

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

# **Projeto de reatores não-isotérmicos: Reator CSTR**

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

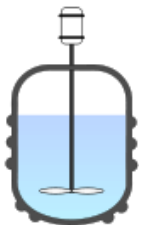
# Reatores de escoamento contínuo não isotérmico

Balanco de energia para o regime estacionário:

$$\dot{Q} - \dot{W}_S - F_{A0} \sum_{i=1}^n \int_{T_{i0}}^T \theta_i C_{p_i} dT - \left[ \Delta H^\circ_{RX}(T_R) + \int_{T_R}^T \Delta C_p dT \right] F_{A0} X = 0$$

Balanco considerando calores específicos médios ou ctes:

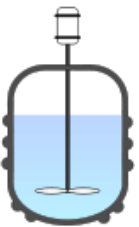
$$\dot{Q} - \dot{W}_S - [\Delta H^\circ_{RX}(T_R) + \Delta \hat{C}_p (T - T_R)] F_{A0} X = F_{A0} \sum \theta_i \tilde{C}_p (T - T_{i0})$$



## CSTR ADIABÁTICO:

- ✓ Se não houver realização de trabalho:  $W = 0$
- ✓ Operação adiabática:  $Q = 0$

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



# CSTR COM TROCA TÉRMICA

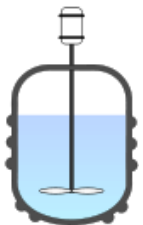
$$\dot{Q} - \dot{W}_S - [\Delta H^\circ_{RX}(T_R) + \Delta \hat{C}_p(T - T_R)]F_{A0}X = F_{A0} \sum \theta_i \tilde{C}_{p_i}(T - T_{i0})$$

$\dot{Q}$ :

O escoamento de calor para o reator é dado em muitos casos em termos do coeficiente global de transferência de calor,  $U$ , da área de troca térmica,  $A$ , e da diferença entre a temperatura ambiente,  $T_a$ , e a temperatura de reação  $T$ .

CSTR

$$\dot{Q} = UA(T_a - T)$$



# Aplicação a um CSTR

- ✓ Equação de projeto do balanço molar:

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A} \qquad V \cdot -r_A = F_{A0}X$$

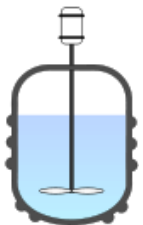
- ✓ Equação do balanço de energia:

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

- ✓ Combinando tem-se:

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

Projetar o volume do CSTR, conversão ou temperatura de operação!



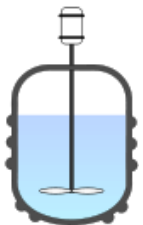
- ✓ As reações são frequentemente conduzidas adiabaticamente. Operação adiabática e trabalho de agitação desprezível.

B. energia torna-se:

$$-X[\Delta H^{\circ}_{RX}(T_R) + \Delta \hat{C}_p(T - T_R)] = \sum \theta_i \tilde{C}_{p_i}(T - T_{i0})$$

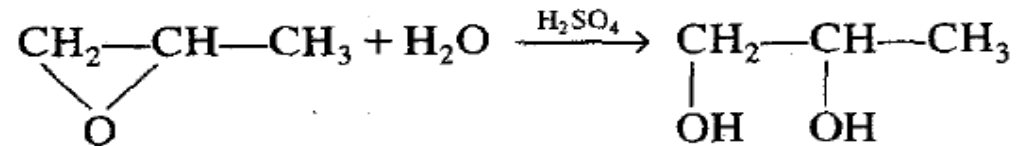
- ✓ Se necessário o CSTR é ou aquecido ou resfriado por uma camisa de aquecimento ou resfriamento, ou por uma serpentina colocada no interior do reator.

$$\frac{UA(T_a - T)}{F_{A0}} - X[\Delta H^{\circ}_{RX}(T_R) + \Delta \hat{C}_p(T - T_R)] = \sum \theta_i \tilde{C}_{p_i}(T - T_{i0})$$



## Produção de propilenoglicol

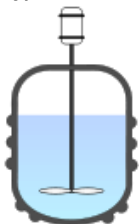
Propilenoglicol é produzido pela hidrólise de óxido de propileno:



O propilenoglicol representa cerca de 25% dos principais derivados do óxido de propileno. A reação ocorre prontamente à temperatura ambiente, quando catalisada por ácido sulfúrico.

Você é o engenheiro responsável pelo CSTR adiabático que produz propilenoglicol por este método.

Infelizmente o reator está com vazamento e você precisa substituí-lo. Você informou ao seu chefe várias vezes que o ácido sulfúrico era corrosivo e que o aço doce era um material de construção inadequado. Um CSTR, com capacidade de 300 galões e saída de líquido por transbordamento, está sem uso na fábrica. Ele possui revestimento interno de vidro e você gostaria de utilizá-lo.



Você está alimentando o reator com 2500 lb<sub>m</sub>/h (43.04 lbmol/h) de óxido de propileno.

