

Universidade Federal de Santa Maria  
Departamento de Engenharia Química  
DEQ 1032 - Engenharia das Reações Químicas Avançadas

# **Projeto de reatores não-isotérmicos: PFR**

Profa. Dra. Gabriela Carvalho Collazzo  
([gabrielacollazzo@gmail.com](mailto:gabrielacollazzo@gmail.com))

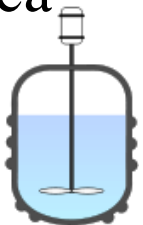
# Reator PFR

Relembrando a equação geral do balanço de energia para reatores em regime estacionário:

$$\dot{Q} - \dot{W}_S - F_{A0} \sum \theta_i \tilde{C}_{p_i} (T - T_{i0}) - F_{A0} X [\Delta H^\circ_{rx}(T_R) + \Delta \hat{C}_p (T - T_R)] = 0$$

Normalmente existe uma quantidade desprezível de trabalho realizado sobre a, ou pela, mistura de reagente, de forma que, em geral, o termo de trabalho pode ser desprezado no projeto de reator tubular.

Iremos analisar o PFR adiabático e o PFR com troca térmica.



# PFR adiabático

Para reatores tubulares adiabáticos:  $\dot{Q} = 0$ ,  $\dot{W}_S = 0$

$$\dot{Q} - \dot{W}_S - F_{A0} \sum \theta_i \tilde{C}_{p_i} (T - T_{i0}) - F_{A0} X [\Delta H^\circ_{rx}(T_R) + \Delta \hat{C}_p (T - T_R)] = 0$$

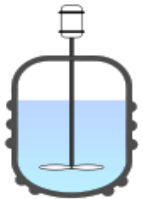
Balanco de energia se torna:

$$X[-\Delta H_{RX}(T)] = \sum \theta_i \tilde{C}_{p_i} (T - T_{i0})$$

Esta equação pode ser combinada com a equação de projeto:

$$F_{A0} \frac{dX}{dV} = -r_A(X, T)$$

Para obter a temperatura, a conversão e os perfis de concentração ao longo do comprimento do reator.



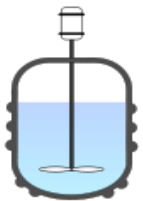
# PFR adiabático

Além da expressão da conversão:

$$X = \frac{\sum \theta_i \tilde{C}p_i (T - T_{i0})}{-\left[\Delta H^\circ_{rx}(T_R) + \Delta \hat{C}p(T - T_R)\right]}$$

Podemos rearranjar o balanço para encontrar a temperatura em função da conversão:

$$T = \frac{X[-\Delta H^\circ_{rx}(T_R)] + \sum \theta_i C p_i T_{i0} + X \Delta C p T_R}{\sum \theta_i C p_i + X \Delta C p}$$



## Exemplo 8-6

O butano normal,  $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ , deve ser isomerizado a isobutano,  $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ , em um PFR. Esta reação elementar reversível deve ser conduzida adiabaticamente em fase líquida sob alta pressão, usando essencialmente traços de um catalisador líquido que promove uma velocidade específica de reação de  $31.1 \text{ h}^{-1}$  a  $360 \text{ K}$ . A alimentação entra a  $330 \text{ K}$ .

- a) Calcule o volume de PFR necessário para processar  $100\,000 \text{ gal/dia}$  ( $163 \text{ kmol/h}$ ), a  $70\%$  de conversão, de uma mistura de  $90 \text{ mol\%}$  de  $n$ -butano e  $10 \text{ mol\%}$  de  $i$ -pentano, que é considerado inerte.
- b) Faça um gráfico e analise  $X$ ,  $X_e$ ,  $T$  e  $-r_A$  ao longo do comprimento do reator.

