

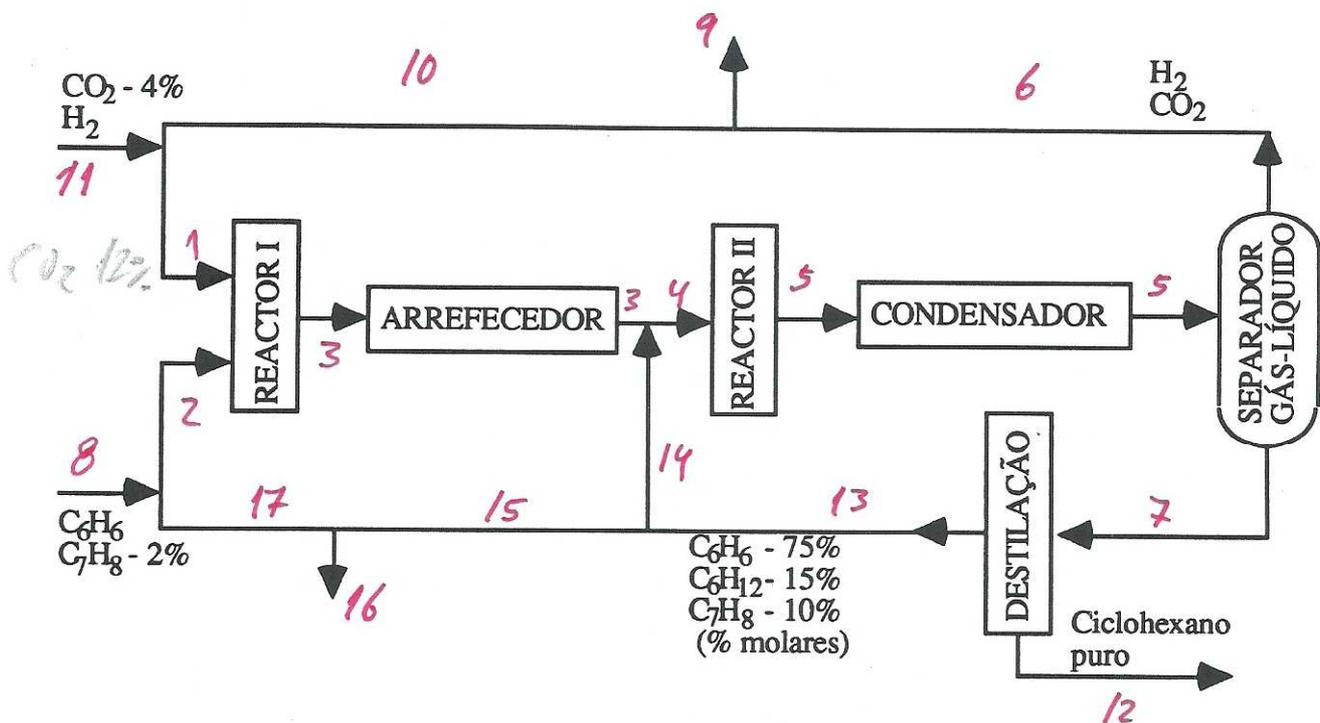
### Caso 3.6

Considere o processo de produção de ciclohexano, a partir do benzeno e do hidrogénio, apresentado em anexo, tendo em atenção que:

- A única reacção que tem lugar nos reactores é



- A conversão no reactor I é de 40% e no reactor II é de 55%.
- À entrada do reactor I e do reactor II, existe  $\text{H}_2$  em excesso (50%).
- A alimentação fresca de hidrogénio contém 4% de  $\text{CO}_2$ .
- O teor de  $\text{CO}_2$  na corrente gasosa à entrada do reactor I, não pode exceder 12%.
- A alimentação de benzeno fresco contém 2% (molar) de tolueno.
- No separador gás-líquido faz-se uma separação total dos gases ( $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ) e dos hidrocarbonetos (aproximação que consiste em desprezar a pressão de vapor dos hidrocarbonetos e a solubilidade dos gases na corrente líquida).



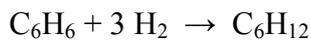
Para uma base à escolha,

- Estabeleça o balanço de massa do processo ;
- Determine o consumo diário de matérias primas, para uma produção diária de 5 ton de ciclohexano.