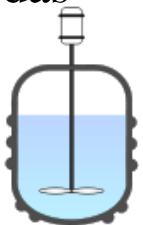
A corrente de alimentação consiste em (1) um mistura equivolumétrica de óxido de propileno (46.62 ft<sup>3</sup>/h) e metanol (46.62 ft<sup>3</sup>/h), e (2) água contendo 0.1% de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.

A vazão volumétrica de água é 233.1 ft<sup>3</sup>/h, que é 2.5 vezes a vazão volumétrica da mistura de óxido de propileno e metanol.

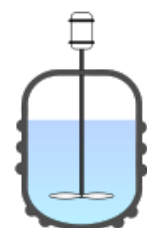
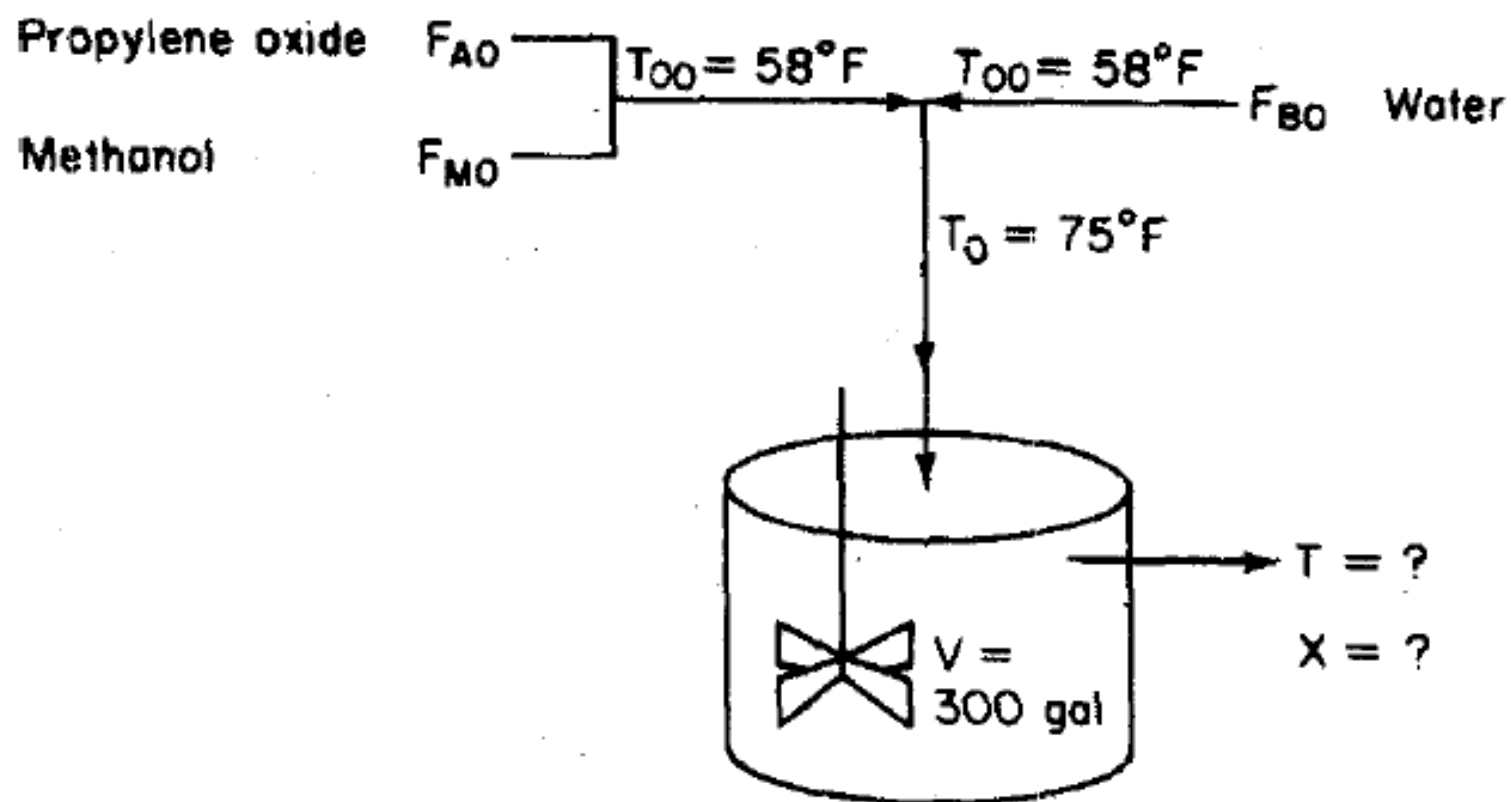
As vazões molares de alimentação correspondentes de metanol e água são 71.87 lbmol/h e 802.8 lbmol/h, respectivamente.

A água, o óxido de propileno e o metanol sofrem uma pequena redução do volume ao serem misturados (aproximadamente 3%), mas você pode desprezar esta variação nos seus cálculos.