Additional information:

$$\Delta H_{R_X} = -6900 \text{ J/mol} \cdot \text{butane}$$

Butane

$$C_{p_{n-B}} = 141 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$C_{p_{i-B}} = 141 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

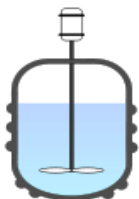
$i$ -Pentane

$$C_{p_{i-P}} = 161 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$\text{Activation energy} = 65.7 \text{ kJ/mol}$$

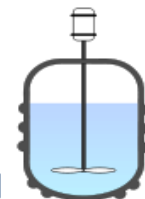
$$K_C \approx 3.03 \text{ at } 60^\circ\text{C}$$

$$C_{A0} = 9.3 \text{ g mol/dm}^3 \approx 9.3 \text{ kg mol/m}^3$$



## Resolvendo:

```
# Reação n-Butano -> i-Butano (reversível)
# A= n-Butano, B=i-Butano, I=i-pentano
# Balanço Molar PFR
 $d(X)/d(V) = -r_a / F_{a0}$ 
# condição inicial
 $X(0) = 0$ 
# Condições da reação
 $F_{T0} = 163$  # kmol/h
 $y_{a0} = 0.9$ 
 $y_{i0} = 0.1$ 
 $F_{a0} = y_{a0} * F_{T0}$ 
 $C_{a0} = 9.3$  # kmol/m3 mesma coisa 9.3 mol/dm3
# Lei de velocidade, sendo a reação elementar
 $r_a = -(k * (C_a - (C_b / K_c)))$  # kmol/m3*h
rate = -r_a
# Constante de velocidade
 $k = k_1 * \exp((E / R) * ((1 / T_1) - (1 / T)))$  # h-1
 $k_1 = 31.1$  # h-1
 $T_1 = 360$  # K
 $E = 65.7 * 10^3$  # J/mol
 $R = 8.314$  # J/mol*K
```



## Resolvendo:

# Constante de equilíbrio

$$K_c = K_{c2} * \exp((\Delta H_{RX} / R) * ((1 / T_2) - (1 / T)))$$

$$K_{c2} = 3.03$$

$$T_2 = 333 \text{ # K}$$

# Estequiometria - Reação em fase líquida

$$C_a = C_{a0} * (1 - X) \text{ # kmol/m}^3$$

$$C_b = C_{a0} * (\theta_b + ((b / a) * X)) \text{ # kmol/m}^3$$

$$\theta_b = 0$$

$$\theta_i = (0.1/0.9)$$

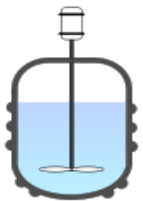
$$a = 1$$

$$b = 1$$

# atenção

# se a reação é reversível, além da conversão da reação, temos o equilíbrio, logo a conversão de equilíbrio

$$X_e = K_c / (1 + K_c) \text{ # lembrando que } X_e \text{ depende da temperatura}$$



## Resolvendo:

# Balanço Energia PFR Adiabático, é uma expressão algébrica

$$T = ((X * -1 * \Delta H_{RX}) + (\text{soma\_thetai\_cpi} * T_0) + (X * \Delta C_p * T_R)) / (\text{soma\_thetai\_cpi} + (X * \Delta C_p)) \text{ \# K}$$

# Entalpia da reação

$$\Delta H_{RX} = -6900 \text{ \# J/mol (foi informado)}$$

# termo soma\_thetao\_cpi

$$\text{soma\_thetai\_cpi} = C_{pa} + \theta_i * C_{pi} + \theta_b * C_{pb} \text{ \# J/mol}^\circ\text{K}$$

# Informados valores de CP, O calor específico depende somente da substância, não da quantidade

# de massa, pois ele é definido com a quantidade de calor necessária para elevar uma unidade de massa

# de um grau Celsius (ou Kelvin, ou Fahrenheit).

$$C_{pa} = 141 \text{ \# J/mol}^\circ\text{K}$$

$$C_{pb} = 141 \text{ \# J/mol}^\circ\text{K}$$

$$C_{pi} = 161 \text{ \# J/mol}^\circ\text{K}$$

# Cálculo do delta Cp

$$\Delta C_p = (b/a) * C_{pb} - C_{pa} \text{ \# J/mol}^\circ\text{K}$$

# Informações sobre a reação em termos de temperatura

$$T_0 = 330 \text{ \# K}$$

$$T_R = 330 \text{ \# K} * \text{valor estimado pois o } \Delta C_p \text{ será zero, e é por este mesmo motivo que assumimos}$$

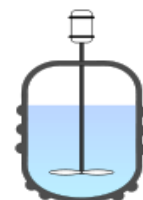
# a variação de entalpia da reação constante

