

## Caso extra 4

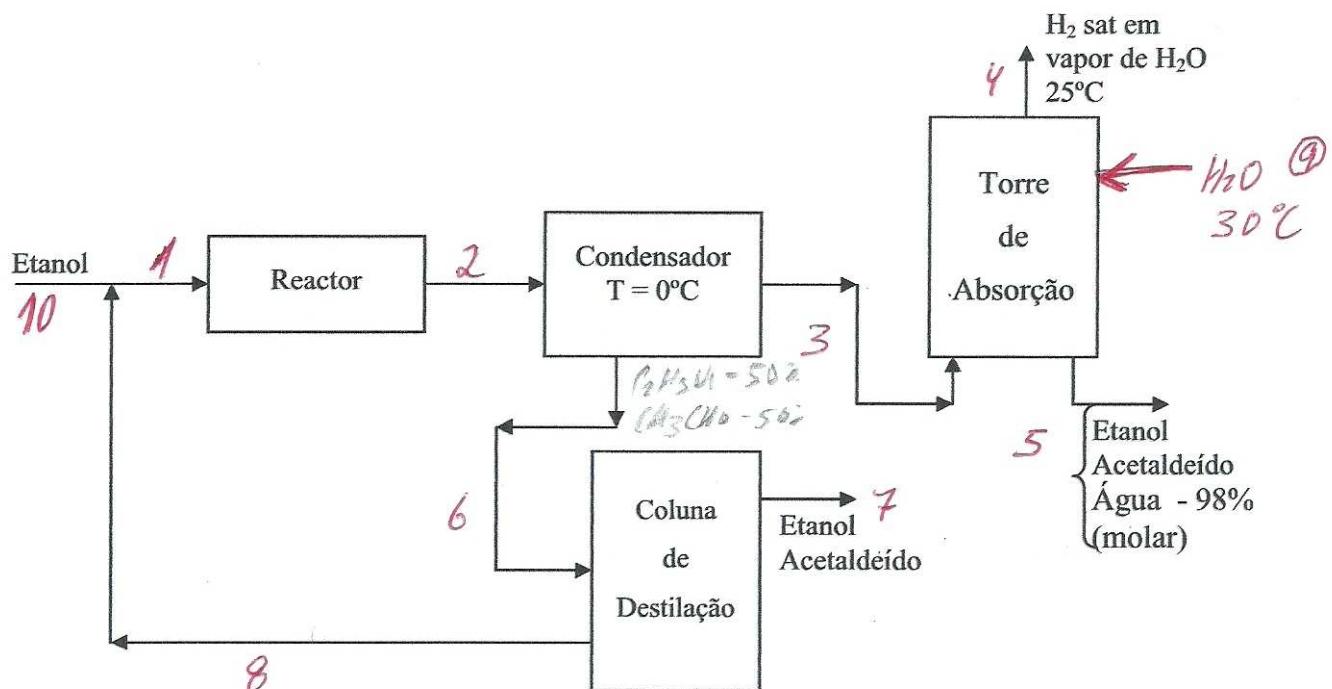
Na produção de acetaldeído, por desidrogenação catalítica do etanol a 280°C,



fornecese ao reactor uma alimentação mista resultante da mistura de uma corrente fresca de etanol puro e de um reciclado contendo etanol e acetaldeído. Utiliza-se uma razão de reciclagem (molar) para o etanol de 0,89.

A conversão do etanol no reactor é de 50,9%. O efluente gasoso do reactor é arrefecido a 0°C obtendo-se, por condensação, uma mistura líquida de acetaldeído e etanol (50% molar) que é seguidamente destilada de modo a obter um destilado rico em acetaldeído e uma corrente de base que é reciclada ao reactor.

A corrente gasosa resultante do condensador é lavada com água a 30°C numa torre de absorção adiabática. O hidrogénio sai da torre a 25°C, saturado em vapor de água e isento de compostos orgânicos. A pressão é, em todos os pontos do processo, de 1 atm (abs).



- Estabeleça, para uma base de cálculo à escolha, o balanço de massa ao processo.
- Calcule o rendimento do processo em acetaldeído.

Antes de começar a resolver o problema vou às Tabelas procurar os Pv que irei utilizar na resolução deste problema: Pv a 0°C do etanol e do acetaldeído e Pv a 25°C da água:

## Etanol

T (°C)	1/T (K <sup>-1</sup> )	Pv (mmHg)	ln Pv
-2,3	$3,692 \times 10^{-3}$	10	2,3066
0	$3,661 \times 10^{-3}$		2,4622
8	$3,210 \times 10^{-3}$	20	2,9957

$\rightarrow$  Pv = 11,73 mmHg

## Acetaldeído

T (°C)	1/T (K <sup>-1</sup> )	Pv (mmHg)	ln Pv
-10	$3,800 \times 10^{-3}$	200	5,2983
0	$3,661 \times 10^{-3}$		5,7717 → Pv = 321,09 mmHg
4,9	$3,596 \times 10^{-3}$	400	5,9915

## Água

$$P_v \text{ a } 25^\circ\text{C} = 23,756 \text{ mmHg}$$

Agora vou começar a resolver o problema seleccionando a BC: Escolhi 100 moles do etanol na corrente (1), que corresponde à escolha habitual: na maior parte dos casos a melhor BC é 100 moles do reagente limitante à entrada do reactor.

