

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 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

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.; NIEMANTSVERDIET, 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.; Warne, J.P. Chemical reaction engineering and reactor technology. Boca Raton: CRC Press/Taylor & Francis, 2011.

Requisitos

LOQ4003 - Cinética Química Aplicada (Requisito fraco)