# observe :  $\Delta H_{RX} = \Delta H_{RX}(T_R) + \Delta C_p * (T - T_R)$ , onde a  $T_R$  é a temperatura de referência

# intervalo de integração

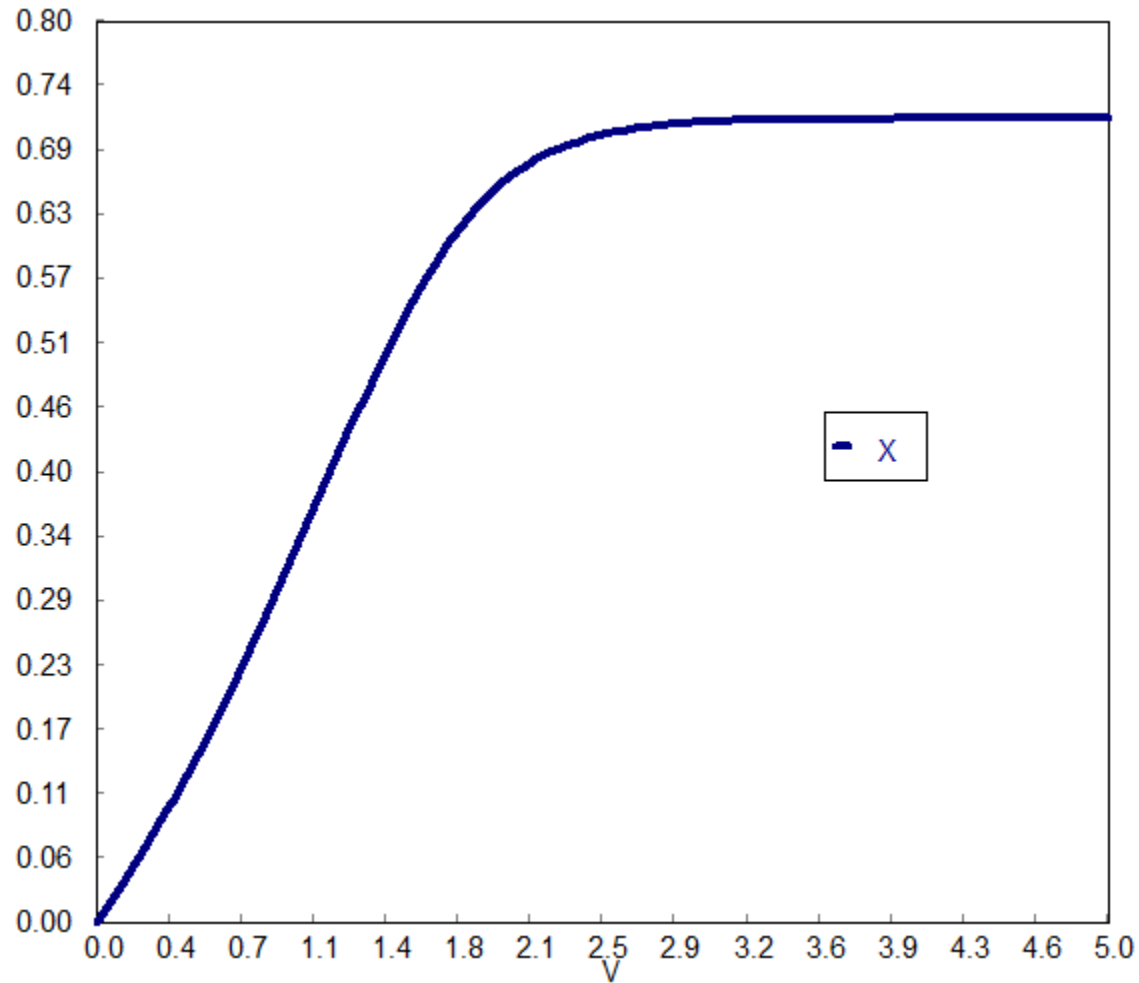
$$V(0) = 0$$

$$V(f) = 5 \text{ \# m}^3 \text{ foi um chute se não atingir a conversão desejada recomenda-se aumentar esse valor}$$

