

Lista Reator Batelada Não isotérmico

1. (P13-6) A reação, $A + B \rightarrow C$, é conduzida adiabaticamente em um reator batelada de volume constante. A lei de velocidade da reação é $-r_A = k_1 C_A^{1/2} C_B^{1/2} - k_2 C_C$.

Informações adicionais:

Temperatura inicial = 100 °C

$k_{1-1}(373\text{ K}) = 2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

$k_{2-2}(373\text{ K}) = 3 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$

$E_1 = 100 \text{ kJ/mol}$

$E_2 = 150 \text{ kJ/mol}$

$C_{A0} = 0.1 \text{ mol/dm}^3$

$C_{B0} = 0.125 \text{ mol/dm}^3$

$C_{PA} = 25 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$

$C_{PB} = 25 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$

$C_{PC} = 40 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$

$\Delta H_{RX}^0(298\text{ K}) = -40000.00 \text{ J/mol A}$

$R = 8.3144 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$

Simule algumas situações e observe:

- Plote e analise a conversão, a temperatura e a concentração dos reagentes em função do tempo. O que está acontecendo neste reator? Obs: escolha um intervalo de integração. Qual é a conversão, temperatura e concentração nesse tempo?
- Variando o tempo da reação, o que você observa? É possível observar mudanças significativas? Quais?
- Poderia alterar outros parâmetros para aumentar a conversão por exemplo? Quais?
- Que tipo de reação é está? Exotérmica ou endotérmica? O que você acha que precisaria para otimizar o rendimento?
- Você utilizaria este sistema? Em quais condições?
- Existe a possibilidade de usar um trocador para melhorar o sistema? Se sim faça uma simulação.

2. (P13-9) A reação do Problema P11-3 será conduzida em um reator batelada de 10 dm³. Plote e analise a temperatura e a concentração de A, B e C em função do tempo para os seguintes casos:

- Operação adiabática
- Valores de UA de 10.000, 40.000 e 100.000 J/(min·K) considere Ta = 330K.
- Use UA = 40.000 J/(min·K) e diferentes temperaturas iniciais para o reator.

Em qual situação você desenvolveria a reação? Justifique. Existe a possibilidade de usar um outro trocador para melhorar o sistema? Se sim faça uma simulação.

P11-3. A reação elementar, irreversível, em fase líquida orgânica, $A + B \rightarrow C$, é conduzida adiabaticamente em um reator de escoamento contínuo. Uma alimentação equimolar de A e B entra a 27 °C, e a vazão volumétrica é de 2 dm³/s, com $C_{A0} = 0.1 \text{ kmol/dm}^3$.

Informações adicionais:

$k(300\text{ K}) = 0.01 \text{ dm}^3/\text{mol} \cdot \text{s}$

$$\begin{aligned}
 E &= 10.000 \text{ cal/mol} \\
 C_{PA} &= 15 \text{ cal/mol} \cdot K \\
 C_{PB} &= 15 \text{ cal/mol} \cdot K \\
 C_{PC} &= 30 \text{ cal/mol} \cdot K \\
 H_A^0(273 \text{ K}) &= -20 \text{ kcal/mol} \\
 H_B^0(273 \text{ K}) &= -15 \text{ kcal/mol} \\
 H_C^0(273 \text{ K}) &= -41 \text{ kcal/mol} \\
 R &= 1.987 \text{ cal/mol} \cdot K
 \end{aligned}$$

3. (Adaptado P11.10) A reação elementar em fase líquida, $2A \rightarrow B + C$, é conduzida adiabaticamente em um reator batelada. A entalpia da reação a 298 K é $-10.000 \text{ cal/mol A}$. A alimentação é equimolar em A e em inertes a 77°C e $C_{A0} = 4 \text{ mol/dm}^3$. Plote X como uma função do tempo. Você desenvolveria essa reação neste reator? O quê poderia sugerir como projeto? Existe a possibilidade de usar um trocador para melhorar o sistema? Se sim faça uma simulação.

Informações adicionais:

$$\begin{aligned}
 C_{PA} &= 18 \text{ cal/mol} \cdot K \\
 C_{PB} &= 9 \text{ cal/mol} \cdot K \\
 C_{PC} &= 9 \text{ cal/mol} \cdot K \\
 C_{Pinertes} &= 15 \text{ cal/mol} \cdot K \\
 k(360 \text{ K}) &= 10^{-6} \text{ dm}^3/\text{mol} \cdot \text{min} \\
 E &= 6.000 \text{ cal/mol}
 \end{aligned}$$

4. (Adaptado P12-6) A reação endotérmica elementar em fase líquida, $A + B \rightarrow 2C$, é conduzida, substancialmente até se completar, em um reator batelada, com jaqueta térmica a vapor. Plote e analise o perfil de temperatura e conversão no interior do reator com o tempo de reação, utilizando os dados que sequeem:

Volume do reator: 125 gal

Área de troca térmica da jaqueta de vapor: 10 ft^2

Vapor da jaqueta: 150 psi (temperatura de saturação 365.9°F)

Coefficiente global de troca térmica da jaqueta: $150 \text{ Btu}/(\text{h} \cdot \text{ft}^2 \cdot ^\circ\text{F})$

Potência do eixo de agitação: 25 hp

Calor de reação: $\Delta H_{RX}^0 = +20.000 \text{ Btu/lbmol A}$ (independente da temperatura)

Condições e propriedades de alimentação	Componentes		
	A	B	C
Alimentação (lbmol)	1000	1000	0
Temperatura de alimentação ($^\circ\text{F}$)	80	80	-
Calor específico ($\text{Btu}/\text{lbmol} \cdot ^\circ\text{F}$)	51.0	44.0	47.5
Massa molar	128	94	111
Massa específica (lbm/ft^3)	63.0	67.2	65.0

Dados cinéticos:

$$k_1 = 5 \text{ h}^{-1} (80 \text{ F})$$

$$T_1 = (80 + 459.69) \text{ R} = 539.69$$

$$E = 10000 \text{ Btu/lbmol}$$

$$R = 1.987 \text{ Btu}/(\text{lbmol} \cdot \text{R})$$

Em qual situação você desenvolveria a reação? Justifique. Compare as condições de operação do sistema (x, T e t) com suas sugestões.

5. (Adaptado P12-16) A reação elementar reversível em fase líquida, $A \leftrightarrow B$, é conduzida em um reator descontínuo com trocador de calor. A espécie A pura é alimentada ao reator.

Informações adicionais:

$$Volume\ do\ reator = 1000\ dm^3$$

$$k(400\ K) = 1\ min^{-1}$$

$$E/R = 20.000\ K$$

$$K_C(400\ K) = 100$$

$$C_{A0} = 1\ kmol/dm^3$$

$$C_{PA} = 40\ cal/mol \cdot K$$

$$C_{PB} = 40\ cal/mol \cdot K$$

$$UA = 3600\ cal/min \cdot K$$

$$T_a = 310\ K$$

$$T_0 = 310\ K$$

$$\Delta H_{RX} = -80.000\ cal/mol\ A$$

Plote e analise o perfil de temperatura e conversão no interior do reator com o tempo de reação. O que está acontecendo? O que você acha que está errado? Exponha suas sugestões.