

# LOQ4002 - Reatores Químicos

## Chemical Reactors

Créditos-aula: 4

Créditos-trabalho: 0

Carga horária: 60 h

Ativação: 01/01/2024

Departamento: Engenharia Química

Curso (semestre ideal): EQD (7), EQN (8)

## Objetivos

Capacitar os alunos a calcular os parâmetros de projeto de reatores ideais, a distinguir entre um reator ideal e um real, e a compreender a influência da temperatura e pressão no projeto de reatores químicos.

*Enable students to calculate the project parameters of ideal reactors, distinguish between an ideal and a real reactor, and understand the influence of temperature and pressure on the design of chemical reactors.*

## Docente(s) Responsável(eis)

5963230 - Leandro Gonçalves de Aguiar

6310316 - Liana Alvares Rodrigues

## Programa resumido

1. Introdução a Reatores. 2. Modelos Ideais de Reatores Químicos Isotérmicos Reações Simples. 3. Reações Múltiplas em Reatores Ideais. 4. Efeitos Térmicos em Reatores Ideais. 5. Reatores Catalíticos Heterogêneos. 6. Reatores Não-Ideais

*1. Introduction to Reactors, 2. Ideal Models of Isothermal Chemical Reactors - Simple Reactions, 3. Multiple Reactions in Ideal Reactors, 4. Thermal Effects in Ideal Reactors, 5. Heterogeneous Catalytic Reactors, 6. Non-Ideal Reactors.*

## Programa

1. Introdução a Reatores: Conceitos básicos  
2. Modelos Ideais de Reatores Químicos Isotérmicos  
Reações Simples: 2.1) Equações fundamentais de projeto de reatores  
2.2) Reator tanque descontínuo (BSTR)  
2.3) Reator tanque de mistura contínuo (CSTR)  
2.4) Reator tubular de fluxo pistonado (PFR)  
2.5) Comparação de desempenho de reatores CSTR e PFR  
2.6) Reatores CSTR em cascata  
2.7) Associação mista de reatores em série: CSTR e PFR  
2.8) Reatores com reciclo  
2.9) Reações auto-catalíticas  
2.10) Reatores semi-contínuos  
3. Reações Múltiplas em Reatores Ideais  
3.1) Noções gerais: otimização, rendimento e seletividade  
3.2) Reações paralelas e reações em série  
3.3) Sistemas com reações série-paralelo: reações de múltipla substituição e reações poliméricas  
3.4) Problemas simples de otimização  
4. Efeitos Térmicos em Reatores Ideais  
4.1) Equação do balanço de energia  
4.2) Balanço de energia aplicado ao BSTR  
4.3) Balanço de energia aplicado ao CSTR  
4.4) Balanço de energia aplicado ao PFR  
5. Reatores Catalíticos Heterogêneos  
5.1) Introdução  
5.2) Efeito dos processos físicos sobre a taxa de reação  
5.2.1

Fenômenos interfases5.2.2 Fenômenos intrapartícula5.2.3 Difusão e reação em catalisadores porosos5.3) Cálculo de reatores de leito fixo5.4) Reatores trifásicos6. Reatores Não-Ideais6.1) A distribuição dos tempos de residência6.2) Modelos dos tanques contínuos em série6.3) Modelo da dispersão axial

*1. Introduction to Reactors: Basic concepts.2.Ideal Models of Isothermal Chemical Reactors - Simple Reactions: 2.1) Fundamental equations for reactor design. 2.2) Batch reactor (BSTR). 2.3) Continuous stirred-tank reactor (CSTR). 2.4) Plug-flow reactor (PFR). 2.5) Performance comparison of CSTR and PFR. 2.6) Cascade CSTR reactors. 2.7) Mixed association of reactors in series: CSTR and PFR. 2.8) Reactors with recycle. 2.9) Auto-catalytic reactions. 2.10) Semi-continuous reactors.3.Multiple Reactions in Ideal Reactors: 3.1) General concepts: optimization, yield, and selectivity. 3.2) Parallel reactions and series reactions.3.3) Systems with series-parallel reactions: multiple substitution reactions and polymerization reactions.3.4) Simple optimization problems.4.Thermal Effects in Ideal Reactors: 4.1) Energy balance equation. 4.2) Energy balance applied to BSTR. 4.3) Energy balance applied to CSTR. 4.4) Energy balance applied to PFR. 5.Heterogeneous Catalytic Reactors: 5.1) Introduction. 5.2) Effect of physical processes on reaction rate:5.2.1 - Interfacial phenomena. 5.2.2 - Intraparticle phenomena. 5.2.3 - Diffusion and reaction in porous catalysts. 5.3) Calculation of fixed-bed reactors. 5.4) Three-phase reactors.6.Non-Ideal Reactors: 6.1) Residence time distribution. 6.2) Model for continuous stirred-tanks in series. 6.3) Axial dispersion model.*

## Avaliação

**Método:** Duas provas escritas e eventual apresentação de trabalho.

**Critério:** Nota(N) = 50% Prova P1 + 50% Prova P2. Os pesos poderão ser redefinidos caso seja incorporada nota de trabalho.

**Norma de recuperação:** Média Final = (N + Prova Recuperação)/2

## Bibliografia

Bibliografia Básica :FOGLER, H. S. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2002.LEVENSPIEL, O. Chemical Reaction Engineering. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1998.HILL, C.G. An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design. New York: John Wiley&Sons, 1977.Bibliografia Complementar:SMITH, J.M. Chemical Engineering Kinetics. 3rd. ed. New York : McGraw-Hill, 1981.DENBIGH, K.; TURNER, R. Introduction to Chemical Reaction Design. Cambridge: Cambridge University Press, 1970.FROMENT, G.F.; BISCHOFF, K.B. Chemical Reactor Analysis And Design. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1990.AGUIAR, L. G. Problemas de cinética e reatores químicos. Curitiba: Appris Editora, 2023.VAN SANTEN, R.A.; Niemantsverdriet, J.W. Chemical kinetics and catalysis. New York: Plenum Press, 1995.Missen, R.W.; Mims, C.A.; Saville, B.A. Introduction to chemical reaction engineering and kinetics. New York: J. Wiley, 1999.Rothenberg, G. Catalysis: concepts and green applications. Weinheim: Wiley-VCH, 2008 Chichester.Salmi, T.O.; Mikkola, J.; Wana, J.P. Chemical reaction engineering and reactor technology. Boca Raton: CRC Press/Taylor & Francis, 2011.

## Requisitos

LOQ4003 - Cinética Química Aplicada (Requisito fraco)