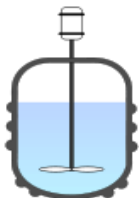




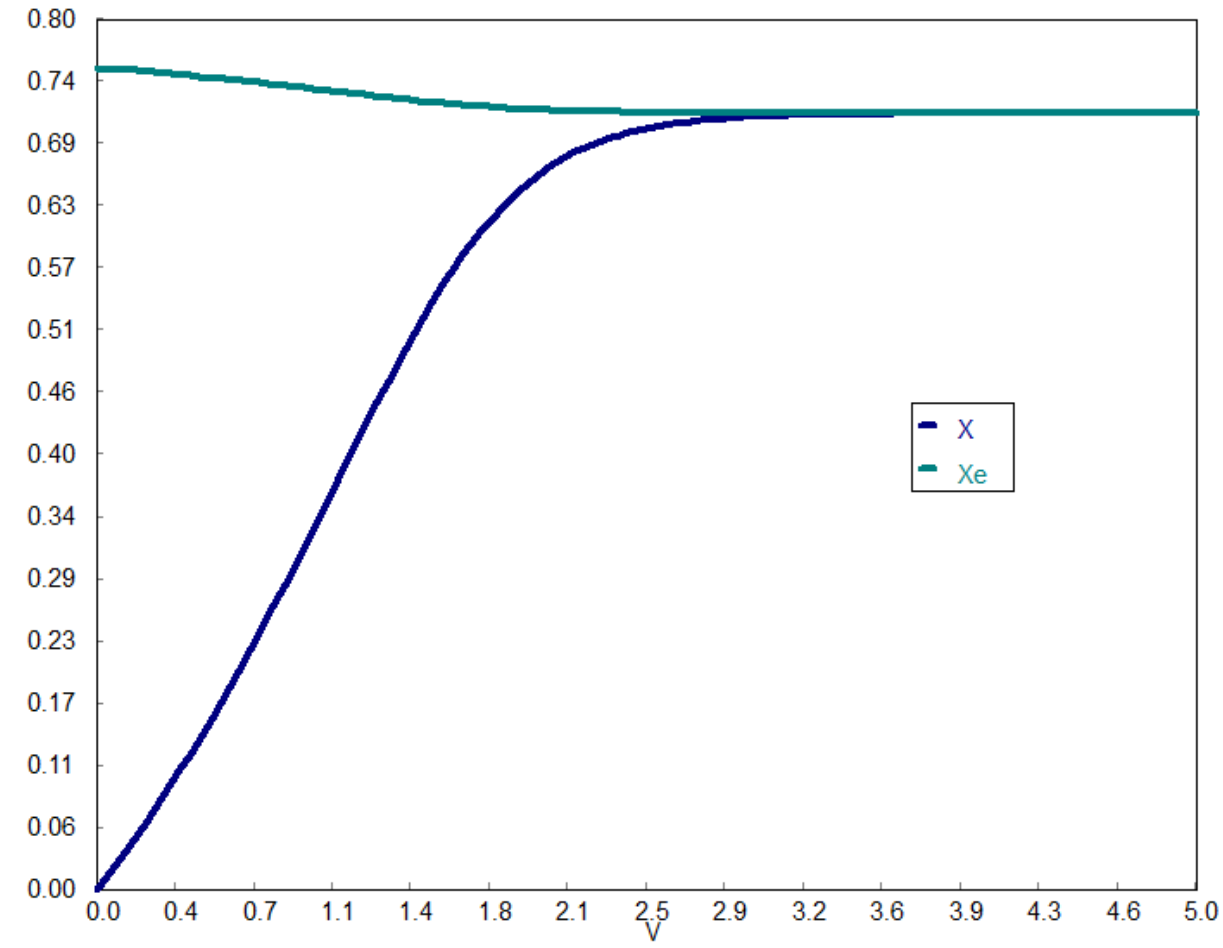
## Análise: conversão ao longo do comprimento do reator



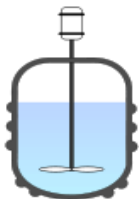
$V \sim 2.5 \text{ m}^3$  já tende ao equilíbrio,  $X=0.7$  o Volume =  $2.53 \text{ m}^3$



