

Reator de leito fixo com catalisadores do tipo peneira na oxidação da amônia

João Eduardo Levandoski, RA: 265243

27 de novembro de 2020

Esse problema segue a abordagem padrão de resolução, onde foram feitos dois balanços. O balanço de energia para um sistema de escoamento contínuo sem trocador de calor e um balanço de massa para um leito fixo.

O BE é igual aos BEs realizados em exercícios anteriores a diferença está no balanço de massa no termo de reação. Como a reação é conduzida em temperaturas elevadas, os efeitos de transferência de massa não podem ser desprezados, sendo assim o balanço se torna a Equação 1, onde k_c e a_g podem ser encontrados por correlações fornecidas.

$$-\frac{dF_A}{dV} = k_c a_g C_A \quad (1)$$

No cálculo do balanço de energia foi considerada a variação de temperatura nos Cps utilizados, as correlações e todos as demais propriedades foram obtidas no site [NIST](#).

As Figura 1 relaciona a conversão e a 2 a temperatura ambas em função do número de peneiras utilizadas, nestes gráficos foram considerados o J_d para o caso de 1 até 3 peneiras.

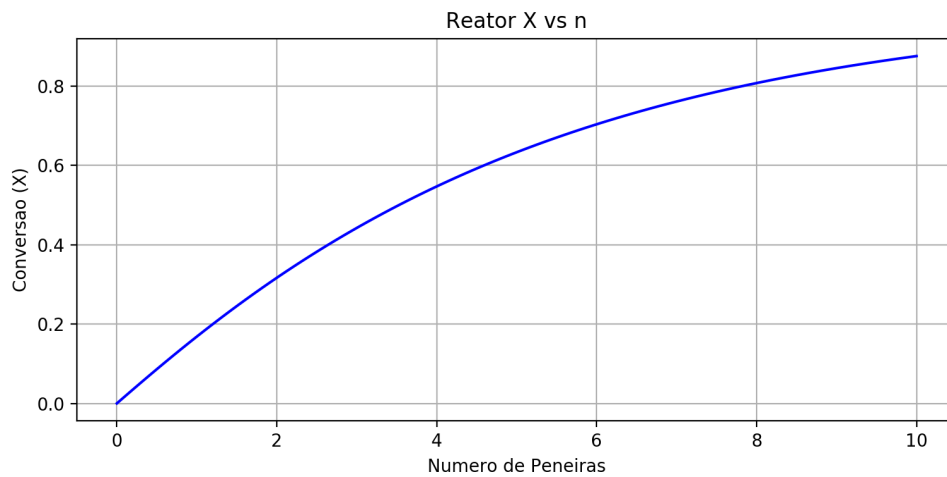


Figura 1 – Conversão versus n

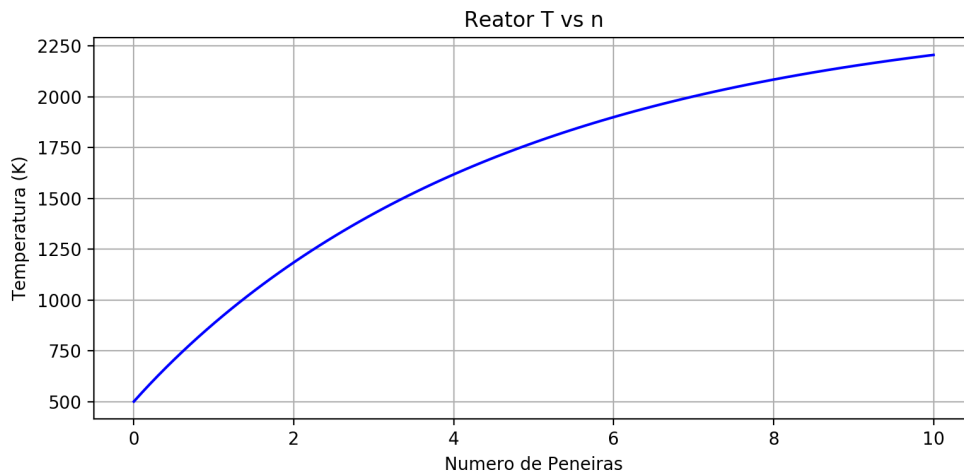


Figura 2 – Temperatura versus n

Os resultados finais foram os seguintes:

Para J_d de 1 até 3 peneiras:

- n: 1 \rightarrow x: 0,168375
- n: 4,5 \rightarrow x: 0,6
- n: 14,17 \rightarrow x: 0,95

Para J_d de 1 até 5 peneiras:

- n: 1 \rightarrow x: 0,254177
- n: 2,9579 \rightarrow x: 0,6
- n: 9,084 \rightarrow x: 0,95

Segue em anexo o algoritmo implementado em Python completo utilizado nos cálculos.