Conecemos a  $\%C = 50,9\%$  logo em (2) saem:

$$\text{Etanol} = 100 \times (1 - \%C) = 100 \times (1 - 0,509) = 49,1 \text{ moles}$$

$$H_2 = 100 \times \%C = 100 \times 0,509 = 50,9 \text{ moles}$$

Também se formou 50,9 moles de acetaldeído, mas não sabemos quanto vem de (8).

### Corrente 3

Para calcularmos esta corrente temos que recorrer à equação de Raoult-Dalton

$$X_i P_{Vi} = Y_i P = P_i \quad Y_i = \frac{X_i \times P_{Vi}}{P}$$

$$P = 760 = P_{H_2} + P_{etanol} + P_{acetaldeido} = P_{H_2} + X_{etanol} \times P_{etanol} + X_{acetaldeido} \times P_{acetaldeido}$$

$$760 = P_{H_2} + 0,5 \times 11,73 + 0,5 \times 321,09$$

$$\text{Vem } P_{H_2} = 593,59 \text{ mmHg} \quad \text{e} \quad Y_{H_2} = \frac{593,59}{760} = 0,78104$$

$$Y_{etanol} = \frac{0,5 \times 11,73}{760} = 0,00772$$

$$Y_{acetaldeido} = \frac{0,5 \times 321,09}{760} = 0,21124$$

Com este valores já podemos completar a corrente (3)

Moles	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Etanol	100,00	49,10	0,50							
Acetaldeído			13,77							
H <sub>2</sub>		59,90	10,90							
H <sub>2</sub> O										
Total			65,17							

O etanol (6) = etanol (2) – etanol (3) e acetaldeido (6) = etanol (6)

Moles	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Etanol	100,00	49,10	0,50			48,60				
Acetaldeído			13,77			48,60				
H <sub>2</sub>		59,90	10,90							
H <sub>2</sub> O										
Total			65,17			97,20				

Todo o H<sub>2</sub> de (3) vai sair em (4) estando saturado em água:

### Corrente (4)

$$Y_{água} = \frac{Pv}{P} = \frac{23,756}{760} = 0,031258 \quad Y_{H_2} = 1 - 0,031258 = 0,968742$$

Moles	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Etanol	100,00	49,10	0,50			48,60				
Acetaldeído			13,77			48,60				
H <sub>2</sub>		59,90	10,90	50,9						
H <sub>2</sub> O				1,64						
Total			65,17	52,54		97,20				

Todo o etanol e acetaldeído de (3) vai sair em (5), existindo aí 98 % de água

Moles	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Etanol	100,00	49,10	0,50		0,50	48,60				
Acetaldeído			13,77		13,77	48,60				
H <sub>2</sub>		59,90	10,90	50,9						
H <sub>2</sub> O				1,64	699,23					
Total			65,17	52,54	713,50	97,20				

A corrente (9) calcula-se através dum balanço à água: água (9) = água (4) + água (5)

Moles	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Etanol	100,00	49,10	0,50		0,50	48,60				
Acetaldeído			13,77		13,77	48,60				
H <sub>2</sub>		59,90	10,90	50,9						
H <sub>2</sub> O				1,64	699,23				700,87	
Total			65,17	52,54	713,50	97,20			700,87	

### Balanço ao acetaldeido

$$\text{Acetaldeido (2)} = \text{acetaldeido (3)} + \text{acetaldeido (6)} = 13,77 + 48,60 = 62,37 \text{ moles}$$

$$\text{Acetaldeido (1)} = \text{acetaldeido (2)} - \text{acetaldeido formado} = 62,37 - 50,90 = 11,47 \text{ moles}$$

Balanço global : Acetaldeido formado = acetaldeido(5) + acetaldeido (7)

$$50,90 = 13,77 + \text{acetaldeido (7)} \quad \rightarrow \quad \text{acetaldeido (7)} = 37,13 \text{ moles}$$

Moles	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Etanol	100,00	49,10	0,50		0,50	48,60				
Acetaldeído	11,47	62,37	13,77		13,77	48,60	37,13	11,47		
H <sub>2</sub>		59,90	10,90	50,9						
H <sub>2</sub> O				1,64	699,23				700,87	
Total	111,47		65,17	52,54	713,50	97,20			700,87	

Para completarmos os balanços de massa com o balanço ao etanol. Para isso temos de recorrer à razão de reciclagem que é indicada no enunciado,  $R_R = 0,89$

$$R_R = \frac{\text{Corrente reciclada}}{\text{Corrente fresca}}$$

Temos assim um sistema de equações:

$$R_R = 0,89 = \frac{\text{etanol (8)}}{\text{etanol (10)}}$$

$$\text{Etanol (8)} + \text{etanol (10)} = 100$$

Resolvendo-se o sistema obtem-se etanol (8) = 47,08 moles e etanol (10)

Como etanol (7) = etanol (6) – etanol (8) = 48,60 – 47,08 = 1,52 moles

Ficamos com o Balanço de massa completo.

Moles	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Etanol	100,00	49,10	0,50		0,50	48,60	1,52	47,08		42,91
Acetaldeído	11,47	62,37	13,77		13,77	48,60	37,13	11,47		
H <sub>2</sub>		59,90	10,90	50,9						
H <sub>2</sub> O				1,64	699,23				700,87	
Total	111,47	162,37	65,17	52,54	713,50	97,20	38,65	58,55	700,87	42,91

### A) Balanço de massa

Respondido com a tabela de entradas e saídas

### B ) Rendimento do processo em acetaldeído

$$\mu_{\text{processo}} = \frac{\text{acetaldeido produzido}}{\text{etanol consumido}} \times 100 = \frac{37,13}{52,91} \times 100 = 70,2\%$$