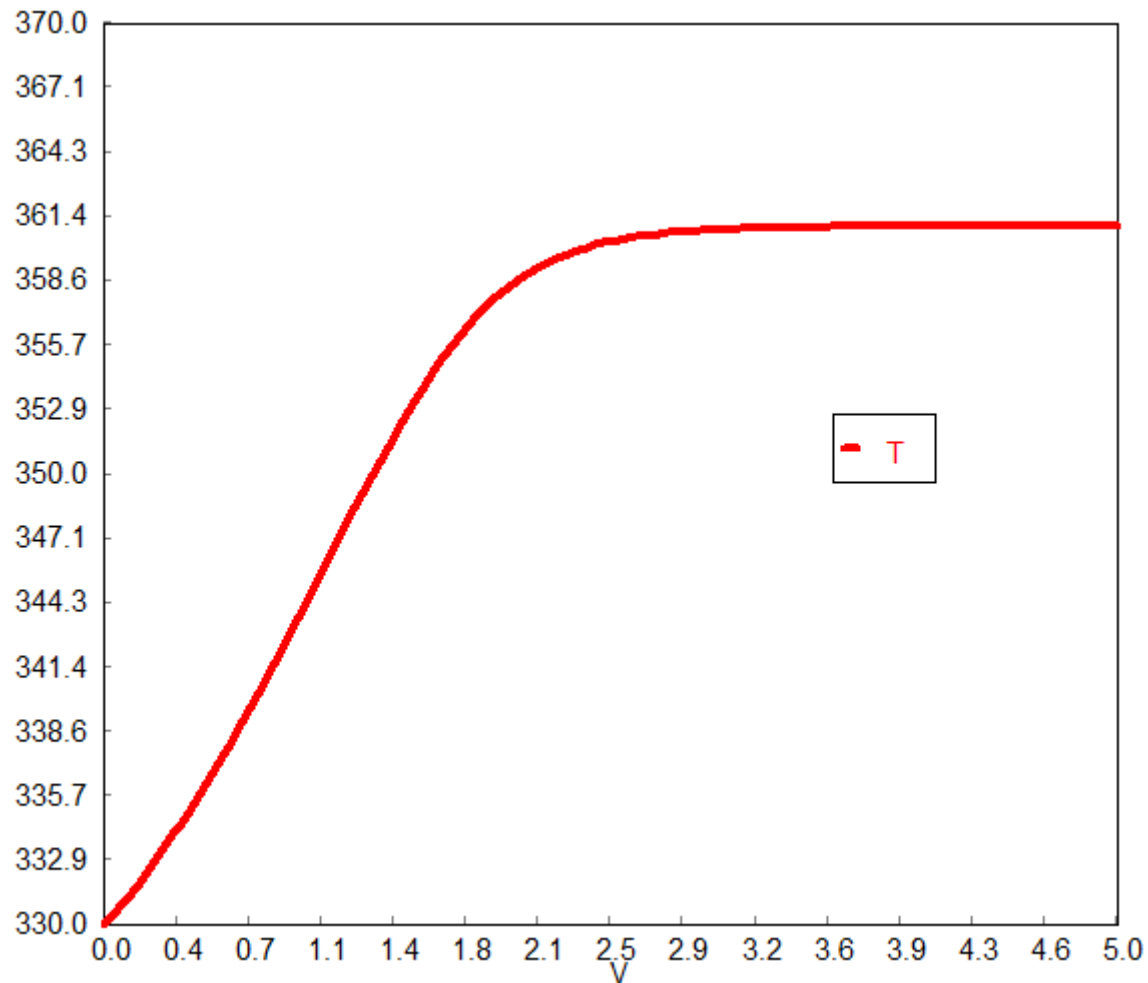
## Análise : conversão de equilíbrio ao longo do comprimento do reator



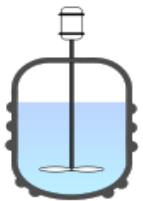
Observamos que para volume  $\sim 3 \text{ m}^3$  X e Xe se encontram, logo a reação atinge o seu máximo e isso acontece em  $X=0.71$