A temperatura das correntes de alimentação é 58 °F antes da mistura, mas quando ocorre a mistura das duas correntes de alimentação há uma elevação imediata de 17 °F na temperatura, devido à entalpia da mistura. A temperatura de entrada de todas as correntes de alimentação é, portanto, tomada como 75 °F.







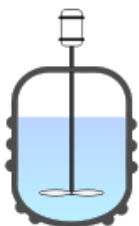
Furusawa et al. (1964)<sup>1</sup> afirmam que, sob condições semelhantes àsquelas nas quais você está operando, reação é considerada de primeira ordem em relação ao óxido e aparentemente de ordem zero em relação a água, com constante de velocidade igual  $k$ , onde  $k$ :

$$k = Ae^{\frac{-E}{RT}} = 16.96 \cdot 10^{12} \cdot e^{\frac{-32400}{RT}} = h^{-1}$$

As unidades de  $E$  são Btu/lbmol e  $T$  em °R.

Existe uma restrição importante em sua operação. O óxido de propileno tem ponto de ebulição baixo. Você percebe que não pode exceder a temperatura de operação de 125°F; do contrário você perderá muito óxido por evaporação através do sistema de exaustão de gás.

- a) Você poderia utilizar o CSTR que está inativo para substituir o reator que está vazando, se for operar de forma adiabática?
- b) Se sim, qual será a conversão do óxido de propileno a propileno glicol?



Dados:

$$C_p \text{ óxido de propileno} = 35 \text{ Btu/lbmol}\cdot^\circ\text{F}$$

$$C_p \text{ água} = 18 \text{ Btu/lbmol}\cdot^\circ\text{F}$$

$$C_p \text{ propilenoglicol} = 46 \text{ Btu/lbmol}\cdot^\circ\text{F}$$

$$C_p \text{ metanol} = 19.5 \text{ Btu/lbmol}\cdot^\circ\text{F}$$

$$H^\circ(68^\circ\text{F})_{\text{óxido de propileno}} = -66600 \text{ Btu/lbmol}$$

$$H^\circ(68^\circ\text{F})_{\text{água}} = -123000 \text{ Btu/lbmol}$$

$$H^\circ(68^\circ\text{F})_{\text{propilenoglicol}} = -226000 \text{ Btu/lbmol}$$

**Informação adicional:** caso não seja possível realizar devido a limitações de temperatura, existe no almoxarifado uma **serpentina de refrigeração**, a qual pode ser usada na hidrólise do óxido de propileno. A serpentina tem **40 ft<sup>2</sup>** de área de troca térmica, e a vazão da água de refrigeração que circula em seu interior é suficientemente elevada para manter sua temperatura constante a **85 °F**. Um valor típico para o coeficiente global de troca térmica deste tipo de serpentina é de **100 Btu/(h·ft<sup>2</sup>·°F)**. Se essa serpentina for utilizada, o reator poderá operar satisfazendo a limitação anteriormente citada de 125 °F como temperatura máxima?



- a) Você poderia utilizar o CSTR que está inativo para substituir o reator que está vazando, se for operar de forma adiabática?
- b) Se sim, qual será a conversão do óxido de propileno a propileno glicol?

### Calculated values of NLE variables

	Variable	Value	f(x)	Initial Guess
1	X	0.857327	-1.279E-13	0.8
2	T	613.6519	1.164E-09	613.

Da solução do sistema tem-se que o reator em condições adiabáticas atinge uma conversão de 0.85 e a temperatura de 613.65 R (153 °F ou 67.5 °C)

Você percebe que não pode exceder a temperatura de operação de 125°F; do contrário você perderá muito óxido por evaporação através do sistema de exaustão de gás.

Logo, em condições adiabáticas o reator irá perder muito reagente por evaporação, seria melhor simular um trocador de calor para verificar se é possível manter uma boa conversão e respeitar a limitação de temperatura



**Informação adicional:** caso não seja possível realizar devido a limitações de temperatura, existe no almoxarifado uma **serpentina de refrigeração**, a qual pode ser usada na hidrólise do óxido de propileno. A serpentina tem **40 ft<sup>2</sup>** de área de troca térmica, e a vazão da água de refrigeração que circula em seu interior é suficientemente elevada para manter sua temperatura constante a **85 °F**. Um valor típico para o coeficiente global de troca térmica deste tipo de serpentina é de **100 Btu/(h·ft<sup>2</sup>·°F)**. Se essa serpentina for utilizada, o reator poderá operar satisfazendo a limitação anteriormente citada de 125 °F como temperatura máxima?

Avaliando a serpentina que está disponível:

**Calculated values of NLE variables**

	Variable	Value	f(x)	Initial Guess
1	X	0.3630888	-2.913E-13	0.8
2	T	563.6886	2.91E-11	540.

Da solução do sistema tem-se que o reator em condições com troca térmica atinge uma conversão de 0.36 e a temperatura de 536 R (104 °F ou 40 °C). Atinge as condições de temperatura (inferior a 125°F) porém a conversão é muito baixa.

O que você acha que poderia ser alterado para que a temperatura fique dentro do limite e a conversão aumente?