Neste problema vamos considerar como Base de cálculo 100 moles do reagente limitante, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, à entrada do Reactor I (corrente (2)):

Mole	1	2	3	4	5	6	7	8	9
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		100							
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>									
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>									
H <sub>2</sub>									
CO <sub>2</sub>									
Total									

Temos a reacção que ocorre:



No Reactor I sabemos a %C = 40% e a %E<sub>H<sub>2</sub></sub> = 50%.

Pela %C sabemos que reagiram 40 moles de C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> e que saíram 60 moles por reagir.

Sabemos que a quantidade estequiométrica de H<sub>2</sub> é de 300 moles e que a %E<sub>H<sub>2</sub></sub> = 50%

Entra de H<sub>2</sub> = Est × (1 + %E) = 300 × (1 + 0,5) = 450 moles

Sai de H<sub>2</sub> = entra – reage = 450 – 100 × 3 × 0,4 = 330 moles

Do enunciado também sabemos que a corrente (1) possui 12% de CO<sub>2</sub> e 88% de H<sub>2</sub>. Assim podemos preencher também a coluna (1)

Mole	1	2	3	4	5	6	7	8	9
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		100	60						
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>									
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>									
H <sub>2</sub>	450		330						
CO <sub>2</sub>	61,36								
Total	511,36								

No Reactor II sabemos a %C = 55% e a %E<sub>H<sub>2</sub></sub> = 50%.

Sabemos que o H<sub>2</sub> à entrada do Reactor II (corrente (4)) é que sai do Reactor I (corrente (3)), 330 moles.

Como sabemos a %E<sub>H<sub>2</sub></sub> podemos calcular a quantidade estequiométrica e o C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> em (4):

$$\%E = \frac{E - \text{Est}}{\text{Est}} \times 100 \qquad 50 = \frac{330 - \text{Est}}{\text{Est}} \times 100$$

vem Est = 220 moles de H<sub>2</sub> → 73,33 moles de C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>

Pela %C sabemos que reagiram 73,33 × 0,55 = 40,33 moles de C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> e saíram 33 moles por reagir.

Sai de H<sub>2</sub> = entra – reage = 330 – 73,33 × 3 × 0,55 = 209,01 moles

Mole	1	2	3	4	5	6	7	8	9
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		100	60	73,33	33				
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>									
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>									
H <sub>2</sub>	450		330	330	209,01	209,01			
CO <sub>2</sub>	61,36		61,36	61,36	61,36	61,36			
Total	511,36					270,37			

O CO<sub>2</sub> comporta-se como um inerte assim vai seguindo de corrente para corrente.

O C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> em (4) vem da saída do Reactor I (corrente (3), e da corrente reciclada (14). Por diferença tiramos o C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> em (14) e como sabemos a composição desta corrente podemos preencher a respectiva coluna

Nota: As correntes (13), (14), (15), (16) e (17) têm a mesma composição.

Mole	1	2	3	4	5	6	7	8	9
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		100	60	73,33	33				
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>									
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>									
H <sub>2</sub>	450		330	330	209,01				
CO <sub>2</sub>	61,36		61,36	61,36	61,36				
Total	511,36								
Mole	10	11	12	13	14	15	16	17	
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>					13,33				
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>					2,67				
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>					1,78				
H <sub>2</sub>									
CO <sub>2</sub>									
Total					17,77				

Do que sai do Reactor II os gases seguem na corrente (6) e os líquidos na corrente (7), (13) e (15).

Mole	1	2	3	4	5	6	7	8	9
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		100	60	73,33	33		33		
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>									
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>							4,40		
H <sub>2</sub>	450		330	330	209,01	209,01			
CO <sub>2</sub>	61,36		61,36	61,36	61,36	61,36			
Total	511,36					270,37			
Mole	10	11	12	13	14	15	16	17	
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>				33	13,33	19,64			
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>				6,60	2,67	3,93			
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>				4,40	1,78	2,62			
H <sub>2</sub>									
CO <sub>2</sub>									
Total				44,00	17,77	26,19			

Para completarmos o balanço mássico precisamos de 2 sistemas de equações, um para resolver a purga gasosa (corrente (9)) e outro para calcular a purga líquida (corrente (16)):

Começando pelos gases necessitamos de calcular a composição das correntes (6), (9) e (10).

