 | -173.58329 |
| nC4 | -14.181715 | 36.866353 | 16.521412 | -248.23843 |
| iC4 | -18.967651 | 61.239667 | -17.891649 | -90.855512 |

* 1. Desenvolver uma rotina que sendo dada a vazão e as frações molares dos componentes da alimentação, e a temperatura do Flash calcule as vazões de líquido e vapor que deixam o Flash assim como as composições de cada uma das correntes.

Aplique esta rotina às seguintes situações:

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Vazão(mol/h) | C2H4 | C2H6 | C3H6 | C3H8 | nC4 | iC4 | T (oC) |
| 100 | 0.02 | 0.03 | 0.05 | 0.10 | 0.60 | 0.20 | 93 |
| 100 | 0.02 | 0.03 | 0.05 | 0.10 | 0.60 | 0.20 | 98 |
| 100 | 0.02 | 0.03 | 0.05 | 0.10 | 0.60 | 0.20 | 102 |
| 100 | 0.02 | 0.03 | 0.05 | 0.10 | 0.60 | 0.20 | 107 |
| 100 | 0.5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.5 | 25 |
| 100 | 0.5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.5 | 55 |

1. **Reator CSTR em estado estacionário**

A produção de anidrido maleico pela oxidação de benzeno com catalisador de pentóxido de vanadio foi estudada e concluiu-se que ocorrem as seguintes reações no sistema:

C6H6 + 4,5 O2 🡪 C4H2O3 + 2 CO2 + 2H2O (1)

C4H2O3 + 3 O2 🡪 4 CO2 + H2O (2)

C6H6 + 7,5 O2 🡪 4 CO2 + 3H2O (3)

 Como estas reações são realizadas com excesso de ar, as reações podem ser consideradas como de pseudo-primeira ordem. As contantes de reação são dadas por:

 k1 = 42800.exp(-12660/T [K]) (s-1)

 k2 = 701000.exp(-15000/T [K]) (s-1)

 k3 = 260.exp(-10800/T [K]) (s-1)

Pretende-se estudar a implementação destas reações em um CSTR e em um PFR, em temperaturas de 800 a 850 K, operando a uma pressão de 10 atm. A alimentação é de 10 m3 por hora, com uma proporção de benzeno de 1% molar, sendo o restante ar.

Para um reator CSTR isotérmico, analise como varia a conversão e a composição da saída, com a temperatura (entre 800 e 850 K). Para cada temperatura varie o volume do reator, com o objetivo de determinar o volume necessário para obter uma seletividade máxima em anidrido maleico.

1. Neste exercício vamos analisar novamente o sistema correspondente ao reator CSTR do exercício 3 da lista 4 MAS considerando que k1 é igual a 1 L2/(mol2.s) e k2 é 0.025 s-1. Consideraremos também que V/qi é 250 s CAi é de 1 mol/L e CBi é 0.0667 mol/L e que a concentração de A e B de 0.5 mol/L e 0.0667 mol/L respectivamente.

a) Tente achar os pontos estacionários e analisar a sua estabilidade e construir as trajetórias aproximadas no plano de fases.

b) Construa trajetórias no Matlab, usando um solver de EDO, resolvendo o sistema entre 0 e 10000 para diferentes condições iniciais.