Anexos

```
1 # -*- coding: utf-8 -*-
2 """
3 Created on Wed Nov 25 13:56:33 2020
4
5 @author: levandoski
6 """
7 import numpy as np
8 import matplotlib.pyplot as plt
9 from scipy.integrate import odeint
10
11 def func_Cp(T, A, B, C, D, E):
12     """cal/mol*K"""
13     T = T/1000
14     return A + B*T + C*T**2 + D*T**3 + E/(T**2)
15
16 def func_Cpnh3(T):
17     A = 4.779071
18     B = 11.89560
19     C = -3.67950
20     D = 0.45170
21     E = 0.045214
22
23     return func_Cp(T, A, B, C, D, E)
24
25 def func_Cpo2(T):
26     A = 7.177904
27     B = 2.096791
28     C = -0.953187
29     D = 0.188411
30     E = -0.177246
31
32     return func_Cp(T, A, B, C, D, E)
33
34 def func_Cpn2(T):
35     A = 4.662006
36     B = 4.753120
37     C = -2.055099
38     D = 0.327386
39     E = 0.126100
40
41     return func_Cp(T, A, B, C, D, E)
42
43 def func_Cpno(T):
44     A = 5.696681
45     B = 3.008791
46     C = -0.272230
47     D = -0.357901
48     E = 0.051194
49
50     return func_Cp(T, A, B, C, D, E)
51
52 def func_Cph2o(T):
53     A = 7.192161
54     B = 1.633011
55     C = 1.623670
```

```

56     D = -0.605755
57     E = 0.019632
58
59     return func_Cp(T, A, B, C, D, E)
60
61
62 def Cps(T):
63     Cpnh3 = func_Cpnh3(T)
64     Cpo2 = func_Cpo2(T)
65     Cpn2 = func_Cpn2(T)
66     Cpno = func_Cpno(T)
67     Cph2o = func_Cph2o(T)
68     return Cpnh3, Cpo2, Cpn2, Cpno, Cph2o
69
70 def palha(y, v):
71     X, T = y
72     pi = np.pi
73     inch = 39.3701
74
75     D = 1 #m peneira
76     d = 0.044e-3 #m diametro do fio
77     N = 250 # mesh
78     R = 8.2057e-5 # constante gases atm
79
80
81     T0 = 500 # K
82
83     P = 2 # atm
84     Dab = 0.247 #cm^2/s
85     P1 = 1 #atm
86     T1 = 30 + 273.15 #K
87
88     fnh3 = 10 #mol/s
89     fo2 = (5/4)*fnh3*1.25 #mol/s com 25% de excesso de o2
90     fn2 = fo2*(79/21) #mol/s
91     ft = fnh3 + fo2 + fn2
92
93     ynh3 = fnh3/ft
94     yo2 = fo2/ft
95     yn2 = fn2/ft
96
97
98     minh3 = 1.7864e-5 #Pa.s
99     mio2 = 3.0420e-5 #Pa.s
100    min2 = 2.6037e-5 # Pa.s
101
102    MMno = 30.0061 #g/mol
103    MMh2o = 18.0153 #g/mol
104    MMnh3 = 17.0305 #g/mol
105    MMo2 = 31.9988 #g/mol
106    MMn2 = 28.0134 #g/mol
107
108    rhonh3 = 0.83272 #kg/m^3
109    rhoo2 = 1.5593 #kg/m^3
110    rhon2 = 1.3644 # kg/m^3
111
112
113    Cpnh3, Cpo2, Cpn2, Cpno, Cph2o = Cps(T)# Essa funcao calcula Cps em
cada T
114

