### **LOQ4002 - Reatores Quimicos**

#### **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**

- 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.

### Docente(s) Responsável(eis)

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.

- 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 interfases
- 5.2.2 Fenômenos intrapartícula
- 5.2.3 Difusão e reação em catalisadores porosos
- 5.3) Cálculo de reatores de leito fixo
- 5.4) Reatores trifásicos
- 6. Reatores Não-Ideais
- 6.1) A distribuição dos tempos de residência
- 6.2) Modelos dos tanques contínuos em série
- 6.3) Modelo da dispersão axial

### Programa resumido

Duas provas escritas e eventual apresentação de trabalho.

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.

### **Programa**

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

- 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:** Média Final = (N + Prova Recuperação)/2

**Critério:** 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.; Warna, J.P. Chemical reaction engineering and reactor technology. Boca

Raton: CRC Press/Taylor & Francis, 2011.

Norma de recuperação: 5963230 - Leandro Gonçalves de Aguiar

## **Bibliografia**

6310316 - Liana Alvares Rodrigues

# Requisitos

LOQ4003 - Cinética Química Aplicada (Requisito fraco)