Indo à tabela de entradas e saídas:

$$\text{Corrente (6)} \quad y_{\text{H}_2} = \frac{209,01}{270,37} = 0,77305$$

$$y_{\text{CO}_2} = \frac{61,36}{270,37} = 0,22695$$

$$\text{Balanço ao H}_2 \quad 0,96 \times Q_{11} = 0,77305 \times Q_9 + (450 - 209,01)$$

$$\text{Balanço ao CO}_2 \quad 0,04 \times Q_{11} = 0,22695 \times Q_9$$

$$\text{Obtem-se } Q_9 = 51,56 \text{ moles e } Q_{11} = 292,54 \text{ moles}$$

Depois deste cálculo, considerando-se (10) = (6) – (9) completa-se o balanço mássico aos gases:

<b>Mole</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>	<b>9</b>
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		100	60	73,33	33				
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>									
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>									
H <sub>2</sub>	450		330	330	209,01	209,01			39,86
CO <sub>2</sub>	61,36		61,36	61,36	61,36	61,36			11,7
Total	511,36					270,37			51,56
<b>Mole</b>	<b>10</b>	<b>11</b>	<b>12</b>	<b>13</b>	<b>14</b>	<b>15</b>	<b>16</b>	<b>17</b>	
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>				33	13,33	19,64			
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>				6,60	2,67	3,93			
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>				4,40	1,78	2,62			
H <sub>2</sub>	169,15	280,84							
CO <sub>2</sub>	49,66	11,70							
Total	218,81	292,54		44,00	17,77	26,19			

Por fim podemos fazer o cálculo da purga líquida:

$$\text{Balanço ao C}_6\text{H}_6 \quad 0,98 \times Q_8 = 0,75 \times Q_{16} + (100 \times 0,4) + (73,33 \times 0,55)$$

$$\text{Balanço ao C}_7\text{H}_8 \quad 0,02 \times Q_8 = 0,1 \times Q_{16}$$

$$\text{Obtem-se } Q_8 = 96,78 \text{ moles e } Q_{16} = 19,36 \text{ moles}$$

Depois deste cálculo, considerando-se (17) = (15) – (16) e (2) = (8) + (17) completa-se balanço mássico aos líquidos:

Mole	1	2	3	4	5	6	7	8	9
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		100	60	73,33	33		33	94,84	
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>		1,02	41,02	43,69	84,02		84,02		
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>		2,62	2,62	4,4	4,4		4,4	1,94	
H <sub>2</sub>	450		330	330	209,01	209,01			39,86
CO <sub>2</sub>	61,36		61,36	61,36	61,36	61,36			11,7
Total	511,36	103,64	495	512,78	391,79	270,37	121,42	96,78	51,56
Mole	10	11	12	13	14	15	16	17	
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>				33	13,33	19,64	14,52	5,12	
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>			77,42	6,60	2,67	3,93	2,90	1,02	
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>				4,40	1,78	2,62	1,94	0,68	
H <sub>2</sub>	169,15	280,84							
CO <sub>2</sub>	49,66	11,70							
Total	218,81	292,54	77,42	44,00	17,77	26,19	19,36	6,83	

Para completar o balanço ao C<sub>6</sub>H<sub>12</sub> é necessário considerar o C<sub>6</sub>H<sub>12</sub> formado em cada reactor.  $100 \times 0,4 = 40$  moles no Reactor I e  $73,33 \times 0,55 = 40,33$  no Reactor II.

$$C_6H_{12} (3) = C_6H_{12} (2) + 40$$

$$C_6H_{12} (4) = C_6H_{12} (3) + C_6H_{12} (14)$$

$$C_6H_{12} (5) = C_6H_{12} (7) = C_6H_{12} (4) + 40,33$$

$$C_6H_{12} (12) = C_6H_{12} (7) - C_6H_{12} (13)$$

Nota: Há alguma discrepância nos valores que podem ser devidos a erros de arredondamento

Resposta ao enunciado.

B) Determinar o consumo de matérias primas para uma produção de 5 ton de C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>

PM            C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>            78 g/mole

                  C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>            84 g/mole

                  C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>            92 g/mole

H<sub>2</sub> + CO<sub>2</sub> ----- C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> + C<sub>7</sub>H<sub>8</sub> ----- C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>

280,84 + 11,7 ----- 94,84 + 1,94 ----- 77,42

6,553 m<sup>3</sup> (PTS) ----- 7,576 Kg ----- 6,503 Kg

5038 m<sup>3</sup> (PTS) ----- 5825 Kg ----- 5000 Kg