```

```

115 Cpnh3 = Cpnh3/MMnh3 #cal/g.K
116 Cpo2 = Cpo2/MMo2 #cal/g.K
117 Cpn2 = Cpn2/MMn2 #cal/g.K
118 Cpno = Cpno/MMno #cal/g.K
119 Cph2o = Cph2o/MMh2o #cal/g.K
120
121 nimix = ynh3*(minh3/rhonh3) + yo2*(mio2/rhoo2) + yn2*(min2/rhon2) #m^2/
s
122
123 A = (pi*D**2)/4 # m^2
124 L = (1/(N**2) + (d*inch)**2)**(1/2) #in
125 e = 1 - (pi*L*d*inch*N**2)/4
126 V = A*2*d*(1 - e) #m^3
127
128 vazao = ft*R*T0/P #m^3/s
129
130 v0nh3 = fnh3*MMnh3/rhonh3 # m^3/s
131 v0o2 = fo2*MMo2/rhoo2 # m^3/s
132 v0n2 = fn2*MMn2/rhon2 # m^3/s
133
134 v0t = v0nh3 + v0n2 + v0o2
135
136 DAB = Dab*(P1/P)*(T/T1)**1.75 *1e-4 #m^2/s
137
138 U = vazao/A # m/s
139 Rey = U*d/(nimix*e)
140
141 Jd1_3 = 0.94/(Rey**0.717)
142 gama = (1- N*d*inch)**2 #in
143
144 Sc = nimix/DAB
145 kc3 = (Jd1_3*DAB*(Sc**(1/3))*(Rey**0.5))/d #m/s
146
147 Jd1_5 = 0.664/(((Rey/gama)**0.57)*gama)
148 kc5 = (Jd1_5*DAB*(Sc**(1/3))*(Rey**0.5))/d #m/s
149
150 Pnh3 = ynh3*P #atm
151 Pn2 = yn2*P #atm
152 Po2 = yo2*P #atm
153
154 Cnh3 = Pnh3/(R*T0) #mol/m^3
155 Cn2 = Pn2/(R*T0) #mol/m^3
156 Co2 = Po2/(R*T0) #mol/m^3
157
158 Ct = P/(R*T0) #mol/m^3
159 Ct2 = ft/vazao #mol/m^3
160
161 epsilon = (6/4 + 4/4 - 5/4 - 1)*fnh3/ft
162
163
164
165 ag = pi*L*N**2 #1/in
166
167 ag_m = ag*inch #1/m
168
169 deltaCp = (6/4*Cph2o + 4/4*Cpno - 5/4*Cpo2 - Cpnh3) #cal/g.K
170 SomaCPs = Cpnh3 + (fo2*MMo2)/(fnh3*MMnh3)*Cpo2 #cal/g.K
171
172 Fa0 = fnh3*MMnh3 # g/s
173

```

```

174     deltaHrx = -(54250 - 0.4*(T-298))/MMnh3 #cal/g de NH3
175
176     Ca = ((Cnh3*(1-1*X))/(1 + epsilon*X))*(T0/T)
177
178     ra = -kc3*ag_m*Ca*MMnh3 # g/m^3s
179
180     dXdv = -ra/Fa0 # g/m^3.s / g/s ---> 1/m^3
181
182     dTdv = ra*deltaHrx/(Fa0*(SomaCPs + X*deltaCp)) # ---> K/m^3
183
184     dydv = [dXdv, dTdv]
185     return dydv
186
187
188 pi = np.pi
189 inch = 39.3701
190
191 D = 1 #m peneira
192 d = 0.044e-3 #m diametro do fio
193 N = 250 # mesh
194 R = 8.2057e-5 # constante gases atm
195
196 A = (pi*D**2)/4 # m Area de um peneira
197 L = (1/(N**2) + (d*inch)**2)**(1/2) #in
198 e = 1 - (pi*L*d*inch*N**2)/4 #porosidade
199
200 Vol = A*2*d*(1 - e) #m # Volume de cada peneira
201
202 # Vol = d*2*A # m
203
204 numero_peneiras = 10 #pode ser trocado aqui
205
206 #y = X, T
207 y0 = [0, 500]
208 v = np.linspace(0, numero_peneiras*Vol, 100)
209
210 sol = odeint(palha, y0, v)
211 X, T = sol[:, 0], sol[:, 1]
212
213 v = v/Vol #numero de peneiras
214
215
216 plt.figure(dpi=100, figsize=(9, 4))
217 plt.plot(v, T, 'b')
218 plt.xlabel('Numero de Peneiras')
219 plt.ylabel('Temperatura (K)')
220 plt.title('Reator T vs n')
221 plt.grid()
222 plt.savefig('temp_n.png')
223 plt.show()
224
225
226 plt.figure(dpi=100, figsize=(9, 4))
227 plt.plot(v, X, 'b')
228 plt.xlabel('Numero de Peneiras')
229 plt.ylabel('Conversao (X)')
230 plt.title('Reator X vs n')
231 plt.grid()
232 plt.savefig('convert_n.png')

```

```
233 plt.show()
```

Listing 1 – Código para o cálculo