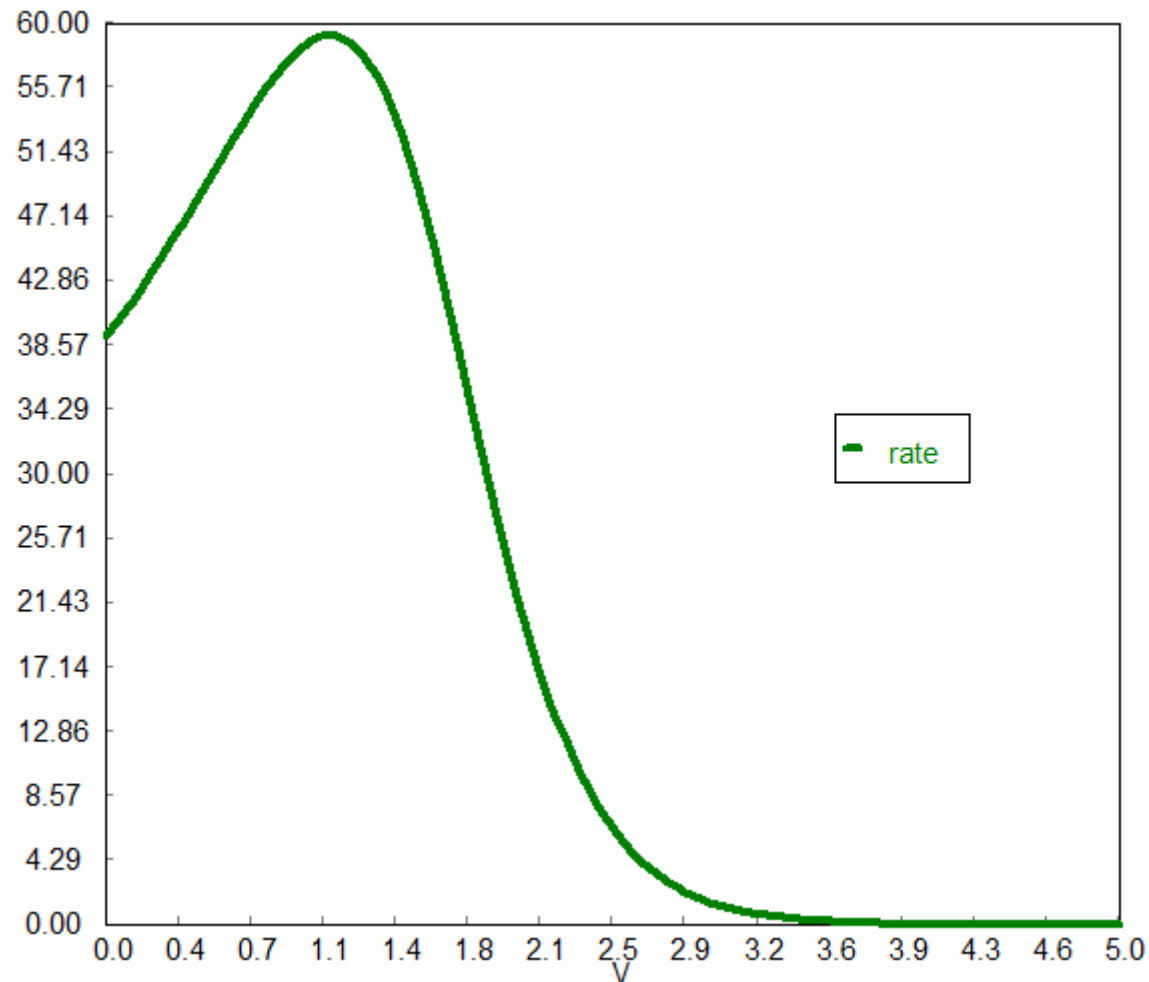
## Análise : Temperatura ao longo do comprimento do reator



A temperatura aumenta de 330 K para 360 K e atinge um equilíbrio



## Análise: Taxa de reação ao longo do comprimento do reator



A taxa de reação atinge um máximo  $\sim 59 \text{ kmol/m}^3\cdot\text{h}$  e a partir de  $3 \text{ m}^3$  já nem acontece mais nada, próxima a zero, logo não faz sentido um reator de volume maior que  $3 \text{ m}^3$ .

