

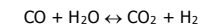


Esercitazioni del corso "FONDAMENTI DI PROCESSI CHIMICI"
Prof. Luca Lietti

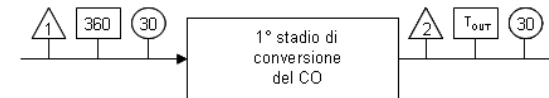
ESERCITAZIONE 6

Calcolo della composizione e della temperatura di uscita dal primo stadio del reattore di conversione del CO.

Si faccia riferimento ai gas provenienti dal Reforming II con aria: essi sono inviati al reattore di conversione del CO (reattore a due stadi), dove avviene la seguente reazione (di WGS):



Si consideri il primo stadio della conversione di CO e si supponga la reazione venga condotta in modo adiabatico. Supponendo che i gas in uscita abbiano una composizione tale per cui il rapporto tra produttoria delle pressioni parziali elevate al corrispondente coefficiente stechiometrico (K_p) e la K_{eq} per la reazione sia pari a 0.9, si chiede di determinare composizione e temperatura della corrente in uscita.



DATI e IPOTESI:

Corrente 1: $P = 30 \text{ atm}$ $T = 360^\circ\text{C}$

Corrente 2: $P = 30 \text{ atm}$ $T_{OUT} = ?$

Ipotesi: WGS: $K_p/K_{eq} = 0.9$

Miscela di gas ideali

Reattore adiabatico

$$\Delta G_{R,WGS}^0(T) = -8514 + 7.71 \cdot T \quad * \quad \text{cal/mol} \quad 600\text{K} < T < 1500\text{K}$$

*componente puro, gas ideale, 1 atm

Composizione	Portata (Nm ³ /h)	% Vol. sul secco
H ₂		56.36
N ₂		22.24
CO		12.56
CO ₂		8.27
Ar		0.27
CH ₄		0.3
H ₂ O	73411	
Σ _{secco}	120264	100.00
Totale	193675	

Si consideri inoltre l'espressione del c_p data nella Esercitazione precedente unitamente ai seguenti parametri:

Specie	a	b x 10 ³	c x 10 ⁶	d x 10 ⁹
H ₂	6.483	2.215	-3.298	1.826
N ₂	7.440	-3.24	6.400	-2.790
CO	7.373	-3.070	6.662	-3.037
CO ₂	4.728	17.54	-13.38	4.097
Ar	4.969	-0.0077	0.0123	0.000
CH ₄	4.598	12.450	2.860	-2.709
H ₂ O	7.701	0.4595	2.521	-0.859

Risoluzione

Le incognite del problema sono la composizione e la temperatura T_{out} della corrente uscente dal reattore. Per la loro determinazione occorrerà scrivere il bilancio materiale e il bilancio termico sul reattore, ipotizzando che in uscita il rapporto K_p/K_{eq} sia uguale a 0.9 e che il reattore sia adiabatico.

Si definisce il grado di avanzamento λ della reazione e si scrive la composizione del sistema in uscita in funzione di λ , assumendo come base di calcolo 100 mol/h di gas secco in ingresso

Composizione	Portata (Nm ³ /h)	n ⁱⁿ (mol/h)	n ^{out} (mol/h)
H ₂		56.36	56.36 + λ
N ₂		22.24	22.24
CO		12.56	12.56 - λ
CO ₂		8.27	8.27 + λ
Ar		0.27	0.27
CH ₄		0.3	0.30
H ₂ O	73411	61.04	61.04 - λ
Σ _{secco}	120264	100.00	100.00 + λ
Totale	193675	161.04	161.04

La quantità di H₂O in ingresso è calcolata secondo:

$$H_2O = \frac{73411}{120264} \cdot 100 = 61.04$$

Si calcolano la K_p e la K_{eq} :

$$k_p = \frac{P_{CO_2} \cdot P_{H_2}}{P_{CO} \cdot P_{H_2O}} = \frac{y_{CO_2} \cdot y_{H_2}}{y_{CO} \cdot y_{H_2O}} = \frac{n_{CO_2}^{out} \cdot n_{H_2}^{out}}{n_{CO}^{out} \cdot n_{H_2O}^{out}} = \frac{(56.36 + \lambda) \cdot (8.27 + \lambda)}{(12.56 - \lambda) \cdot (61.04 - \lambda)}$$

$$\ln k_{eq} = -\frac{\Delta G_R^0(T_{out})}{R \cdot T_{out}}$$

Si nota che deve λ essere inferiore a 12.56 mol/h perché il calcolo abbia senso fisico. La composizione della corrente in uscita è così espressa in funzione di una delle due incognite del problema. La condizione di uscita sull'approccio all'equilibrio si esprime come:

$$k_p - 0.9k_{eq} = 0 \quad (1)$$

L'equazione (1) rappresenta il primo legame fra le due incognite del problema λ e T_{out} .

La seconda relazione viene ricavata dalla risoluzione del bilancio entalpico (sistema aperto e a stazionario).
Si impone la condizione di adiabaticità:

$$\dot{H}_{IN}(\vec{n}_{IN}, T_{IN}) - \dot{H}_{OUT}(\vec{n}_{OUT}, T_{OUT}) = 0 \quad (2)$$

Si prende come riferimento le specie elementari a 298K. Pertanto:

$$\dot{H}_{IN/OUT} = \sum_{i=1}^{NC} \dot{n}_i^{in/out} \cdot \left(\Delta H_i^f(298K) + \int_{298}^{T_{IN/OUT}} c_{p,i} dT \right) \quad (3)$$

Inserendo (3) in (2) e semplificando si ottiene:

$$\sum_{i=1}^{NC} \dot{n}_i^{in} \cdot \left(\int_{298}^{T_{IN}} c_{p,i} dT \right) - \lambda \Delta H_{WGS}^R(298K) - \sum_{i=1}^{NC} \dot{n}_i^{out} \cdot \left(\int_{298}^{T_{OUT}} c_{p,i} dT \right) = 0 \quad (4)$$

L'espressione per i cp(T) è data nelle esercitazioni precedenti. L'equazione 4 rappresenta il secondo legame tra λ e T_{out} . La soluzione del sistema eq. 2 + eq. 4 permette di calcolare λ e T_{out} .

Per la base di calcolo di 100 mol/h di secco si ottiene:

$$\begin{cases} \lambda = 9.77 \text{ mol} / h \\ T_{OUT} = 701.39K \end{cases}$$